

**Н. В. Кленов, А.Е. Щеголев, С.В. Бакурский,
А.А. Неило, И.И. Соловьев, М.В. Терешонок,
М.Ю. Куприянов**

**Макроскопические квантовые эффекты и их
применение в электронных устройствах.
Учебное пособие в вопросах и задачах**

Москва, 2019

УДК 538.9

Н.В. Кленов, А.Е. Щеголев, С.В. Бакурский, А.А. Неило, И.И. Соловьев,
М.В. Терешонок, М.Ю. Куприянов.

Макроскопические квантовые эффекты и их применение в электронных устройствах. Учебное пособие в вопросах и задачах – М.: Брис–М, 2019.

– 168 л.: ил.

Пособие содержит изложение принципов описания ряда макроскопических квантовых эффектов в конденсированных средах. Особое внимание уделено физическим явлениям, перспективным с точки зрения их использования в устройствах современной электроники, системах приема и обработки информации. Излагаемый материал оформлен в виде последовательности задач и упражнений, причем ко всем задачам дано подробное решение, что помогает студентам разобраться в актуальных проблемах микро- и нанoeлектроники в ходе самостоятельной работы. Последовательность приведенных задач отражает аспекты современной программы курсов «Физика конденсированного состояния вещества», «Современные экспериментальные исследования основ квантовой механики», «Современные проблемы передачи, приема и обработки информации», «Современные проблемы физики наноструктур», читаемых одним из авторов.

Для студентов университетов, аспирантов и преподавателей по специальностям и направлениям подготовки: радиофизика, физика конденсированного состояния вещества, радиотехника, физика сверхпроводимости.

Рекомендовано Федеральным учебно-методическим объединением в системе высшего образования по укрупненной группе специальностей и направлений подготовки 03.00.00 – «Физика и астрономия», относящимся к области образования «Математические и естественные науки», в качестве учебного пособия для обучающихся по основным образовательным программам высшего образования уровня бакалавриата по направлению подготовки 03.03.02 – Физика и магистратуры по направлению подготовки 03.04.02 – Физика.

Рецензенты:

д.ф.-м.н, член-корр. РАН *В.Ф. Лукичев*;

д.ф.-м.н, профессор *В.В. Рязанов*.

© Коллектив авторов, 2019 г.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	4
Глава 1. Избранные задачи из физики конденсированных сред. Электрон в периодическом потенциале	6
Глава 2. Избранные задачи из физики конденсированных сред. Идеальный газ электронов, фононов	24
Фононы, квантование гармонического осциллятора	31
Глава 3. Электрон-фононное взаимодействие	41
Глава 4. Определение основного состояния ферми-газа с притяжением между частицами	51
Глава 5. Возбуждения в сверхпроводнике: преобразования Боголюбова.....	62
Глава 6. Пространственно-неоднородные задачи сверхпроводимости: уравнения Боголюбова – де Жена	76
Глава 7. Электрический ток, проводники и изоляторы. Простейшие гетероструктуры	105
Глава 8. Джозефсоновские контакты, сверхпроводящие квантовые интерферометры. Перспективные применения	135
ЛИТЕРАТУРА	165

Введение

Первые разделы таких университетских курсов, как «Квантовая механика» и «Атомная физика», посвящены основным принципам описания одной изолированной микрочастицы. Увы, практика показывает, что многие студенты даже ведущих отечественных университетов на знакомстве с этими начальными разделами и останавливаются.

А между тем последовательное квантово-механическое описание систем многих частиц имеет свои фундаментальные особенности, и на таком описании базируется огромное количество практических приложений, без которых мы уже не мыслим современную жизнь. Квантовая механика и статистическая физика давно стали «инженерными науками», но для среднестатистического современного студента даже простое знакомство в рамках специальных курсов с принципами работы современных устройств, основанными на достижениях этих дисциплин, представляет непростую задачу. Особенно тяжелой эта задача является из-за отсутствия учебно-методических пособий по данному направлению подготовки, ориентированных на помощь в самостоятельной работе по освоению материала. И данный сборник задач, упражнений и вопросов призван помочь в решении этой актуальной проблемы.

Пособие, использующее опыт, накопленный авторами при подготовке издания «Макроскопическая квантовая электроника: от основ к применениям», нацелено на последовательное продвижение:

- от основ квантовой физики конденсированного состояния вещества, зонной теории твердых тел и общих принципов описания бозе- и ферми-систем с взаимодействием,
- к анализу работы перспективных квантовых устройств (сверхпроводящих квантовых интерферометров, квантовых битов).

Особое внимание уделено описанию такого макроскопического квантового явления как сверхпроводимость – переход некоторых проводящих ток материалов в состояние со строго нулевым электрическим сопротивлением при температурах ниже определённого критического значения T_C .

Тщательно подобранные задачи с подробными решениями дают возможность студентам познакомиться с современными проблемами в физике металлов, сверхпроводников, низкоразмерных и сильно коррелированных электронных систем. Для самостоятельного разбора учащимся предназначен целый ряд упражнений, подразумевающих знакомство с современной научной литературой.

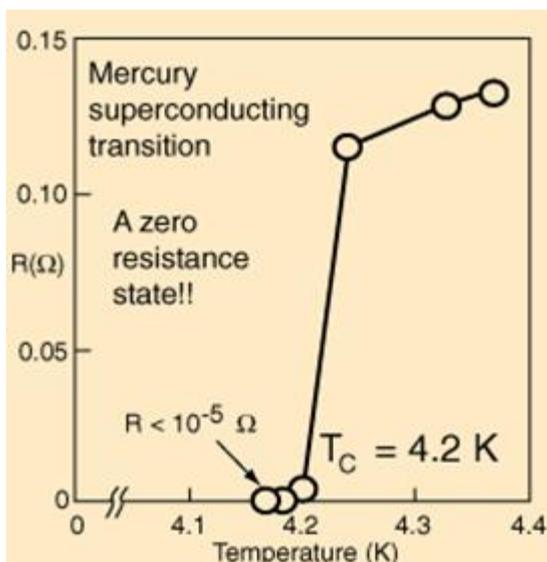


Рисунок 1 — Сопротивление образца ртути как функция температуры по материалам классической работы: Kamerlingh Onnes H., Further experiments with liquid helium. D. On the change of electric resistance of pure metals at very low temperatures, etc. V. The disappearance of the resistance of mercury // Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden. — No. 122b. — 1911.

Учебное пособие состоит из введения и восьми глав. Первая и вторая главы содержат решения ряда полезных для дальнейшего изложения модельных задач: о квантовой точке и электроны в периодическом потенциале, об идеальном электронном газе, концепции ферми-жидкости, об описании возбуждений в кристаллической решетке на языке «фононного» формализма. В третьей главе приводятся задачи на описание электрон-фононного взаимодействия с использованием любимых авторами операторов рождения и уничтожения «квазичастиц - возбуждений». Четвертая глава содержит изложение общих принципов определения основного состояния электронных систем с взаимодействием. Формализм описания возбуждений вводится в пятой главе на основании преобразований Боголюбова. Переход к анализу пространственно-неоднородных систем (в частности, на основании уравнения Боголюбова – де Жена и уравнений Горькова) составляет основное содержание главы шестой. В главе 7 разбираются задачи на описание токовых состояний в однородной среде (металл, сверхпроводник). Также исследуются особенности переноса заряда через простые гетероструктуры: туннельный контакт; контакт сверхпроводника с нормальным металлом; джозефсоновский контакт. В восьмой главе освоенный материал ложится в основу анализа физических принципов функционирования простейших используемых на практике сверхпроводниковых устройств – сверхпроводящих квантовых интерферометров.

Глава 1. Избранные задачи из физики конденсированных сред. Электрон в периодическом потенциале

Прежде чем приступить к разбору задач, посвященных описанию системы электронов и макроскопических квантовых эффектов, стоит напомнить основные положения квантовой механики одной микрочастицы и привести полезные формулы для решения такого класса задач.

1. Состояние микрочастицы задается комплексной непрерывной волновой функцией координаты и времени $\psi(\vec{r}, t)$ (т.е. элементом гильбертова пространства $|\psi\rangle$), модуль квадрата которой задает плотность вероятности обнаружить частицу в окрестности точки \vec{r} в момент времени t .

2. Динамическим переменным классической механики (координате, импульсу, энергии, моменту импульса и т.д.) взаимно однозначно ставятся в соответствие линейные эрмитовы операторы.

3. При измерении числового значения некоторой динамической переменной, которой соответствует оператор \hat{A} , с определенной вероятностью получается одно из чисел a_1, a_2, \dots , являющихся собственными значениями этого оператора.

Вероятность получения при измерении конкретного значения a_n вычисляется с помощью следующего правила. Обозначим u_n собственные функции оператора измеряемой динамической переменной. Тогда по определению собственных функций и собственных значений

$$\hat{A}u_n(\vec{r}, t) = a_n u_n(\vec{r}, t). \quad (\text{С.3.})$$

Собственные функции u_n (описывающие измеряемую переменную) образуют полную ортонормированную систему функций, по которой можно разложить волновую функцию $|\psi\rangle$ (описывающую состояние частицы):

$$|\psi\rangle = \sum_n \lambda_n u_n. \quad (\text{С.Ф.})$$

Квадрат модуля соответствующего коэффициента разложения $|\lambda_n|^2$ и определяет вероятность получить в ходе измерения величину a_n . Для описания состояний квантовых систем здесь и далее будем активно использовать формализм «бра», $|\psi\rangle$, и «кет», $\langle\varphi|$, векторов (обозначения

$$\text{Дирака, } \langle\varphi|\psi\rangle = \int_{\substack{\text{области} \\ \text{по всей}}} \varphi^* \psi d^3r).$$

Отметим, что отсюда сразу следует выражение для среднего значения наблюдаемой A с дискретным спектром собственных значений в заданном состоянии $|\psi\rangle$:

$$\langle A \rangle_\psi \equiv \sum_n a_n |\lambda_n|^2 = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle.$$

Амплитуда вероятности перехода из исходного состояния $|\psi\rangle$ в конечное состояние $|\varphi\rangle$ через произвольное промежуточное состояние задается скалярным произведением $\langle\varphi|\psi\rangle$.

4. Основное уравнение квантовой механики одной частицы, оно же нестационарное уравнение Шредингера, описывающее движение частицы массой m в произвольном потенциальном поле $U(\vec{r}, t)$, записывается в виде:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t). \quad (1)$$

Одномерное стационарное уравнение Шредингера (оно же – задача на собственные значения и собственные функции оператора полной энергии) для частицы с массой m в стационарном потенциальном поле $U(\vec{r})$ есть:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (2)$$

Записанные уравнения Шредингера легко обобщаются на случай трехмерного пространства.

Собственные функции и собственные значения x -проекции оператора импульса $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ (с точностью до нормировочного множителя) соответствуют $\psi_k(x) = \exp(ikx)$ и $p = \hbar k$, где k – волновое (действительное) число.

Собственные функции и собственные значения для оператора кинетической энергии (одномерный случай) соответствуют $\psi_E(x) = \exp(\pm ikx)$ и $E(k) = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$.

Собственные функции и значения оператора полной энергии для частицы в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме, то есть для потенциальной энергии вида

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq a/2 \\ \infty, & |x| > a/2 \end{cases}$$

могут быть определены из дифференциального уравнения в области

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0, \quad x \in \left(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right), \quad (3)$$

с граничным условием $\psi(x = \pm a/2) = 0$. Введем величину $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ($k > 0$) и запишем общее решение (3) в виде

$$\psi(x) = A \cdot \sin(kx) + B \cdot \cos(kx).$$

Граничные условия дают:

$$\begin{aligned} A \cdot \sin\left(\frac{ka}{2}\right) + B \cdot \cos\left(\frac{ka}{2}\right) &= 0 \\ -A \cdot \sin\left(\frac{ka}{2}\right) + B \cdot \cos\left(\frac{ka}{2}\right) &= 0 \end{aligned}$$

Полученная система имеет нетривиальное решение, если ее определитель обращается в ноль, т.е.

$$\begin{vmatrix} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) & \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \\ -\sin\left(\frac{ka}{2}\right) & \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \end{vmatrix} = 0,$$

откуда находим $\sin(ka) = 0$, что дает следующие «разрешенные значения» для «волнового числа» и, как следствие, импульса и энергии частицы:

$$k_n = \frac{\pi n}{a}, E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, n = 1, 2, 3, \dots \quad (4)$$

Упражнение 1.1 («Потенциальная яма»). Найти численно решения одномерного стационарного уравнения Шредингера (У.Ш.) для потенциальной ямы конечной глубины (глубину и ширину ямы считать параметрами системы).

Указания к решению. Для численного решения задачи удобно использовать, например, так называемую атомную систему единиц или систему единиц Хартри: $\hbar = 1$ и $m = 1$. Для нахождения собственных функций и собственных значений оператора Гамильтона вторую производную по координате аппроксимируют разностной схемой. Для этого вводится сетка, разбивающая числовую ось на n отрезков: $[x_1, \dots, x_n]$, $x_n = (n-1)h_x$, где n – целое число, а h_x – шаг численной сетки). Тогда

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \rightarrow \frac{\Psi(x_{j-1}) - 2\Psi(x_j) + \Psi(x_{j+1}))}{h_x^2}.$$

Решение стационарного уравнения Шредингера преобразуется в поиск собственных значений и собственных функций «разностной» трёх диагональной матрицы Гамильтониана:

$$H = \begin{bmatrix} \frac{1}{h_x^2} - V(x) & -\frac{1}{2h_x^2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2h_x^2} & \frac{1}{h_x^2} - V(x) & -\frac{1}{2h_x^2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2h_x^2} & \frac{1}{h_x^2} - V(x) & -\frac{1}{2h_x^2} & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2h_x^2} & \frac{1}{h_x^2} - V(x) \end{bmatrix}.$$

Для потенциальной ямы конечной глубины V_0 ($V_0 > 0$) с условием непрерывности волновых функций и их производных на границах ямы численное решение дает представленный на рисунке вид собственных функций, по-прежнему характеризующихся определенной четностью относительно центра потенциальной ямы. Здесь характерный масштаб энергии есть величина $E_{Char} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma_{Char}^2}$.

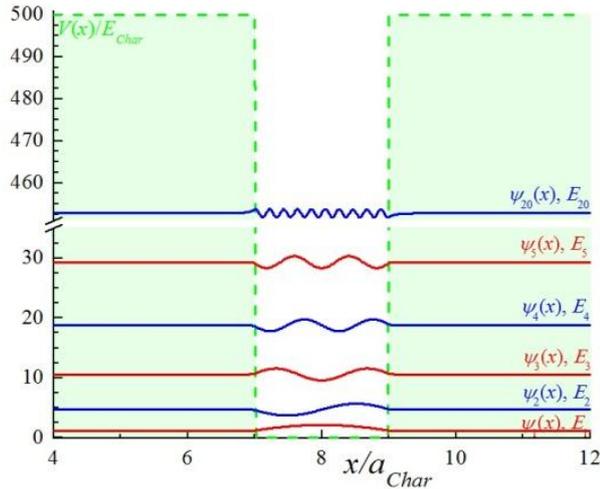


Рисунок 2 — Схематическое представление для собственных функций и собственных значений оператора Гамильтона одномерной очень глубокой потенциальной ямы. Для наглядности здесь и далее собственные функции смещены по вертикали так, чтобы «нулевой уровень» каждой совпадал с соответствующим собственным значением энергии.

Заметим, что если размер ямы составляет $a_{Char} = 2 \text{ \AA}$, то величина энергии основного состояния для находящегося в ней электрона составит порядка $E_1 \approx Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.6 \text{ эВ}$. На сегодняшний день широко исследуются нанокристаллы, размеры которых лежат в диапазоне от 2 до 10 нанометров, состоящие из $10^3 \dots 10^5$ атомов/молекул (например, Si, InP, CdSe). Наблюдаемые в эксперименте разрешенные уровни энергии для электронов в таких квантовых точках зависят от их геометрических размеров так, как и предсказывает формула (4) для трехмерного случая. Но характерный масштаб энергии для такого спектра – 10^{-4} эВ.

Если пространственный размер трехмерной (3D) потенциальной ямы достаточно велик, а расстояние между энергетическими уровнями, соответственно, достаточно мало, спектр можно считать непрерывным с плотностью состояний

$$g_{3D}(E) \equiv \frac{dn}{dE}, \quad n(k) = \frac{4}{3} k^3 \pi \left(\frac{a^3}{2\pi} \right), \quad g_{3D}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}.$$

Для случаев, когда движение электронов ограничено в одном («*quantum well*»), двух («*quantum wire*») и трех («*quantum dot*») направлениях, плотности состояний схематически

изображены на рисунке ниже. В частности, для «одномерного» (1D) варианта плотность состояний может быть для определенного диапазона энергий представлена в виде:

$$g_{1D}(E) = \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}}.$$

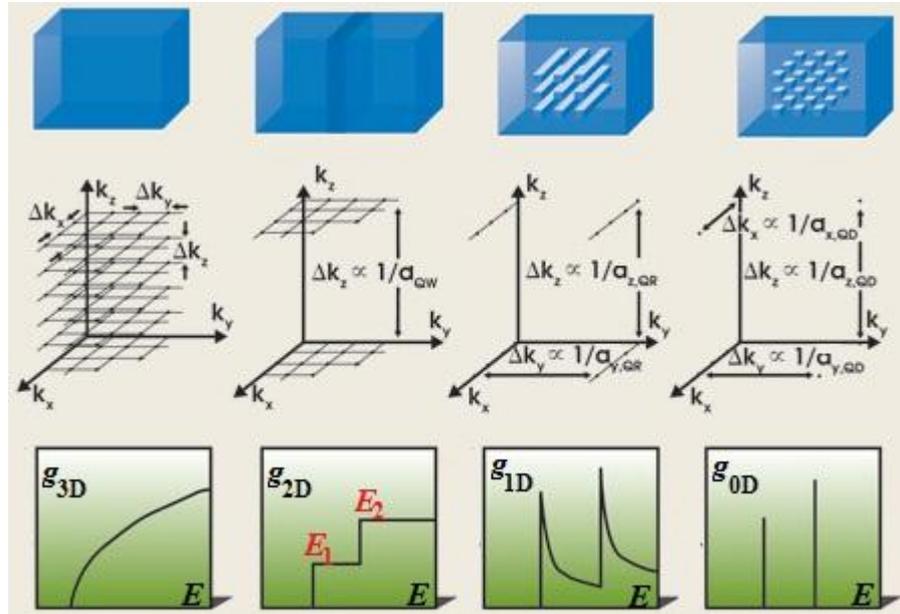


Рисунок 3 — Иллюстрации к решению задачи о плотности состояний в бесконечно глубокой яме для трехмерного (3D, движение частицы не ограничено в пространстве), двумерного (2D, движение частицы вдоль одной из координатных осей ограничено), одномерного (1D, «провод» – движение ограничено вдоль двух координатных осей) и нульмерного случаев. По материалам работы: Екимов А. И., Онущенко А. А. Квантовый размерный эффект в трехмерных микрокристаллах полупроводников // Письма в ЖЭТФ. — 1981. — Т. 34. — С. 363—366.

Нормированные собственные функции (приведенные на рисунке) характеризуются определенной четностью и имеют вид

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{a} n\right), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{\pi x}{a} n\right), & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}.$$

Наш поход в мир твердого тела начнем с обсуждения задач на собственные функции и собственные значения оператора полной энергии с различными, но периодическими зависимостями потенциальной энергии от координаты. Причем на первом вспомогательном шаге разберем задачу на собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона для системы всего с двумя потенциальными ямами, разделенными барьером конечной высоты (две связанные квантовые точки).

Выберем начало координат так, чтобы потенциальная энергия системы характеризовалась определенной четностью. Пусть ширина каждой из ям равна a , ширина барьера между ними – b .

Тогда, полагая для простоты, что выполняется условие $V_0 \gg E$, запишем для положительных значений x четные (нечетные) собственные функции оператора Гамильтона:

$$\psi_{\pm}(x) = A(\exp(\kappa x) \pm \exp(-\kappa x)), \quad 0 \leq x \leq b/2,$$

$$\psi(x) = B \sin k(a + b/2 - x), \quad b/2 \leq x \leq a + b/2.$$

Здесь $k^2 = 2mE/\hbar^2$ и $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$, а знак « \pm » соответствует четному и нечетному состояниям соответственно. Записанное решение $\psi(x)$ удовлетворяет граничному условию $\psi(x) = 0$ в точке $x = a + b/2$. Из условия непрерывности функции и ее производной в точке $x = b/2$ получим уравнение для определения энергетического спектра

$$\operatorname{tg}(ka) = -\frac{k}{\kappa} \cdot \frac{1 \pm \exp(-\kappa b)}{1 \mp \exp(-\kappa b)}.$$

Пусть выполняется и условие $2mV_0b^2/\hbar^2 \gg 1$. Тогда мы видим, что $k/\kappa \ll 1$ и $\exp(-\kappa b) \ll 1$. Поэтому для анализа правой части нужно принять величину $x = \exp(-\kappa b)$ за малый параметр, далее раскладываем выражение $\frac{1 \pm x}{1 \mp x}$ в ряд Тейлора. Тангенс в левой части полученного выше выражения отрицателен и по модулю много меньше единицы ($k/\kappa \ll 1$), поэтому для низших энергетических уровней в каждой яме в правой части равенства можно приближённо положить $k \approx \pi/a$ (более точно $k_{\pm}a = \pi - \delta k_{\pm}a$, $\delta k_{\pm}a \ll 1$). Тогда имеем

$$\operatorname{tg}(k_{\pm}a) = -\operatorname{tg}(\delta k_{\pm}a), \quad \operatorname{tg}(\delta k_{\pm}a) \approx \delta k_{\pm}a \approx \frac{\pi}{\kappa a} (1 \pm 2 \exp(-\kappa b)), \quad k_{\pm}a = \pi - \delta k_{\pm}a,$$

$$\kappa a \gg 1, \quad k_{\pm} = \sqrt{\frac{2mE_{\pm}}{\hbar^2}} \Rightarrow \delta E = E_- - E_+ = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \sqrt{\frac{32\hbar^2}{mV_0a^2}} \exp\left(-\sqrt{\frac{2mV_0b^2}{\hbar^2}}\right).$$

Мы наблюдаем расщепление уровней, причем величина щели между четным и нечетным уровнями пропорциональна экспоненте, показатель которой отрицателен:

$$\delta E \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \sqrt{\frac{32\hbar^2}{mV_0a^2}} \exp\left(-\sqrt{\frac{2mV_0b^2}{\hbar^2}}\right).$$

Причем модуль этой величины определяется корнем из высоты барьера, нормированной на характерную энергию $E_b = \frac{\hbar^2}{2mb^2}$. Аналогичным образом «расщепляются» все энергетические уровни для бесконечно глубокой потенциальной ямы шириной a : вид первых двух четных и одной нечетной собственных функций представлен на рисунке .

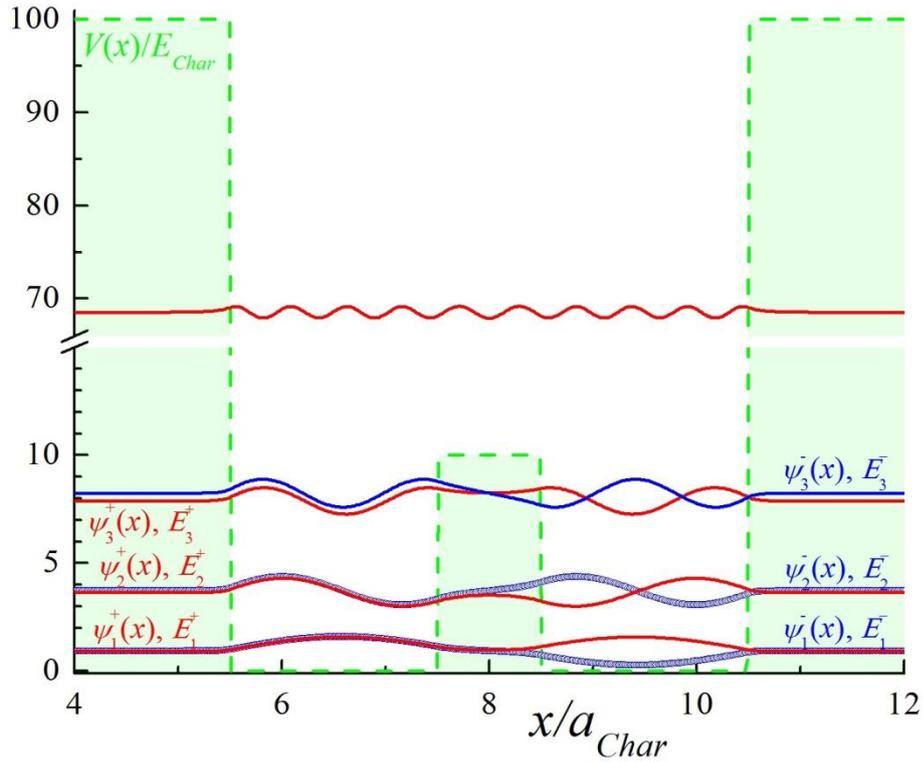


Рисунок 4 — Стационарные уровни энергии в системе с двумя потенциальными ямами, разделенными барьером конечной высоты, и соответствующие четные и нечетные собственные функции оператора Гамильтона.

Покажем, что аналогичное расщепление уровней энергии произойдет, если мы рассмотрим «взаимодействие» двух потенциальных ям другого вида. Рассмотрим одномерную дельта-образную потенциальную яму: $V(x) = \frac{\hbar^2}{m} K_0 \delta(x)$ ($K_0 < 0$). Запишем уравнение Шредингера для всего пространства за исключением малой ε -окрестности особой точки $x = 0$. Причем будем рассматривать лишь случай, когда энергия частицы $E < 0$. Тогда решения уравнения Шредингера имеют вид:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= C \exp(kx); \quad x < -\varepsilon \\ \psi_{II}(x) &= C \exp(-kx); \quad x > \varepsilon. \quad E = -\hbar^2 k^2 / 2m \end{aligned} \tag{5}$$

В ε -окрестности особой точки $x = 0$ уравнение Шредингера представимо в виде:

$$-\psi''(x) - 2|K_0| \psi(x) \delta(x) = -k^2 \psi(x).$$

Проинтегрируем это уравнение по x от $-\varepsilon$ до ε и устремим «размер» рассматриваемой окрестности к нулю:

$$-\psi'(-\varepsilon) + \psi'(\varepsilon) + 2|K_0| \psi(0) = 0. \tag{6}$$

Исходя из вида волновых функций (5), можно в начале координат ввести обозначение $\psi(0) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \psi(\varepsilon) = \psi(-\varepsilon) = C$. И тогда из уравнения (6) следует, что:

$$-kC - kC + 2|K_0|C = 0; \Rightarrow k = |K_0|.$$

Это условие и определяет положение **единственного невырожденного** уровня энергии, что может существовать в такой яме.

Рассмотрим одномерную потенциальную δ -яму: $V(x) = -V_0\delta(x)$ ($V_0 > 0$). Уравнение Шредингера для δ -потенциала имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - V_0 \delta(x) \psi(x) = E \psi(x).$$

При $x \neq 0$ и $E < 0$ у этого записанного выше уравнения существуют убывающие при $|x| \rightarrow \infty$ и хорошо известные нам решения

$$\psi(x) = A \cdot \exp(-\kappa|x|),$$

где $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}$, а A – нормировочный множитель. Проинтегрируем уравнение Шредингера в малой ε -окрестности ($\varepsilon \rightarrow 0$) около точки $x = 0$. Получаем

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - V_0 \delta(x) \psi(x) - E \psi(x) \right] dx \right\} = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left. \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow +0} - \left. \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow -0} \right) - V_0 \psi(0) = 0 \end{aligned}$$

В получившееся выражение подставляем записанное выше решение и находим κ и, как следствие, уровень энергии E :

$$-A \cdot \kappa - A \cdot \kappa = -\frac{2m}{\hbar^2} V_0 \cdot A,$$

$$\kappa = \frac{mV_0}{\hbar^2}, \quad E = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}.$$

Правильной нормировке волновой функции соответствует значение $A = \sqrt{\kappa}$. (Более подробное решение задачи можно посмотреть в работе: *Елютин, Кривченко*).

Пусть теперь имеются две такие потенциальные ямы, расположенные симметрично началу координат на расстоянии $2a$ друг от друга. Так как потенциальная энергия является чётной функцией координаты, то снова состояния можно разделить на чётные и нечётные (здесь введено обозначение $k^2 = 2m|E|/\hbar^2$):

Чётные	Нечётные
$\psi(x) = Ach(kx), x \leq a$	$\psi(x) = Ash(kx), x \leq a$
$\psi(x) = Be^{-k(x-a)}, x \geq a$	$\psi(x) = Be^{-k(x-a)}, x \geq a$
$\psi(x) = Be^{k(x+a)}, x \leq a$	$\psi(x) = -Be^{k(x+a)}, x \leq a$

Сшивая волновые функции в точке $x = a$, получим следующие трансцендентные уравнения для определения, соответственно, чётных и нечётных уровней энергии:

$$\exp(-2k_{\pm}a) = \pm \left(\frac{k}{K_0} - 1 \right).$$

Снова мы видим, как в данном случае единственный дискретный разрешенный уровень энергии в уединенной потенциальной яме превращается в два уровня в двух связанных ямах.

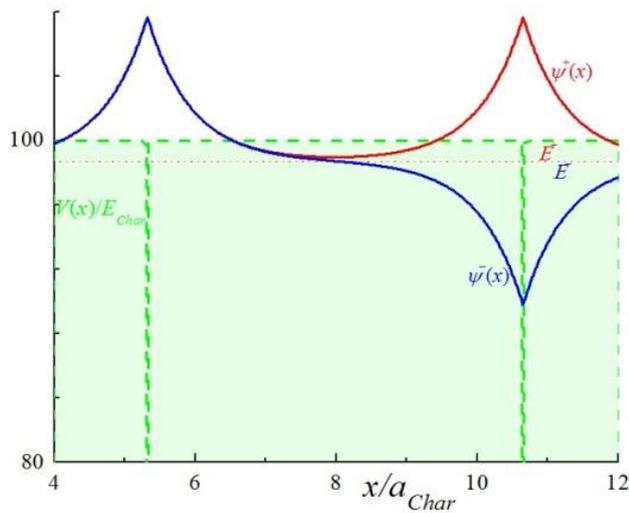


Рисунок 5 — Собственные функции оператора Гамильтона для системы с двумя дельта-образными потенциальными ямами.

Задачу о расщеплении, например, основного состояния для потенциальной энергии с двумя минимумами («двухъямный потенциал») можно рассмотреть в рамках теории возмущений, полагая таковым возмущением \hat{W} наличие ненулевой вероятности тунеллирования через барьер, разделяющий минимумы. Используя в качестве базиса волновые функции двух вырожденных состояний, локализованных в упомянутых минимумах, можно легко записать гамильтониан системы в матричной форме:

$$\hat{H}_{2w} = \begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix}$$

где E_i — собственные значения оператора полной энергии невозмущенной задачи W_{ij} — матричные элементы оператора, описывающего переход между базисными состояниями. Стационарное уравнение Шредингера с гамильтонианом сразу дает систему из двух линейных

алгебраических уравнений, и, приравнявая к нулю определитель последней, мы получаем следующую пару разрешенных значений энергии:

$$E_{\mp} = \frac{(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) \pm \sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}}{2}.$$

Эту громоздкую формулу стоит упростить при помощи вспомогательных обозначений:

$$E_{\mp} = E_m \pm \sqrt{E_D^2 + |W_{12}|^2};$$

$$E_m = \frac{(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22})}{2}; E_D = \frac{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}}{2}.$$

Поведение двух наименьших собственных значений оператора Гамильтона квантовой системы с двухямным потенциалом в зависимости от асимметрии потенциала E_D и «связи между ямами» W_{12} проиллюстрировано на рисунке 6. Отметим также, что соответствующие собственные функции оператора Гамильтона могут быть получены из базисных состояний при помощи следующего преобразования:

$$|\psi_{-}\rangle = \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\varphi/2} |\psi_L\rangle + \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi/2} |\psi_R\rangle, \quad |\psi_{+}\rangle = -\sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\varphi/2} |\psi_L\rangle + \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi/2} |\psi_R\rangle,$$

$$e^{i\varphi} = \frac{|W_{21}|}{W_{21}}, \quad \tan \vartheta = \frac{|W_{12}|}{E_D}.$$

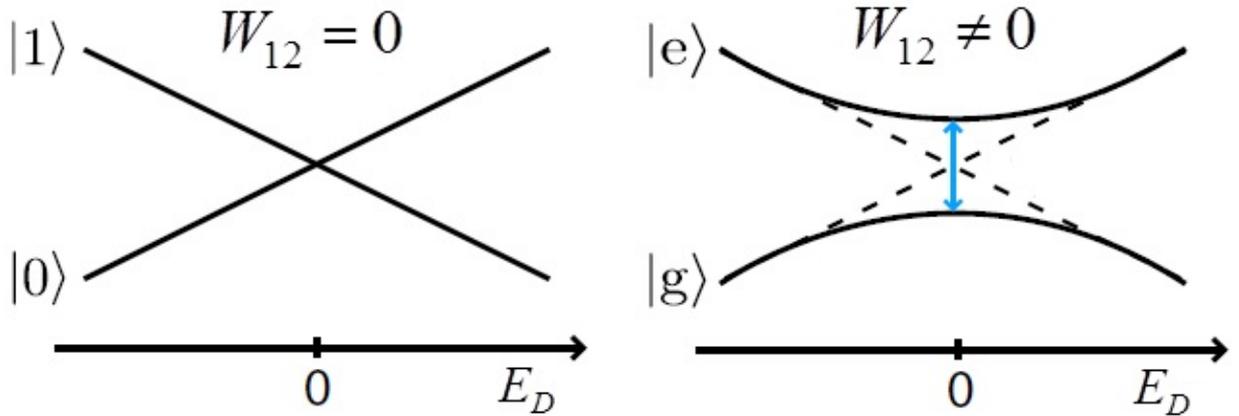


Рисунок 6 — Собственные значения оператора Гамильтона для системы с двухямной потенциальной энергией как функция её асимметрии без учета (слева) и с учетом (справа) возможности перехода между локализованными состояниями $|\psi_L\rangle \equiv |0\rangle$ и $|\psi_R\rangle \equiv |1\rangle$.

Стоит ожидать, что при переходе к рассмотрению системы, потенциальная энергия которой содержит N потенциальных ям, «исходный» (например, основной) уровень энергии испытает N «расщеплений» и превратится в целую «зону» разрешенных энергий. Попробуем исследовать принципы формирования таких зон в наиболее общем случае.

Упражнение 1.2 («Потенциальная яма (продолжение)»). Используя результаты решения *Упражнения 1.1*, найти численно решения одномерного стационарного уравнения Шредингера для потенциалов вида: две прямоугольные ямы, разделенные барьером конечной высоты, дельта-яма, две связанные дельта-ямы (найти критерий, при которых две дельта-ямы будут связанными). Параметры потенциала ввести самостоятельно и считать заданными.

Примечание. Результаты решения *Упражнения 1.2* должны соответствовать тому, что изображено на рисунках 4 и 5.

Задача 1.1 (теорема Блоха) Найти собственные функции оператора Гамильтона для электрона, находящегося в произвольном периодическом одномерном потенциале $V(x)$, если известен период этого потенциала («постоянная решетки») a .

Рассмотрим движение одного электрона в одномерном периодическом потенциале.

Для периодического одномерного потенциала с периодом a

$$V(x) = V(x + a). \quad (7)$$

Тогда стационарное уравнение Шредингера представимо в виде:

$$\psi''(x) + k^2(x)\psi(x) = 0; k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)). \quad (8)$$

Пусть $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ – два линейно независимых решения уравнения (8). Тогда любое решение этого же уравнения представимо в виде:

$$\psi(x) = C_1\psi_1(x) + C_2\psi_2(x) \quad (9)$$

Для нас с физической точки зрения особый интерес представляют периодичные в пространстве решения, причем их период должен совпадать с постоянной решетки a . Предположим, что среди решений уравнения (8) существует решение $\Phi(x)$, такое, что для любого x $\Phi(x+a) = \lambda\Phi(x)$ ($\lambda = const$). Согласно (9) $\Phi(x) = C_1\psi_1(x) + C_2\psi_2(x)$. Линейно независимые решения, образующие фундаментальную совокупность (ФСР), для простоты выбираем так, чтобы $\psi_1(0) = 1$; $\psi_1'(0) = 0$; $\psi_2(0) = 0$; $\psi_2'(0) = 1$. Из условия непрерывности функции и ее производной в точке $x=0$, получаем, что для искомого решения:

$$\Phi(x+a)|_{x=0} = C_1\psi_1(a) + C_2\psi_2(a) = \lambda\Phi(x)|_{x=0} = \lambda C_1,$$

$$\Phi'(x+a)|_{x=0} = C_1\psi_1'(a) + C_2\psi_2'(a) = \lambda\Phi'(x)|_{x=0} = \lambda C_2.$$

Эта система однородных уравнений относительно C_1 и C_2 совместна тогда и только тогда, когда определитель равен нулю:

$$\begin{vmatrix} (\psi_1(a) - \lambda) & \psi_2(a) \\ \psi_1'(a) & (\psi_2'(a) - \lambda) \end{vmatrix} = (\psi_1(a) - \lambda)(\psi_2'(a) - \lambda) - \psi_2(a)\psi_1'(a) = 0. \quad (10)$$

Введем обозначение $\phi(x) = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x)$. Тогда из уравнения (8) следует, что $\phi'(x) = 0$ и, следовательно, $\phi(x) = const; \phi(0) = \phi(a) = 1$. Значит, уравнение (10) может быть переписано в виде: $\lambda^2 - 2L\lambda + 1 = 0$, где введен зависящей от энергии электрона параметр $2L = \psi_1(a) + \psi_2'(a)$. Таким образом найдены два числа

$$\lambda_{1,2} = L \pm \sqrt{L^2 - 1}, \quad (11)$$

для которых $\Phi_{1,2}(x+a) = \lambda_{1,2}\Phi_{1,2}(x)$.

Рассмотрим общие свойства найденных решений.

1) Пусть $|L| > 1$. Тогда $\lambda_1\lambda_2 = 1$ ($\lambda_{1,2} \in \mathfrak{R}$) согласно теореме Виета, причем один корень больше единицы, другой – меньше, а $\Phi_{1,2}(x+na) = (\lambda_{1,2})^n \Phi_{1,2}(x), n \in Z$. При стремлении целого числа n к $\pm\infty$, одно из решений неограниченно возрастает, а, значит, разобранный случай не имеет физического смысла.

2) Пусть $|L| < 1$. Тогда можно ввести обозначение $L = \cos(Ka)$, где K – константа. Тогда $\lambda_{1,2} = \cos(Ka) \pm i \sin(Ka)$, и

$$\lambda_{1,2} = \exp(\pm iKa) \quad (12)$$

Исследуемые решения можно записать в виде:

$$\Phi_{1,2}(x+a) = \exp(\pm iKa)\Phi_{1,2}(x) \quad (13)$$

С другой стороны решение всегда можно записать в виде $\Phi_{1,2}(x) = \exp(\pm iKx)P_{1,2}(x)$. Просто заменив здесь x на $x+a$, получим:

$$\Phi_{1,2}(x+a) = \exp[\pm iK(x+a)]P_{1,2}(x+a).$$

Новое представление записи (13) даёт: $\Phi_{1,2}(x+a) = \exp[\pm iK(x+a)]P_{1,2}(x)$. Тогда $P_{1,2}(x+a) = P_{1,2}(x)$, период функции $P_{1,2}(x)$ совпадает с периодом потенциала.

Сделаем еще одно очень важное замечание: в случае $K = \text{Re}(K)$ мы видим, что вероятность обнаружить частицу в соседних ячейках периодической структуры будет отличаться лишь на некое комплексное число. В случае же $K = \text{Re}(K) + i \text{Im}(K), \text{Im}(K) \neq 0$ мы получаем не имеющие физического смысла решения, неограниченно возрастающие либо на «плюс-», либо на «минус-бесконечности». Физически в бесконечной потенциальной гребенке точки с координатами x и $x+a$ ничем не выделены, и вероятность обнаружить частицу в окрестностях этих точек должна быть одинаковой. Это означает, что волновые функции могут различаться лишь фазой, но не амплитудой, что и следует из выражения (13).

Теорема Блоха: собственная функция оператора Гамильтона для электрона в произвольном периодическом одномерном потенциале представляет собой плоскую волну, амплитуда которой модулирована периодической функцией с периодом a :

$$\Psi_{1,2}(x,t) = \exp[\pm i(Kx - \omega t)] P_{1,2}(x) \quad (14)$$

Отметим, что электрон в строго периодическом стационарном потенциале движется с неизменным импульсом. Все изменения импульса (процессы рассеяния) для отдельного электрона связаны с колебаниями решетки и/или нарушениями её периодической структуры (дислокациями).

Задача 1.2 Рассмотреть движение электрона в одномерной бесконечной кристаллической решетке, считая потенциальную энергию $V(x)$ равной нулю при $2na < x < (2n+1)a$ и V_0 при $(2n+1)a < x < (2n+2)a$ (n - целое). Пусть $a = 2 \times 10^{-8}$ см, $V_0 = 5$ эВ. Найти границы разрешенных и запрещенных энергетических зон.

Воспользуемся теоремой Блоха для волновых функций электрона в периодическом одномерном потенциале, доказательство которой приведено в решении предыдущей задачи.

1) Пусть $E > V_0$. Фундаментальную совокупность решений (ФСР) уравнения Шредингера $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$, учитывая требование непрерывности волновой функции и её производной, можно записать в виде $\psi_1(x) = \cos(k_1 x)$; $\psi_2(x) = \frac{1}{k_1} \sin(k_1 x)$; $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ в области, где $V(x) = 0$;

$$\psi_1(x) = \cos(k_1 a) \cos(k_2(x-a)) - \frac{k_1}{k_2} \sin(k_1 a) \sin(k_2(x-a)); \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = \frac{1}{k_1} \sin(k_1 a) \cos(k_2(x-a)) + \frac{1}{k_2} \cos(k_1 a) \sin(k_2(x-a)); \quad V(x) = V_0$$

Здесь мы ФСР в каждой из областей пространства искали как суперпозицию синусов и косинусов и учли, что $\psi_1(0) = 1$; $\psi_1'(0) = 0$; $\psi_2(0) = 0$; $\psi_2'(0) = 1$.

Тогда введенная в предыдущей задаче постоянная равна:

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} [\psi_1(2a) + \psi_2'(2a)] = \\ &= \cos(k_1 a) \cos(k_2 a) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin(k_1 a) \sin(k_2 a) \end{aligned}$$

2) Пусть $0 < E \leq V_0$. Тогда необходимо в записи для ФСР понимать обозначение k_2 как

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

и заменить все тригонометрические функции, содержащие этот зависящий от энергии параметр, на гиперболические:

$$L = \cos(k_1 a) \operatorname{ch}(k_2 a) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right) \sin(k_1 a) \operatorname{sh}(k_2 a).$$

На рисунке представлена зависимость параметра L от энергии частицы для указанных в задаче параметров потенциала. В предыдущей задаче было показано, что допустимы лишь те значения энергии E , для которых $|L| < 1$.

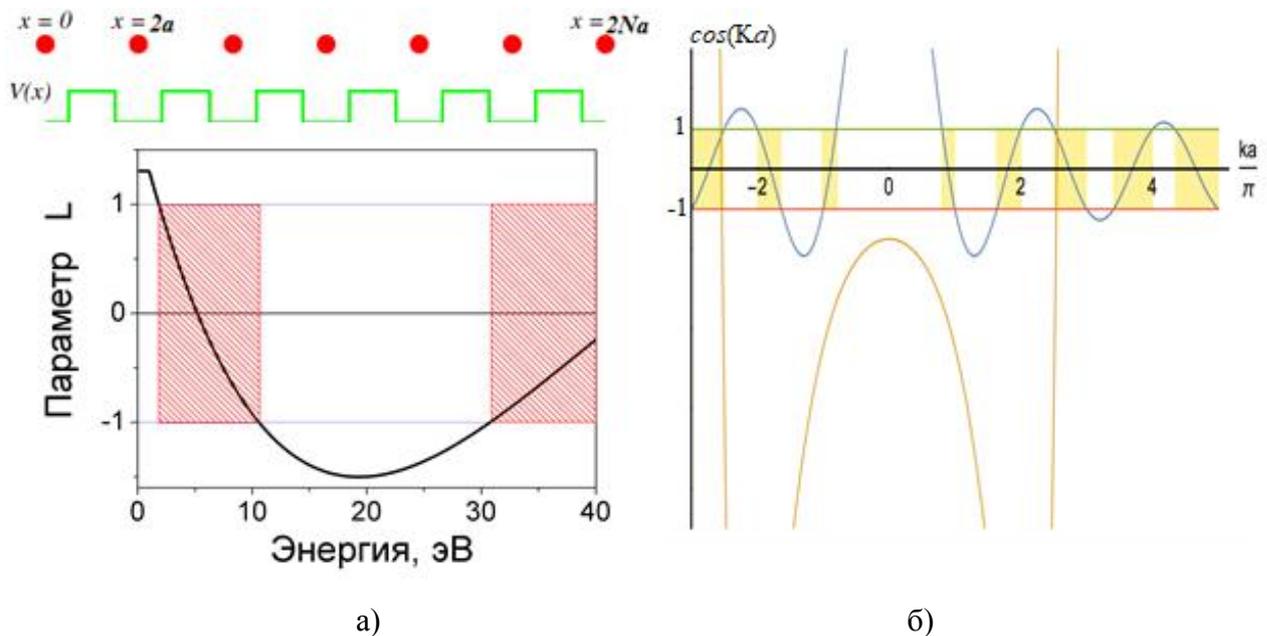


Рисунок 7 — (а) Вид потенциальной энергии и поведение параметра Ляпунова для задачи 1.2. (б) Иллюстрация к графическому решению стационарного уравнения Шредингера в задаче 1.3.

Эти разрешенные энергетические зоны, заштрихованные на рисунке, чередуются с запрещенными зонами, причем ширина разрешенных зон растет с ростом энергии.

Для дальнейшего рассмотрения систем с большим количеством электронов важно отметить, что из-за принципа Паули с точно определенной энергией E (на одном энергетическом уровне) могут существовать только два электрона (с разными значениями спинового квантового числа). Поскольку в любом твердом теле количество электронов хоть и велико, но конечно, в основном состоянии будут заполнены все уровни вплоть до некоторого значения E_F (энергия Ферми). Если для определенного вещества данное значение попадает в очередную разрешенную зону, то такой материал является хорошим проводником электрического тока, а все электроны, оказавшиеся в этой «последней» разрешенной зоне будут далее называться электронами проводимости.

Задача 1.3 («Дираковская гребенка») Найти границы разрешенных и запрещенных энергетических зон для электрона в потенциале, образованном периодической последовательностью дираковских дельта-функций $V(x) = \frac{\hbar^2}{m} V_0 \delta(x)$, расстояния между которыми равны периоду решетки a . Считать, что $V_0 > 0$.

Используя известное выражение для волновой функции свободной частицы, будем искать ФСР для области $0 < x < a$ в виде:

$$\psi_1(x) = \exp(ikx); \quad \psi_2(x) = \exp(-ikx); \quad \psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx),$$

$$\psi_1(x) = \exp(ikx); \quad \psi_2(x) = \exp(-ikx); \quad \psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx).$$

Тогда в соседней области в соответствии с теоремой Блоха решение будем искать в виде: $\psi(x) = e^{iKa} [A \cdot \exp(ik(x-a)) + B \cdot \exp(-ik(x-a))]$, $K = const$.

Используем для особой точки $x=a$ в качестве граничных условий требование непрерывности волновой функции и следующее из уравнения Шредингера условие на скачок ее производной на дельтообразном потенциале:

$$\begin{aligned} \psi(a + \varepsilon) &= \psi(a - \varepsilon), \quad \varepsilon \rightarrow 0 \\ \psi'(a + \varepsilon) &= \psi'(a - \varepsilon) + 2V_0 \psi(a) \end{aligned}$$

Граничные условия позволяют составить однородную систему уравнений относительно коэффициентов A и B . Приравняв детерминант этой системы к нулю, получим следующее уравнение, определяющее границы разрешенных и запрещенных энергетических зон:

$$\begin{aligned} \cos(Ka) &= \cos(ka) + \frac{V_0}{k} \sin(ka), \quad |\cos(Ka)| < 1 \\ \cos(Ka) &= \sqrt{1 + \frac{(V_0 a)^2}{(ka)^2}} \cos \left\{ ka - \arctg \left(\frac{V_0 a}{ka} \right) \right\} \end{aligned}$$

Графическое решение задачи для случая $|V_0|a = 8$ представлено на рисунке, где заштрихованы первые разрешенные энергетические зоны. Видно, что с ростом энергии электрона размер разрешенных зон растет, и в пределе электрон будет вести себя подобно свободной частице.

Упражнение 1.3 Самостоятельно получите трансцендентное уравнение для определения *единственной* при отрицательных энергиях энергетической зоны ($V_0 < 0$).

Задача 1.4 Найти разрешенные значения энергии для электрона в одномерной кристаллической решетке с периодом a в приближении «сильной связи». Найти закон дисперсии для такого электрона.

Пусть в узлах решетки расположены неподвижные, положительно заряженные ионы, создающие для рассматриваемого электрона строго периодический потенциал. Будем считать, что без учета возможности перехода электрона от одного иона решетки к другому его «разрешенное значение энергии» E есть собственное значение для оператора полной энергии в изолированном атоме E_a . Этому собственному значению соответствует бесконечно много различных собственных функций оператора полной энергии электрона в одномерной кристаллической решетке, нумеруемых номером иона n , в окрестности которого локализован единственный электрон. Обозначим n -ую собственную функцию как $|n\rangle$; $n = \dots - 2; -1; 0; 1; 2 \dots$; $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$, где δ – дельта-символ Кронекера. Пусть \hat{H} – полный гамильтониан системы с учетом взаимодействия электрона с ближайшими соседними атомами: $\langle n|\hat{H}|n\rangle = E_a$. Если же учесть, что *электрон может покинуть n -ый ион*, перебравшись к одному из ближайших соседей (вспомним о возможности туннелирования через потенциальный барьер), то придется положить отличными от нуля следующие матричные элементы: $\langle n\pm 1|\hat{H}|n\rangle = \langle n|\hat{H}|n\pm 1\rangle = -A$. Здесь отличная от нуля постоянная A (имеющая размерность энергии) положительна, все прочие матричные элементы в рамках рассматриваемого приближения равны нулю. В принципе, такой последовательный «хопинг» электрона только на соседний «узел» решетки не является единственно возможным процессом: возможно туннелирование и на более далеко отстоящие от места локализации электрона узлы. Однако, чем отдаленнее конечный узел, тем менее вероятен такой процесс, а, следовательно, и меньше отвечающее ему расщепление уровня энергии.

Для того, чтобы определить энергию электрона с учетом возможного туннелирования через потенциальный барьер, разделяющий соседние ионы в решетке, будем решать традиционное стационарное уравнение Шредингера:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (15)$$

Причем оператор полной энергии в матричном виде (в базисе собственных функций невозмущенной задачи) выглядит следующим образом:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_a & -A & 0 & \dots & 0 \\ -A & E_a & -A & \dots & 0 \\ 0 & -A & E_a & & 0 & \dots \\ \dots & & & \dots & -A & \\ 0 & 0 & 0 & -A & E_a \\ & & \dots & & & \dots \end{pmatrix}.$$

Представляя искомую собственную функцию в виде разложения по базису функций $|n\rangle$, получим:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n c_n |n\rangle; \quad \hat{H} \sum_n c_n |n\rangle = E \sum_n c_n |n\rangle, \\ \sum_n c_n \langle n' | \hat{H} | n \rangle &= E c_{n'}. \end{aligned} \quad (16)$$

В выражении (16) отличны от нуля только матричные элементы для $n = n'; n' \pm 1$. Следовательно, получаем уравнение:

$$E_a c_{n'} - A c_{n'-1} - A c_{n'+1} = E c_{n'}. \quad (17)$$

Далее будем искать решение этого дифференциального уравнения в виде плоской волны и учтем дискретность рассматриваемой системы:

$$\begin{aligned} c_n(k) &= \exp(ikna); \\ E(k) &= E_a - A c_{n-1} - A c_{n+1} = E_a - 2A \cos(ka). \end{aligned} \quad (18)$$

Вид искомого закона дисперсии $E(k)$ представлен на рисунке . Видно, что при сделанных предположениях

- 1) для каждого значения k соответствующая собственная функция оператора Гамильтона имеет вид, позволяющий проводить сравнения с волновой функцией свободной частицы с импульсом $\hbar k$:

$$|\psi(k)\rangle = \sum_n c_n^{(k)} |n\rangle = \sum_n e^{ikna} |n\rangle;$$

- 2) энергия электрона в кристалле ниже, чем в изолированном атоме.

При изменении k в пределах от $-\frac{\pi}{a}$ до $\frac{\pi}{a}$ (эту область значений k называют первой зоной Бриллюэна) функция $E(k)$ принимает все допустимые значения в диапазоне от E_a+2A до E_a-2A . Таким образом, при переходе от изолированного атома к периодической кристаллической решетке единственный (бесконечное число раз вырожденный) энергетический уровень для электрона превращается в разрешенную энергетическую зону. **Внутри зоны энергия электрона периодически зависит от волнового вектора k** (а значит и от импульса электрона), при этом ширина зоны (равная $4A$) определяется вероятностью перехода электрона от одного иона к другому. Чем выше расположен исходный уровень изолированного атома E_a , породивший зону, тем больше вероятность туннелирования через разделяющий соседние ионы потенциальный барьер и тем шире разрешенная энергетическая зона. Различные энергетические уровни изолированного атома переходят, как показано на рисунке к этой задаче, в различные разрешенные зоны (обратите внимание, как вторая энергетическая зона может

быть преобразована при рассмотрении второй зоны Бриллюэна и сравните получившийся результат с квадратичной функцией – законом дисперсии свободной частицы).

Наконец, отметим, что полученный закон дисперсии $E(k)$ вблизи своего минимума близок к хорошо известному закону дисперсии для свободного электрона: $E_{св}(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$. Вблизи же точек $k = \pm \pi/a$ функция $E(k)$ существенно отличается от параболической, что с формальной точки зрения можно истолковать следующим образом: **эффективная масса не совпадает с массой покоя и зависит от волнового числа k** . Так, вблизи дна первой зоны Бриллюэна эффективная масса близка к массе покоя электрона, при приближении же к границам зоны она заметно растет. Более того, эффективные массы в середине и на краю зоны имеют противоположные знаки: это было продемонстрировано в экспериментах по изучению эффекта Холла, когда перенос заряда электронами на краю зоны не отличался от переноса положительно заряженными частицами. В трехмерном кристалле в общем случае в качестве эффективной массы используют тензор.

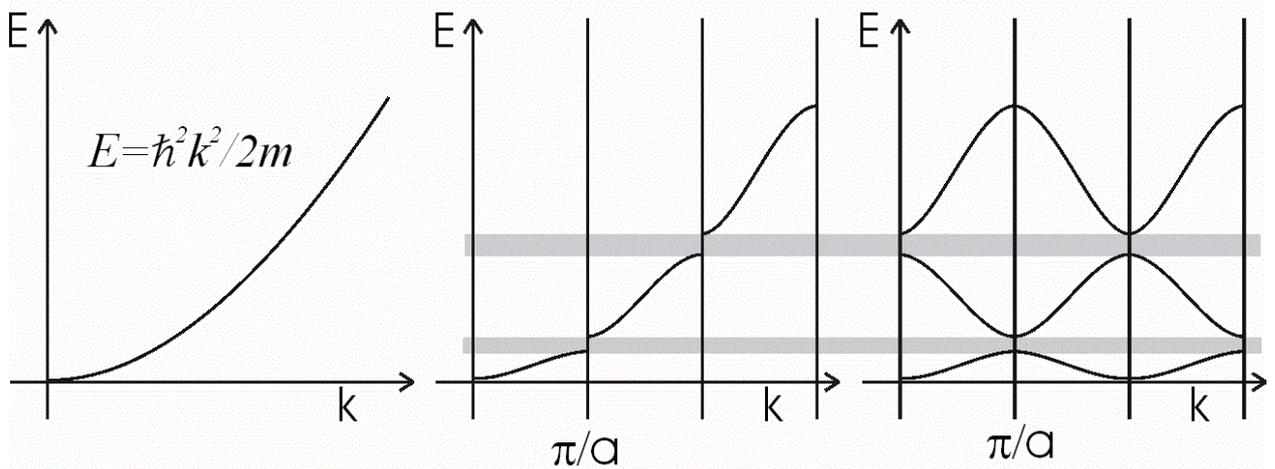


Рисунок 8 — Закон дисперсии для свободного электрона и электрона в одномерном кристалле в приближении сильной связи с иллюстрацией к формированию зонной структуры спектра в рамках этой модели.

Подробно проблемы этой главы разобраны в работах: *Аладышкин, Блохинцев, Брандт (2005), Дубровский, Екимов, Займан, Киттель (1967), Киттель (1978), Миронова, Попов, Фейнман, <http://ph.qmul.ac.uk/~anthony/spfm/21.html>*.

Глава 2. Избранные задачи из физики конденсированных сред. Идеальный газ электронов, фононов

Переходя к обсуждению так называемых «многочастичных» задач сформулируем крайне важное для последующего изложения *приближение Борна – Оппенгеймера*: в твердом теле можно выделить две подсистемы – электронную («легкую») и ионную («тяжелую»), причем движение электронов происходит с существенно большими характерными скоростями, чем движение ионов. Поэтому приближенно можно считать, что электронная подсистема всегда успевает подстроиться под «мгновенное» положение ядер. И начать рассмотрение свойств электронной подсистемы разумно с обсуждения простейшей модели «идеального электронного газа». В рамках этой модели, как следует из её названия, мы пренебрегаем кулоновским взаимодействием между электронами проводимости, что возможно благодаря экранированию их заряда в конденсированных средах на расстояниях свыше 1 нм. Характерное расстояние, на котором происходит экранировка – радиус Томаса-Ферми, $r_{TF} \sim \sqrt{e^2 N(0)}$ – зависит от концентрации электронов в металле на уровне Ферми $N(0)$ (и составляет для меди порядка 0.55 \AA).

Прежде чем перейти к рассмотрению даже самых простых задач о системах большого числа частиц необходимо ввести понятие частицы с определенным *спином*. Под спином s мы будем понимать собственный момент импульса микрочастиц, имеющий квантовую природу и не связанный с перемещением частицы как целого. Величина этого момента, измеренная в единицах постоянной Планка \hbar , равна $\sqrt{s(s+1)}$; его проекция на выбранную ось – m_s . Спиновое квантовое число s может принимать либо неотрицательное целочисленное значение (такие частицы мы будем называть *бозонами*), либо неотрицательное полуцелое значение (такие частицы – а к их числу относятся и электроны – мы будем называть *фермионами*). Магнитное спиновое квантовое число может принимать значения в диапазоне $-s; -s+1; \dots; s$. В частности для электрона $s = \frac{1}{2}$, $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Волновая функция для электрона, обладающего спином, задается уже столбцом непрерывных волновых функций координаты и времени. В этом столбце каждый элемент соответствует определенному значению m_s и часто (когда спин-орбитальное взаимодействие можно считать достаточно малым) может быть представлен как произведение координатной и спиновой частей:

$$\begin{pmatrix} \psi_{m_s=+\frac{1}{2}}(\vec{r}, t) \\ \psi_{m_s=-\frac{1}{2}}(\vec{r}, t) \end{pmatrix} = \psi(\vec{r}, t) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

Отметим, что, например, оператор проекции спина на выбранную ось удобно выписать в матричном виде. Действительно, любому линейному эрмитовому оператору \hat{F} с дискретным спектром можно взаимно однозначно поставить в соответствие матрицу F_{ik} в базисе $\{e_j\}$, в которой элемент $F_{ik} = \langle e_i | \hat{F} e_k \rangle$. Выбирая в качестве такого базиса полный ортонормированный набор собственных функций оператора, мы естественным образом приходим к его матричному представлению в виде диагональной матрицы, элементами которой являются соответствующие собственные значения. Так как для оператора проекции спина на выбранную ось OZ таких собственных значений всего два, то и соответствующая матрица будет иметь вид:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z.$$

Собственные функции такого оператора (естественно, образующие базис в пространстве столбцов) есть:

$$\chi_{ms=+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv (\uparrow); \quad \chi_{ms=-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv (\downarrow)$$

Из принципа тождественности – в замкнутой системе для одинаковых (то есть обладающих одинаковыми свойствами: массой, зарядом, спином и т. п.) частиц реализуются только такие квантовые состояния, которые не меняются при перестановке местами двух любых частиц – вытекает наличие определенной симметрии волновой функции системы частиц относительно операции перестановки. В частности, для ферми-частиц (или фермионов), к которым относятся и электроны, волновая функция обязана менять знак после любой перестановки пары частиц. Можно показать, что из этого свойства волновой функции следует **принцип Паули: две частицы с полуцелым спином не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии.**

Учет принципа Паули кардинальным образом влияет на свойства систем ферми-частиц. Так, выше, в комментариях к **задаче 1.2** уже отмечалось, что основным состоянием идеального газа электронов (фермионов) в импульсном пространстве будет полностью заполненная сфера в пространстве волновых чисел k (*сфера Ферми*), параметры которой легко оценить из самых общих соображений.

Задача 2.1 Оценить энергию Ферми, радиус сферы Ферми и скорость Ферми для идеального электронного газа (число частиц N и занимаемый системой объем L^3 известны). Оценить плотность состояний для идеального электронного газа.

Согласно принципу Паули, каждый элемент объема в k -пространстве внутри изображенной на рисунке сферы Ферми (радиус которой, конечно, зависит от энергии Ферми) может быть занят всего двумя электронами. Здесь стоит вспомнить, что каждому элементу

объема $(2\pi/L)^3$ в k -пространстве – размер объема определяем из соотношения неопределенностей – соответствует определенная волновая функция, к примеру, плоская волна, если мы говорим о идеальном электронном газе в пустоте, или блоховская волна, если речь об аналогичной системе в твердом теле. Следовательно, всего внутри сферы радиуса k_F мы найдем N электронов:

$$N = 2 \cdot \left(\frac{4\pi k_F^3}{3} \right) \cdot \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3,$$

(другими словами $n_{\pm} = \frac{P_F^3}{6\pi^2 \hbar^3}$ – число электронов в единице объема с заданной проекцией спина), откуда для волнового вектора Ферми k_F получаем

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} = \left(\frac{3\pi^2}{\Omega} \right)^{1/3} = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad (19)$$

где $\Omega = \frac{1}{n} = \frac{L^3}{N}$ – объем, приходящийся на один электрон. Нередко этот объем представляют в

виде сферы радиуса $r_s = \left(\frac{3\Omega}{4\pi} \right)^{1/3} = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3}$ и тогда

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2}{\frac{4}{3}\pi r_s^3} \right)^{1/3} = \frac{1}{r_s} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} = \frac{1.92}{r_s} = 3.63 \cdot \left(\frac{r_s}{a_0} \right)^{-1} \frac{1}{\text{Å}}, \quad (20)$$

где $a_0 = \hbar^2/m_e^2 = 0.529 \cdot 10^{-8}$ см – хорошо известный из курса атомной физики боровский радиус. Тогда для характерной скорости Ферми электронов в твердом теле имеем:

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \frac{\hbar}{m} \left(\frac{3\pi^2}{\Omega} \right)^{1/3} = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3} = 4.2 \cdot 10^8 \times \left(\frac{r_s}{a_0} \right)^{-1} \frac{\text{см}}{\text{с}}. \quad (21)$$

Так как $a_0 = \hbar^2/m_e^2$, энергию Ферми удобно связать с характерными единицами энергии из атомного мира:

$$E_F = \frac{(\hbar k_F)^2}{2m} = \left(\frac{e^2}{2a_0} \right) \cdot (k_F a_0)^2 = Ry \cdot (k_F a_0)^2, \quad (22)$$

где $Ry = e^2/2a_0 = 13.6$ эВ – это постоянная Ридберга, т.е. энергия связи электрона и ядра в основном состоянии атома водорода.

Наконец, из выражения (19) в решении этой простой, но крайне важной задачи оценим *плотность состояний*, то есть число одноэлектронных разрешенных состояний на единичный интервал энергии в единице объема:

$$g(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot E^{1/2}. \quad (23)$$

Или в другом виде эту плотность состояний (англ. – DOS), представленную на рисунке 9, можно записать как:

$$\ln\left(n = \frac{N}{V}\right) = \frac{3}{2} \ln E + const, \quad \frac{dN}{N} = \frac{3}{2} \frac{dE}{E}.$$

Следовательно,

$$g(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{3}{2} \cdot \frac{n}{E}. \quad (24)$$

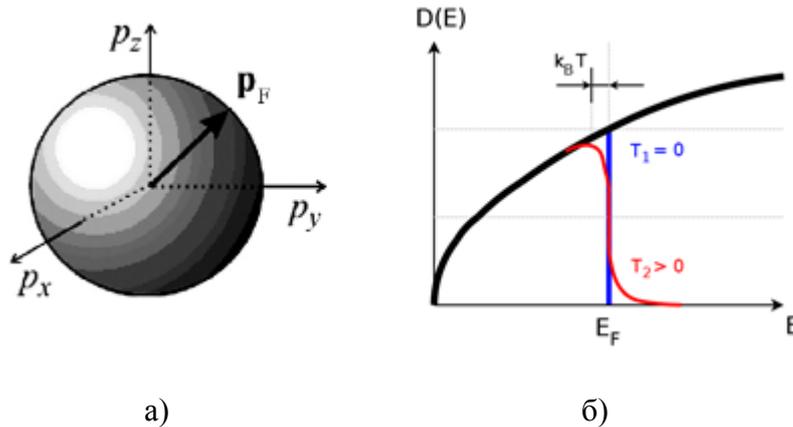


Рисунок 9 — Сфера Ферми (а) и плотность занятых состояний $D(E)$ для идеального ферми-газа как для нулевой, так и для конечной температуры (б).

Задача 2.2 Найти закон дисперсии для электронов и «дырок» в электронном идеальном газе. Записать уравнение Шредингера для таких «возбуждений».

Принципиальная особенность рассматриваемого коллектива невзаимодействующих свободных фермионов состоит в том, что из-за принципа Паули с точно определенным волновым вектором могут существовать только два электрона (с разными значениями спинового квантового числа). Поскольку в любом твердом теле количество электронов хоть и велико, но конечно, основным состоянием для такой системы при нулевой температуре будет полностью заполненная сфера в импульсном пространстве (*сфера Ферми*). Возбуждением в такой системе будет или наличие электрона «вне» полностью заполненной сферы в импульсном пространстве, или его отсутствие внутри такой ферми-сферы (возбуждения второго типа будем называть далее «дырками»). Заметим, что аналогичное описание возможно и для системы большого числа **взаимодействующих** фермионов: в рамках *концепции ферми-жидкости* полагают, что учет взаимодействия между частицами не меняет вида основного состояния системы (все той же ферми-сферы), а возбуждения на фоне этого основного состояния можно считать малочисленными и невзаимодействующими.

Графическая иллюстрация к ответу для данной задачи представлена на рисунке ниже. Подробнее эта проблема разобрана здесь: Мельников А.С., Квазичастицы в сверхпроводниках: уравнения Боголюбова, http://nano.nnov.ru/seminars/2009_2010.

Для описания возбужденных состояний в рамках концепции ферми-жидкости удобно пользоваться так называемым *представлением чисел заполнения* и аппаратом операторов рождения и уничтожения. Будем считать, что каждая из частиц системы может находиться в одном из состояний $\psi_i(x)$, $i = \overline{1, N}$. Если речь идет о свободных электронах, то тогда $\psi_i(x)$ – это простая плоская волна, т.е. волновая функция состояния с точно определенным импульсом; если об электроны в кристалле – введенная выше блоховская волна.



Рисунок 10 — Закон дисперсии и уравнения Шредингера для двух типов возбуждений в рамках модели ферми-жидкости.

В соответствии с принципом Паули количество электронов в некотором состоянии $n_i = 1; 0$. Тогда результат действия операторов уничтожения/рождения на некоторое состояние можно определить, соответственно, как:

$$\hat{a}_i | \dots, n_i, n_{i+1}, \dots \rangle = | \dots, 0, n_{i+1}, \dots \rangle; 0$$

$$\hat{a}_i^+ | \dots, n_i, n_{i+1}, \dots \rangle = 0; | \dots, 1, n_{i+1}, \dots \rangle$$

Антисимметрия многочастичного состояния по перестановке частиц ведет к антикоммутиционным соотношениям:

$$\{ \hat{a}_i, \hat{a}_j^+ \}_+ \equiv \hat{a}_i \hat{a}_j^+ + \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = \delta_{ij};$$

$$\{ \hat{a}_i, \hat{a}_j \}_+ = \{ \hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+ \}_+ = 0$$

Здесь и далее δ_{ij} – дельта-символ Кронекера.

Задача 2.3 Показать на примере одночастичного состояния, что требования принципа Паули автоматически ведут к выполнению антикоммутиационных соотношений для операторов уничтожения/рождения.

Выделим состояние с определенным импульсом p , которое, в соответствии с принципом Паули, может быть либо свободно, либо занято единственным электроном. Все возможные результаты действия операторов рождения/уничтожения на такое состояние можно представить в виде:

$$\begin{aligned} \hat{a}_p |0_p\rangle = 0 \quad \hat{a}_p^+ |0_p\rangle = |1_p\rangle \\ \hat{a}_p |1_p\rangle = |0_p\rangle \quad \hat{a}_p^+ |1_p\rangle = 0 \end{aligned} \quad (25)$$

Как следствие, возможны следующие результаты действия пары операторов рождения/уничтожения на произвольное одночастичное состояние (два подряд действия и оператора рождения, и оператора уничтожения на любое одночастичное состояние даст ноль):

$$\begin{aligned} \hat{a}_p^+ \hat{a}_p |0_p\rangle = 0 \quad \hat{a}_p \hat{a}_p^+ |0_p\rangle = |0_p\rangle \\ \hat{a}_p^+ \hat{a}_p |1_p\rangle = |1_p\rangle \quad \hat{a}_p \hat{a}_p^+ |1_p\rangle = 0 \end{aligned} \quad (26)$$

Получается, что действие пары операторов либо оставляет состояние *без изменений*, либо *превращает его в ноль*. Значит,

$$\hat{a}_p^+ \hat{a}_p + \hat{a}_p \hat{a}_p^+ = \hat{I}. \quad (27)$$

Задача 2.4 Найти выражения для средних от операторов \hat{a}_p ; $\hat{a}_p \hat{a}_k^+$; $\hat{a}_k^+ \hat{a}_p$ по произвольному состоянию системы невзаимодействующих ферми-частиц. Найти выражение для произвольного матричного элемента таких операторов.

Запишем произвольное состояние системы невзаимодействующих ферми-частиц через операторы рождения в следующем виде:

$$\hat{a}_{p_1}^+ \hat{a}_{p_2}^+ \dots \hat{a}_p^+ \dots |0\rangle \equiv |1_{p_1} 1_{p_2} \dots 1_p \dots\rangle. \quad (28)$$

Действие на такое состояние, например, оператора уничтожения электрона в заданном состоянии с импульсом p либо дает 0, если это состояние «свободно», либо:

$$\begin{aligned} \hat{a}_p \underbrace{\hat{a}_{p_1}^+ \hat{a}_{p_2}^+ \dots \hat{a}_p^+ \dots}_{\lambda+1} |0\rangle = (-1)^\lambda \hat{a}_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_{p_1}^+ \hat{a}_{p_2}^+ \dots |0\rangle = \\ = (-1)^\lambda (1 - \hat{a}_p^+ \hat{a}_p) \hat{a}_{p_1}^+ \hat{a}_{p_2}^+ \dots |0\rangle = (-1)^\lambda \hat{a}_{p_1}^+ \hat{a}_{p_2}^+ \dots |0\rangle \end{aligned} \quad (29)$$

Здесь мы дважды воспользовались антикоммутиационными соотношениями для операторов рождения/уничтожения фермионов: сначала чтобы λ раз поменять местами операторы рождения, а затем – чтобы заменить пару операторов $\hat{a}_p \hat{a}_p^+$ на выражение $(1 - \hat{a}_p^+ \hat{a}_p)$.

В соответствии с определением среднего запишем:

$$\langle \hat{a}_p \rangle = \langle 0 | \hat{a}_{p_1} \hat{a}_{p_2} \dots \hat{a}_p \dots (-1)^\lambda \hat{a}_{p_1}^+ \hat{a}_{p_2}^+ \dots | 0 \rangle = 0, \quad (30)$$

так как здесь оператор \hat{a}_p действует прямо на вакуумное состояние. Аналогичным образом мы можем получить, что обращаются в ноль средние по произвольным состояниям для операторов $\hat{a}_p \hat{a}_k^+$; $\hat{a}_k^+ \hat{a}_p$, если, конечно, $p \neq k$.

Чтобы отличался от нуля некоторый матричный элемент $\langle N_1 | \hat{a}_p | N_2 \rangle$, необходимо, чтобы одночастичное состояние с импульсом p в многочастичном состоянии $|N_2\rangle$ было занято, а в состоянии $\langle N_1|$ – свободно. В таком случае

$$\langle N_1 \hat{a}_p | N_2 \rangle = \langle 0 | \hat{a}_{p_1} \hat{a}_{p_2} \dots (-1)^\lambda \hat{a}_{p_1}^+ \hat{a}_{p_2}^+ \dots \hat{a}_p^+ \dots | 0 \rangle = (-1)^\lambda. \quad (31)$$

Легко увидеть, что, например,

$$\langle 0 | \hat{a}_{p_1} \hat{a}_{p_2} \dots \hat{a}_k \dots \hat{a}_p \hat{a}_k^+ \hat{a}_{p_1}^+ \hat{a}_{p_2}^+ \dots \hat{a}_p^+ \dots | 0 \rangle = (-1)^q,$$

где q есть число «мест» между состояниями с импульсами p и k .

Задача 2.5 Записать выражения для операторов уничтожения/рождения возбуждений для идеального электронного газа.

Схематически функции распределения электронов по энергиям (для одномерного случая) для основного и возбужденного состояний идеального электронного газа представлены на рисунке 11.

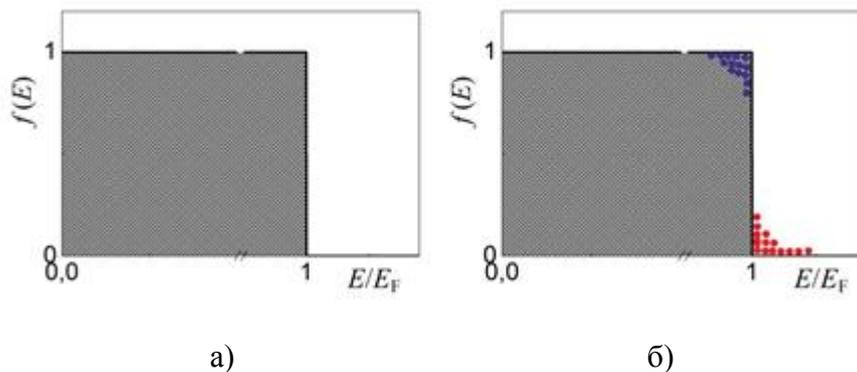


Рисунок 11 — Функция распределения Ферми при нулевой температуре (а) и возбуждения на фоне основного состояния ферми-системы (б).

Представление о возбужденных состояниях в электронной системе твердого тела (металла) можно на основе следующих соображений: при малых (по сравнению с импульсом Ферми) импульсах «увеличивать» энергию системы будет отсутствие электрона в состоянии с заданным значением p , при больших – его присутствие. Из этого сразу можно заключить, что

оператор уничтожения возбуждения в зависимости от величины его импульса p (больше или меньше эта величина, чем p_F) имеет вид:

$$\hat{\alpha}_p = \begin{cases} \hat{a}_p, & p > p_F \\ \hat{a}_p^+, & p \leq p_F \end{cases} . \quad (32)$$

Действительно, если импульс состояния больше p_F , то возбуждением здесь будет *электроноподобная* частица, и уничтожать такое возбуждение будет оператор уничтожения. Если же импульс состояния меньше p_F , то возбуждением здесь будет *дырочноподобная* частица, и уничтожать такое возбуждение будет оператор рождения электрона.

Аналогично:

$$\hat{\alpha}_p^+ = \begin{cases} \hat{a}_p^+, & p > p_F \\ \hat{a}_p, & p \leq p_F \end{cases} . \quad (33)$$

Фононы, квантование гармонического осциллятора

Следующим важным шагом станет попытка описать динамику «тяжелой» ионной подсистемы твердого тела, образующей кристаллическую решетку, в рамках аналогичного формализма чисел заполнения при помощи аналогичных операторов уничтожения/рождения возбуждения. Начнем с рассмотрения отдельного иона в кристаллической решетке как квантового (одномерного) осциллятора с частотой ω , для которого потенциальная энергия и набор собственных значений оператора полной энергии имеют вид:

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad E_n = \hbar \omega \cdot (n + \frac{1}{2}) .$$

Собственные функции оператора Гамильтона для одномерного гармонического осциллятора, записываются через полиномы Эрмита:

$$\Psi_n(\xi) = C_n H_n(\xi) \exp(-\xi^2/2), \quad C_n = 1/\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}},$$

где ξ – безразмерная координата, нормированная на характерный размер пространственной области локализации частицы $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$; $H_n(\xi)$ – классические ортогональные полиномы Эрмита. Волновые функции и соответствующие им уровни энергий изображены на рисунке 12

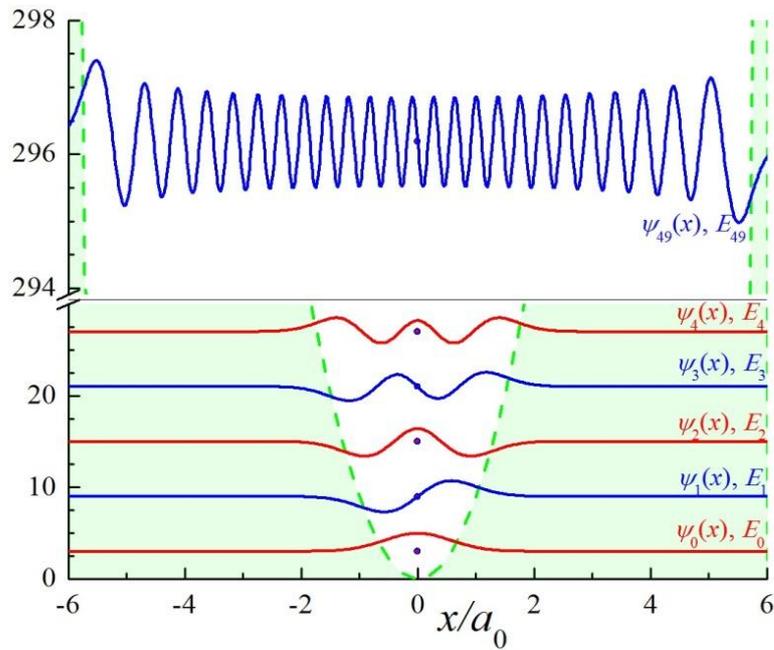


Рисунок 12 — Собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона одномерного гармонического осциллятора. Шкала по вертикальной оси задает значения энергии. Собственные функции выходят на нулевые значения при x стремящемся к $\pm \infty$ и для удобства представления сдвинуты по вертикали друг относительно друга.

Задача 2.6 Запишем для одномерного гармонического осциллятора операторы уничтожения/рождения возбуждений в виде:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i \frac{\hat{p}}{p_0} \right); \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} - i \frac{\hat{p}}{p_0} \right).$$

Здесь $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ и $p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}$ – характерный размер и характерный импульс в системе.

1) Найти коммутационное соотношение для таких операторов. 2) Выразить гамильтониан одномерного гармонического оператора через такие операторы, найти их собственных значения и собственные функции.

Коммутатор для приведенных операторов имеет вид:

$$\begin{aligned} [\hat{a}; \hat{a}^+] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i \frac{\hat{p}}{p_0} \right); \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} - i \frac{\hat{p}}{p_0} \right) \right] = -\frac{i}{2} \left[\frac{\hat{x}}{x_0}; \frac{\hat{p}}{p_0} \right] + \\ &+ \frac{i}{2} \left[\frac{\hat{p}}{p_0}; \frac{\hat{x}}{x_0} \right] = \frac{i}{2x_0 p_0} (-[\hat{x}; \hat{p}] + [\hat{p}; \hat{x}]) = \frac{i}{2x_0 p_0} (-i\hbar - i\hbar) = \hat{1} \end{aligned} \quad (34)$$

Здесь явно использованы (а) распределительный закон для произведения операторов/коммутаторов; (б) равенства постоянной Планка произведения характерного размера и характерного импульса; (в) вид коммутационного соотношения для операторов координаты и импульса ($[\hat{p}; \hat{x}] = -i\hbar$). С учетом полученного коммутационного соотношения оператор Гамильтона в новых переменных имеет вид:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{p_0^2}{2m} \left[\frac{\hat{a} - \hat{a}^+}{\sqrt{2i}} \right]^2 + \frac{m\omega^2 x_0^2}{2} \left[\frac{\hat{a} + \hat{a}^+}{\sqrt{2}} \right]^2 = \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} (2\hat{a}\hat{a}^+ + 2\hat{a}^+\hat{a}) = \hbar\omega \left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{\hat{1}}{2} \right).\end{aligned}\quad (35)$$

По аналогии с рассмотренным случаем ферми-систем оператор уничтожения возбуждений в гармоническом осцилляторе при действии на основное состояние ($n = 0$) дает ноль: $\hat{a}|0\rangle = 0$. Обратим внимание на то, что записанное требование представляет собой дифференциальное уравнение вида $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + \frac{\hbar}{p_0} \frac{\partial}{\partial x} \right) |0\rangle = 0$, решением которого действительно является хорошо известное выражение для волновой функции основного состояния одномерного гармонического осциллятора. Собственные функции $|\alpha\rangle$ оператора уничтожения называют когерентными состояниями гармонического осциллятора; в координатном и импульсном пространствах $|\alpha\rangle$ в произвольный момент времени имеет форму Гауссова пакета. Вероятности получить в таком состоянии энергию E_n определяются через распределение Пуассона.

Оператор рождения должен при действии на состояние $|0\rangle$ дать (с точностью до константы) первое возбужденное состояние. В общем случае будем считать, что для n -го состояния $|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$. Сразу отметим, что из такого определения следует, что координатная часть волновой функции n -го состояния является собственной функцией оператора $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$:

$$\begin{aligned}\hat{N}|n\rangle &= \hat{a}^+\hat{a} \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle = \hat{a}^+ \left(\hat{1} + \hat{a}^+\hat{a} \right) \frac{(\hat{a}^+)^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} |0\rangle = n \text{ раз...} = \\ &= \left(n \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} + \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} \hat{a} \right) |0\rangle = n|n\rangle\end{aligned}\quad (36)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{\hat{1}}{2} \right) \xrightarrow{E.V.} E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Проверить адекватность сделанного выше предположения о выражении для волновой функции n -го состояния можно, подействовав на эту функцию $|n\rangle$ оператором уничтожения:

$$\hat{a}|n\rangle = \frac{\hat{a}\hat{a}^+}{\sqrt{n}} \frac{(\hat{a}^+)^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} |0\rangle = \frac{\hat{1}}{\sqrt{n}} |n-1\rangle + \frac{\hat{N}}{\sqrt{n}} |n-1\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle.$$

Действительно, мы получили, как и следовало ожидать, что в результате действия оператора уничтожения гармонический осциллятор переходит в $(n-1)$ -ое стационарное состояние. Аналогично можно показать, что результат действия оператора рождения имеет ожидаемый вид:

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^{n+1}}{\sqrt{(n)!}} |0\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle.$$

Для системы бозе-частиц свойства операторов уничтожения/рождения можно записать в обобщенном виде. Пусть опять каждая из частиц системы может находиться в одном из состояний $\psi_i(x)$, $i = \overline{1, N}$, а многочастичная волновая функция задается в представлении чисел заполнения. Тогда канонические операторы уничтожения:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i |\dots, n_i, n_{i+1}, \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |\dots, n_i - 1, n_{i+1}, \dots\rangle \\ \hat{a}_i^+ |\dots, n_i, n_{i+1}, \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |\dots, n_i + 1, n_{i+1}, \dots\rangle \end{aligned}$$

а коммутационные соотношения:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij}; \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0.$$

Отметим, что если имеется N тождественных бозе-частиц в некотором состоянии, то вероятность того, что еще одна частица придет в то же самое состояние, увеличивается в $(N+1)$ раз по сравнению с той вероятностью, которая имела бы место, если бы в рассматриваемом состоянии находилась лишь одна частица.

При необходимости описания пространственно неоднородных систем, для которых, к примеру, оператор Гамильтона зависит от координаты, можно ввести так называемые ψ -операторы, действие которых на многочастичное состояние приводит к уничтожению/рождению частицы в заданной точке:

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_i \hat{a}_i \psi_i(x); \quad \hat{\Psi}^+(x) = \sum_i \hat{a}_i^+ \psi_i(x).$$

Функции $\psi_i(x)$ образуют полную ортонормированную систему. Коммутационные соотношения для ψ -операторов:

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^+(x')] &= \delta(x - x'); \\ [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x')] &= [\hat{\Psi}^+(x), \hat{\Psi}^+(x')] = 0 \end{aligned}$$

Гамильтониан системы невзаимодействующих бозе- или ферми-частиц (в последнем случае для ψ -операторов «работают» антикоммутационные соотношения):

$$\hat{H} = \int \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\Psi}^+(\vec{r}) \nabla^2 \hat{\Psi}(\vec{r}) + \hat{\Psi}^+(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}) U(\vec{r}) \right) d^3r.$$

Гамильтониан взаимодействия:

$$\hat{H} = \iint \hat{\psi}^+(\vec{r}_1) \hat{\psi}^+(\vec{r}_2) V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \hat{\psi}(\vec{r}_2) \hat{\psi}(\vec{r}_1) d^3 r_1 d^3 r_2.$$

Оператор плотности:

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}).$$

Оператор числа частиц:

$$\hat{N} = \int \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) d^3 r.$$

Простейший одномерный кристалл, состоящий из ионов одного вида, можно представить как цепочку связанных одномерных гармонических осцилляторов. Анализ такой системы начнем, полагая все ионы классическими одномерными осцилляторами.

Задача 2.7 Для цепочки одинаковых классических осцилляторов массой m , соединенных пружинами жесткостью K , найти закон дисперсии для распространяющихся колебаний (в равновесии расстояние между соседними осцилляторами равно a).

Отклонение q_n отдельного иона от положения равновесия описывается при помощи известного уравнения движения для гармонического осциллятора:

$$m\ddot{q}_n = K(q_{n-1} - q_n) + K(q_{n+1} - q_n). \quad (37)$$

Будем искать решение этого дифференциального уравнения в виде плоской волны и учтем дискретность рассматриваемой системы:

$$q_n = A \exp(ikx - \omega_k t) \propto A \exp(ikna), \quad q_{n\pm 1} = q_n \exp(\pm ika). \quad (38)$$

Подставляем отклонение от равновесия q_n в уравнение (37) и получаем:

$$-\omega_k^2 m q_n = K(e^{-ika} + e^{ika} - 2) q_n. \quad (39)$$

Выражая сумму тригонометрических экспонент через косинус, получим полезное соотношение:

$$-\omega_k^2 m / 2 = K(\cos(ka) - 1). \quad (40)$$

В таком случае закон дисперсии $\omega(k)$ принимает вид:

$$\omega_k = 2 \sqrt{\frac{K}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|. \quad (41)$$

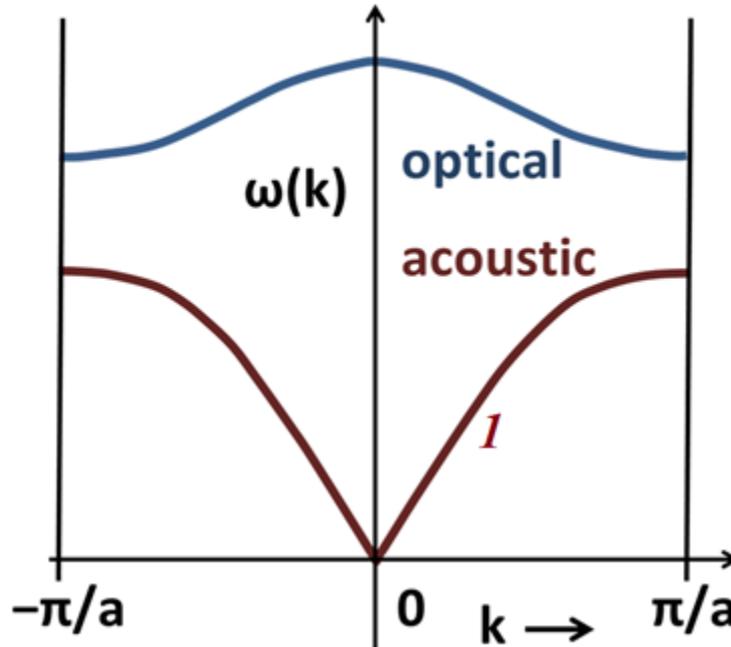


Рисунок 13 — Закон дисперсии для фононов в одномерном кристалле с двумя атомами в элементарной ячейке.

Графически этот закон дисперсии представлен кривой 1 на рисунке 13. Диапазон возможных значений k ограничен, так как в дискретной цепочке с конечным числом ионов N волновое число для плоской волны k принимает значения только из набора $k_n = \frac{2\pi n}{Na}$, $n \in \mathbb{Z}$; физически различимые значения принадлежат диапазону от $-\frac{\pi}{a}$ до $\frac{\pi}{a}$ – первой зоне Бриллюэна. Отметим, что волны с частотами $\omega > \omega_{\max}$ будут распространяться через цепочку с затуханием, поскольку при этом условии из дисперсионного соотношения следует, что $\sin(ka/2) > 1$, т.е. волновой вектор k представляет собой комплексную величину.

Обратите внимание на то, что для цепочки из атомов с чередующимися массами m и M (т.е. для случая двух атомов в элементарной одномерной кристаллической ячейке) мы должны записать по аналогии с (37) два уравнения движения: для легкой и тяжелой частиц в n -ой ячейке. Как следствие, закон дисперсии в такой системе будет содержать две ветви, по традиции называемые «акустической» и «оптической», разделенные «запрещенной зоной» (величина которой пропорциональна разнице между $\sqrt{\frac{K}{M}}$ и $\sqrt{\frac{K}{m}}$), что проиллюстрировано на рисунке выше.

Задача 2.8 Записать функцию Гамильтона для классической одномерной цепочки из N связанных осцилляторов (масса каждого осциллятора – M , жесткость каждой связи – K). Записать оператор Гамильтона для такой цепочки осцилляторов в квантовом пределе.

Искомая функция Гамильтона имеет вид:

$$H = T + U = \sum_{n=1}^N \frac{M}{2} \dot{q}_n^2 + \sum_{n=1}^N \frac{K}{4} \left\{ (q_n - q_{n-1})^2 + (q_{n+1} - q_n)^2 \right\}. \quad (42)$$

При помощи дискретного преобразования Фурье перейдем от обобщенной координаты q_n для отдельного осциллятора (в данном случае в качестве такой координаты выступает смещение данного осциллятора от положения равновесия) к обобщенной координате (действительная величина!) для k -ой моды колебаний в цепочке:

$$q_n^{(k)} = A_k \exp\{i(kna - \omega t)\} + \text{к.с.};$$

$$q_n = \sum_k \left(A_k \exp\{i(kna - \omega t)\} + \text{к.с.} \right) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \left(a_k(t) \exp\{ikna\} + \text{C.C.} \right). \quad (43)$$

Используя введенную эффективную амплитуду колебаний в k -ой моде $a_k(t)$, запишем кинетическую энергию T в виде:

$$T = \frac{M}{2} \sum_{n=1}^N \left\{ \sum_k (-i\omega_k) \frac{a_k(t)}{\sqrt{N}} \exp\{ikna\} + \text{к.с.} \right\}^2 =$$

$$= \frac{M}{2N} \sum_{k,k'} (-i\omega_k)(-i\omega_{k'}) a_k(t) a_{k'}^*(t) \sum_{n=1}^N \exp\{i(k+k')na\} + 3 \text{ аналог. слаг.} \quad (44)$$

Сумма по n в (44) по определению сводится к дельта-символу Кронекера $\delta_{k, -k'}$, и благодаря этому двойная сумма по k и k' сводится к обычной. Итоговый вид кинетической энергии (при условии четности зависимостей a_k и ω_k):

$$T = \frac{M}{2} \sum_k -\omega_k^2 a_k(t) a_k(t) - \omega_k^2 a_k^*(t) a_k^*(t) + \omega_k^2 a_k(t) a_k^*(t) + \omega_k^2 a_k^*(t) a_k(t) \quad (45)$$

Для вычисления потенциальной энергии U учтем, что $q_{n\pm 1} = q_n \exp\{\pm ika\}$.

$$U = K \sum_{n=1}^N q_n^2 - \frac{K}{2} \sum_{n=1}^N q_n q_{n-1} - \frac{K}{2} \sum_{n=1}^N q_n q_{n+1}. \quad (46)$$

Первое, второе и третье слагаемые в выражении (46) по аналогии с (44) и (45) можно записать в виде:

$$U_1 = K \sum_k a_k(t) a_k(t) + a_k^*(t) a_k^*(t) + a_k(t) a_k^*(t) + a_k^*(t) a_k(t). \quad (47)$$

$$U_2 = \frac{K}{2} \sum_k a_k(t) a_k(t) e^{-ika} + a_k^*(t) a_k^*(t) e^{+ika} + a_k(t) a_k^*(t) e^{+ika} + a_k^*(t) a_k(t) e^{-ika}. \quad (48)$$

$$U_3 = \frac{K}{2} \sum_k a_k(t) a_k(t) e^{+ika} + a_k^*(t) a_k^*(t) e^{-ika} + a_k(t) a_k^*(t) e^{-ika} + a_k^*(t) a_k(t) e^{+ika}. \quad (49)$$

Тогда выражение для полной энергии (функции Гамильтона) можно записать через амплитуды $a_k(t)$:

$$H = \sum_k \left\{ a_k(t) a_k(t) + a_k^*(t) a_k^*(t) \right\} \left(-\frac{M}{2} \omega_k^2 + K - K \cos(ka) \right) + \left\{ a_k(t) a_k^*(t) + a_k^*(t) a_k(t) \right\} \left(\frac{M}{2} \omega_k^2 + K - K \cos(ka) \right). \quad (50)$$

Сомножитель $\left(-\frac{M}{2} \omega_k^2 + K - K \cos(ka) \right)$ в выражении (50) обращается в ноль в силу дисперсионного соотношения для волн в цепочке связанных осцилляторов (см. соотношение (40) в предыдущей задаче). Аналогично сомножитель $\left(\frac{M}{2} \omega_k^2 + K - K \cos(ka) \right)$ равен $(M \omega_k^2)$.

Тогда:

$$H = M \sum_k \omega_k^2 \left\{ a_k(t) a_k^*(t) + a_k^*(t) a_k(t) \right\}. \quad (51)$$

Как видим, при определении функции Гамильтона от рассмотрения колебания отдельных атомов, число которых в решетке чрезвычайно велико, мы перешли к рассмотрению распространяющихся через кристалл волн, каковых при низких температурах может быть и совсем немного.

Аналогично, при переходе к квантовому пределу необходимо заменить амплитуды $a_k(t)$ и $a_k^*(t)$ на **операторы рождения и уничтожения возбуждений, привязанных уже не к отдельному атому, а к k -ой моде колебаний в цепочке**. Важно отметить, что при низких температурах количество таких возбуждений в кристалле может быть относительно мало, причем сами эти возбуждения можно считать невзаимодействующими друг с другом. Таким образом, на выбранном уровне строгости можно заявить, что сложная задача по нахождению энергии системы большого числа взаимодействующих частиц оказалось сведена к заметно более простой задаче об энергии системы невзаимодействующих фононов. Гамильтониан такого квантового фононного идеального газа имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + E_0, \quad (52)$$

где E_k – закон дисперсии для квазичастиц идеального газа (в данном случае это фононы; из выражения (38) в задаче 2.7 можно заключить, что $M \omega_k^2 x_0 \propto \hbar \omega_k$), E_0 – энергия основного состояния, на фоне которого мы и вводим квазичастицы.

Задача о гармоническом осцилляторе (как классическом, так и квантовом) в современной электронике возникает не только в связи с описанием колебаний кристаллической решетки.

Задача 2.8 Записать через операторы рождения и уничтожения оператор Гамильтона для LC -контура (индуктивность и ёмкость) в квантовом пределе. Схематическое изображение системы представлено на рисунке 14.

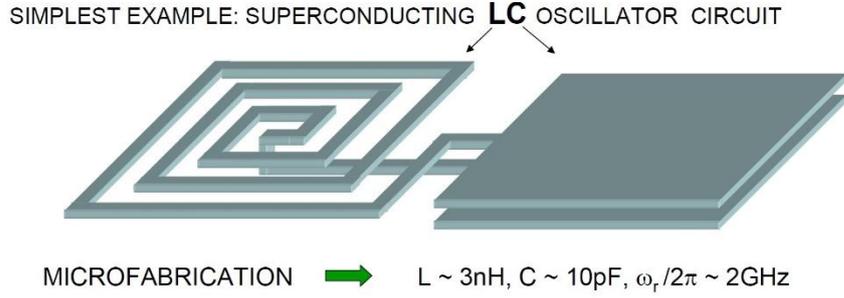


Рисунок 14 — Схематическое изображение LC -контура, рассматриваемого как квантовый гармонический осциллятор.

Для LC -контура в качестве обобщенной координаты и импульса будем использовать магнитный поток в индуктивности, Φ , и заряд на конденсаторе, Q , соответственно. Если считать такую систему одномерным гармоническим осциллятором («резонатором») с характерной частотой $\omega_r = 1/\sqrt{LC}$, то тогда в квантовом пределе её оператор Гамильтона будет иметь вид:

$$\hat{H} = \hbar\omega_r \left(\hat{a}^+ \hat{a} + 1/2 \right), \quad (53)$$

где операторы рождения и уничтожения связаны с операторами обобщенной координаты и импульса соотношениями

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{\Phi}}{\Phi_r} + i \frac{\hat{Q}}{Q_r} \right); \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{\Phi}}{\Phi_r} - i \frac{\hat{Q}}{Q_r} \right), \quad \Phi_r = \sqrt{2\hbar\omega_r L}, \quad Q_r = \sqrt{2\hbar\omega_r C}. \quad (54)$$

На сегодняшний день могут быть изготовлены на чипе методами планарной микротехнологии индуктивности порядка 1...10 нГн и емкости порядка 10 пФ, так что характерные частоты контура должны составлять несколько ГГц. Неизбежное присутствие сопротивления R в такой системе ведет к тому, что спектр собственных значений оператора Гамильтона можно представить в виде:

$$E_n = \hbar\omega_r \left(n \left(1 + \frac{i}{2\Theta} \right) + \frac{1}{2} \right), \quad (55)$$

где $\Theta = RC\omega_r$ – добротность LC -контура, определяющая «ширину» уровней энергии в рассматриваемом гармоническом осцилляторе.

Рассмотрим более подробно наивный метод учета существования малой диссипации энергии в контуре с высокой добротностью. На первом этапе рассмотрения положим декремент затухания колебаний в осцилляторе γ равным нулю. Тогда:

$$\frac{(\dot{\varphi})^2}{2} + \frac{\omega_r^2 \varphi^2}{2} \equiv \Lambda, \quad \frac{\partial \Lambda}{\partial \dot{\varphi}} = \dot{\varphi} \equiv p, \quad \Lambda = \frac{p^2}{2} - \frac{\omega_r^2 \varphi^2}{2}, \quad (56)$$

где φ, p – безразмерные координата и импульс, Λ – функция Лагранжа. Уравнения движения в лагранжевом и гамильтоновом формализмах имеют вид:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial \dot{\varphi}} \right) - \frac{\partial \Lambda}{\partial \varphi} = 0, \quad (57)$$

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial p} = p, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = -\omega_r^2 \varphi, \quad H \equiv \dot{\varphi} p - \Lambda = \frac{p^2}{2} + \frac{\omega_r^2 \varphi^2}{2}. \quad (58)$$

Пусть теперь декремент затухания отличен от нуля. Новые уравнения движения с диссипативным слагаемым (вид которого задан видом соотношений Джоуля-Ленца) имеют вид

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial \dot{\varphi}} \right) - \frac{\partial \Lambda}{\partial \varphi} = -\frac{\partial \Xi}{\partial \dot{\varphi}}, \quad \gamma \frac{(\dot{\varphi})^2}{2} \equiv \Xi, \quad (59)$$

приводящий к хорошо известному дифференциальному уравнению ($\ddot{\varphi} + \gamma \dot{\varphi} + \omega_r^2 \varphi = 0$). Уравнение (59) превратится в уравнение (57), если заменить функцию Лагранжа на $\tilde{\Lambda} = \exp(\gamma t) \Lambda$. Это позволяет ввести «исправленную» функцию Гамильтона, учитывающую существование диссипации в системе:

$$\dot{\varphi} = \left\{ \varphi, \tilde{H} \right\} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p} = p \exp(-\gamma t), \quad \dot{p} = \left\{ p, \tilde{H} \right\} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \varphi} = \omega_r^2 \varphi \exp(\gamma t), \quad (60)$$

$$\tilde{H} \equiv \dot{\varphi} p \exp(-\gamma t) - \tilde{\Lambda} = \frac{p^2}{2} \exp(-\gamma t) + \frac{\omega_r^2 \varphi^2}{2} \exp(\gamma t), \quad (61)$$

Если выполняется условие $\gamma t \ll 1$, то тогда

$$\tilde{H} \equiv H - \gamma t \left(\frac{p^2}{2} - \frac{\omega_r^2 \varphi^2}{2} \right), \quad \frac{\partial \tilde{H}}{\partial t} \equiv -\gamma \left(\frac{p^2}{2} - \frac{\omega_r^2 \varphi^2}{2} \right). \quad (62)$$

При переходе к описанию поведения LC -контура в квантовом пределе нужно скобки Пуассона в выражениях (60) заменить на коммутаторы. Для более общего случая «макроскопически-квантовой» «электромагнитной» системы с эффективной массой m , потенциальной энергией $V(\varphi)$ и «декрементом затухания» γ уравнение Шредингера запишем в виде:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\varphi, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} e^{-\gamma t} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + e^{\gamma t} V(\varphi) \right) \Psi(\varphi, t).$$

Подробно проблемы этой главы разобраны в работах: *Блатт, Брандт (2005), Дубровский, Де Жен, Займан, Иванов, Крекнелл, Пайерлс, Слэттер, Zagoskin.*

Глава 3. Электрон-фононное взаимодействие

Рассмотрим взаимодействие между электронной (ферми) и ионной (бозе) системами твердого тела в рамках введенного выше формализма вторичного квантования. Т.е. будем считать, что электрон в твердом теле (состояние которого мы описываем при помощи обсуждавшихся выше блоховских волн) способен порождать (или поглощать) колебания кристаллической решетки – фононы. Оператор энергии такого электрон-фононного взаимодействия представим в виде:

$$\hat{H}_{e-ph} = -i \sum_{p,l} W_{pl} \left(\hat{a}_{p-l}^+ \hat{a}_p \hat{b}_l^+ - \hat{a}_p^+ \hat{a}_{p-l} \hat{b}_l \right). \quad (\text{Э.Ф.})$$

Разберем смысл этого выражения, учитывая, что операторы рождения/уничтожения электронов обозначены здесь при помощи литеры a , фононов – b . Слагаемое $\hat{a}_{p-l}^+ \hat{a}_p \hat{b}_l^+$ здесь «задает» переход из состояния с одним электроном с импульсом p в состояние с фононом с импульсом l и электроном с импульсом $(p-l)$, т.е. рождения фонона электроном при условии выполнения закона сохранения импульса. Слагаемое $\hat{a}_p^+ \hat{a}_{p-l} \hat{b}_l$ «задает» переход из состояния с фононом с импульсом l и электроном с импульсом $(p-l)$ в состояние с одним электроном с импульсом p , т.е. поглощения фонона электроном.

Упражнение 3.1 Показать, что гамильтониан двух электронов, которые помимо прямого парного кулоновского взаимодействия могут взаимодействовать с полем фононов (или иных бозонов, включая плазмоны), представим в виде, соответствующем парному взаимодействию этих частиц.

Указание. При решении этой задачи стоит стартовать со следующего вида оператора Гамильтона (подробности см.: *Горелкин*):

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon(q, \sigma) \hat{a}_{\vec{k}, \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k}, \sigma} + \sum_{\vec{q}, \lambda} \hbar \cdot \omega_\lambda(q) \left(\hat{b}_{\vec{q}, \lambda}^+ \hat{b}_{\vec{q}, \lambda} + \frac{1}{2} \right) + \\ & + \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'}^+ \hat{a}_{\vec{k}', \sigma'} \hat{a}_{\vec{k}, \sigma} - i \cdot \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \sigma} F_\lambda(q) \left(\hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k}, \sigma} \hat{b}_{\vec{q}, \lambda} - \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}, \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k}, \sigma} \hat{b}_{\vec{q}, \lambda}^+ \right), \end{aligned}$$

где последняя сумма и описывает обсуждаемое взаимодействие фермионов с бозонным полем.

Введем новые операторные соотношения: $\hat{b}_{\vec{q}, \lambda} = \hat{\beta}_{\vec{q}, \lambda} + \hat{c}_{\vec{q}, \lambda}$, $\hat{b}_{\vec{q}, \lambda}^+ = \hat{\beta}_{\vec{q}, \lambda}^+ + \hat{c}_{\vec{q}, \lambda}^+$. Нужно вставить эти обозначения в исходный гамильтониан и потребовать обращения в нуль коэффициентов перед слагаемыми, линейными по $\hat{\beta}_{\vec{q}, \lambda}$:

$$\hat{c}_{\vec{q}, \lambda} = -i \frac{F_\lambda^*(q)}{\hbar \omega_\lambda(q)} \sum_{\vec{k}', \sigma'} \hat{a}_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'}^+ \hat{a}_{\vec{k}', \sigma'} \quad , \quad \hat{c}_{\vec{q}, \lambda}^+ = i \frac{F_\lambda^*(q)}{\hbar \omega_\lambda(q)} \sum_{\vec{k}, \sigma} \hat{a}_{\vec{k}, \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}, \sigma} = i \frac{F_\lambda^*(q)}{\hbar \omega_\lambda(q)} \sum_{\vec{k}, \sigma} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k}, \sigma} .$$

Тогда для любого вида коммутационных соотношений для операторов рождения/уничтожения частиц новый гамильтониан будет содержать слагаемые для «отдельных» фермионной и бозонной систем. Причем новые коллективные возбуждения решетки и электронной плотности имеют старый фононный спектр, а энергетический спектр электронов смещается вниз на константу.

Упражнение 3.2 Оценить энергию взаимодействия двух пробных покоящихся зарядов в ионном кристалле.

Указание. Разумно считать, что взаимодействие осуществляется через коллективные длинноволновые возбуждения среды (свободные бозонные поля, фононы). Тогда оператор Гамильтона в исходном и диагонализированном виде можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\vec{q}, \lambda} \hbar \cdot \omega_{\lambda}(\vec{q}) \left(\hat{b}_{\vec{q}, \lambda}^+ \hat{b}_{\vec{q}, \lambda} + \frac{1}{2} \right) + \hat{V}(\vec{r}_1) + \hat{V}(\vec{r}_2) + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \\ \hat{V}(\vec{r}) &= -iz_{np} \cdot \sum_{\vec{q}, \lambda} F_{\lambda}(\vec{q}) \cdot e^{i \cdot \vec{r} \vec{q}} \cdot \left(\hat{b}_{\vec{q}, \lambda} - \hat{b}_{-\vec{q}, \lambda}^+ \right), \quad F_{\lambda}(\vec{q}) = \frac{\tilde{g}}{q}, \\ \hat{H} &= \sum_{\vec{q}} \hbar \cdot \omega_o \left(\hat{\beta}_{\vec{q}}^+ \hat{\beta}_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right) + V_{eff}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) + Const.\end{aligned}$$

В финальной записи фигурирует новое свободное бозонное поле и независящая от его состояния величина. Неоператорную величину $V_{eff}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ можно интерпретировать, как эффективную энергию взаимодействия двух пробных, локализованных в точках с координатами \vec{r}_1 и \vec{r}_2 , зарядов в среде. Этот результат достигается за счет введения новых операторов $\hat{\beta}_{\vec{q}} = \hat{b}_{\vec{q}} - c_{\vec{q}}$ и $\hat{\beta}_{\vec{q}}^+ = \hat{b}_{\vec{q}}^+ - c_{\vec{q}}^*$, которые образуют линейную комбинацию из операторов уничтожения/рождения «первичных» бозонов.

Далее, для описания взаимодействия между двумя расположенными достаточно далеко электронами при посредстве фононов (напоминаем, что мы считаем кулоновское взаимодействие между этими микрочастицами «заэкранированным» за счет их электронного и ионного окружения) мы представим это взаимодействие в виде четырех схематических диаграмм, изображенных на рисунке 15.

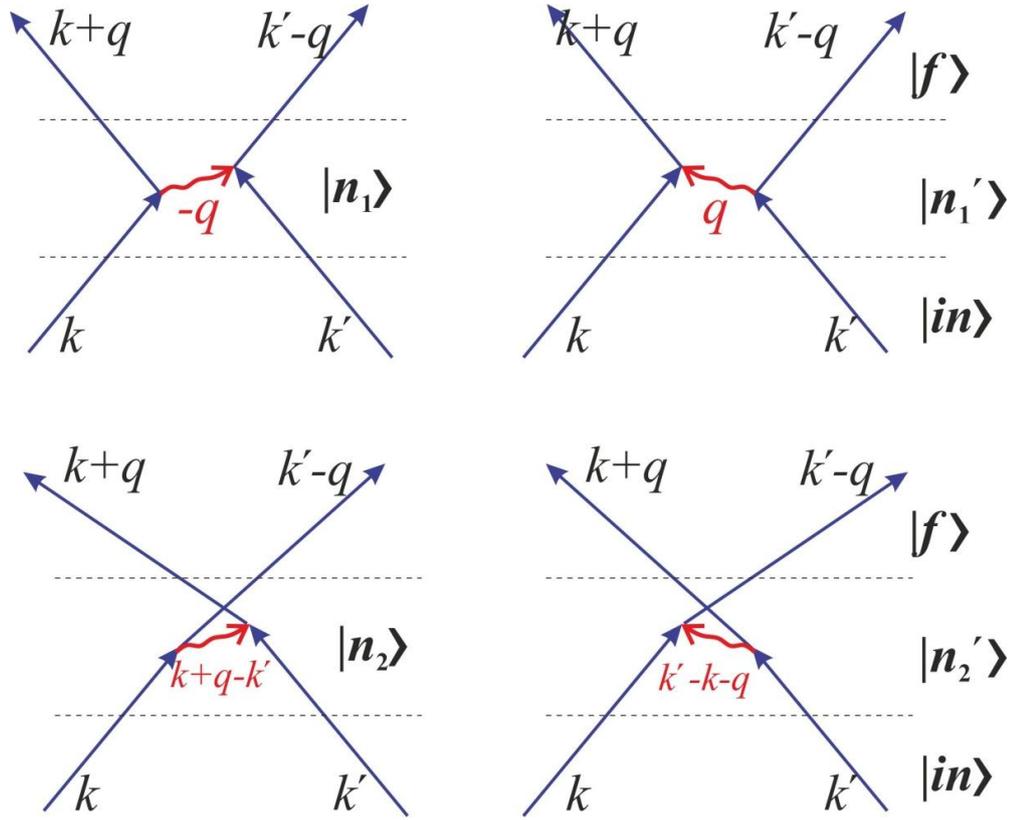


Рисунок 15 — Диаграммы, иллюстрирующие взаимодействие между электронами за счет обмена фононом.

Задача 3.1 Рассчитать матричные элементы оператора энергии электрон-фононного взаимодействия для пары электронов.

Все варианты (с учетом неразличимости тождественных микрочастиц) взаимодействия двух электронов за счет обмена фононом, удовлетворяющие законам сохранения, представлены на рисунке. Исходное $|in\rangle$ и конечное $|f\rangle$ состояние для каждой из представленных диаграмм запишем в виде:

$$|in\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_k(1) \psi_{k'}(2) \pm \psi_k(2) \psi_{k'}(1) \} [0] \cdot \begin{cases} \chi_{Anti} \\ \chi_{Symm} \end{cases}, \quad (63)$$

$$|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{k+q}(1) \psi_{k'-q}(2) \pm \psi_{k+q}(2) \psi_{k'-q}(1) \} [0] \cdot \begin{cases} \chi_{Anti} \\ \chi_{Symm} \end{cases}. \quad (64)$$

Промежуточные состояния для разных диаграмм несколько различаются:

$$|n_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{k+q}(1) \psi_{k'}(2) \pm \psi_{k+q}(2) \psi_{k'}(1) \} \cdot \begin{cases} \chi_{Anti} \\ \chi_{Symm} \end{cases} \cdot [-q], \quad (65)$$

$$|n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{k'-q}(1) \psi_{k'}(2) \pm \psi_{k'-q}(2) \psi_{k'}(1) \} \cdot \begin{cases} \chi_{Anti} \\ \chi_{Symm} \end{cases} \cdot [k+q-k']. \quad (66)$$

Отметим, что для пары электронов возможны всего три варианта симметричной и один вариант антисимметричной по перестановкам спиновой части волновой функции:

$$\chi_{Symm} = (\uparrow)_1 (\uparrow)_2 ; (\downarrow)_1 (\downarrow)_2 ; \frac{1}{\sqrt{2}} \{ (\uparrow)_1 (\downarrow)_2 + (\downarrow)_1 (\uparrow)_2 \},$$

$$\chi_{Anti} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ (\uparrow)_1 (\downarrow)_2 - (\downarrow)_1 (\uparrow)_2 \}.$$

Легко заметить, что в первом случае каждой из функций соответствует свое значение квантового числа проекции на выбранную ось суммарного спинового момента с $S=1$ ($M_S=-1; 0; +1$). Во втором случае суммарный спиновый момент S равен 0 ($M_S=0$).

Рассчитаем матричные элементы для оператора электрон-фононного взаимодействия по выписанным состояниям.

Матричный элемент-1:

$$\langle n_1 | \hat{H}_{e-ph} | in \rangle = -\frac{i}{2} \langle \psi_{k+q}(1) \psi_{k'}(2) \pm \psi_{k+q}(2) \psi_{k'}(1) | (-q) \cdot$$

$$\cdot \sum_{p,l} W_l (\hat{a}_{p-l}^+ \hat{a}_p \hat{b}_l^+ - \hat{a}_p^+ \hat{a}_{p-l} \hat{b}_l) | \psi_k(1) \psi_{k'}(2) \pm \psi_k(2) \psi_{k'}(1) \rangle [0].$$

Учтем, что (а) $\hat{b}_l^+ [0] = 0$ и (б) в рассматриваемом представлении волновые функции различных стационарных состояний ортонормированы, и, в частности, $(-q) \cdot \hat{b}_l^+ [0] = \delta_{-q,l}$; $\hat{a}_p | \psi_k(1) \psi_{k'}(2) \pm \psi_k(2) \psi_{k'}(1) \rangle \neq 0$ только при $p=k$ или $p=k'$ (причем здесь оператор уничтожения действует, как видно из вспомогательного рисунка выше, только на состояние первого электрона). Тогда:

$$\langle n_1 | \hat{H}_{e-ph} | in \rangle = -\frac{i}{2} W_{-q} \langle \psi_{k+q}(1) \psi_{k'}(2) \pm \psi_{k+q}(2) \psi_{k'}(1) |$$

$$\cdot [| \psi_{k+q}(1) \psi_{k'}(2) \pm \psi_{k+q}(2) \psi_{k'}(1) \rangle + | \psi_k(1) \psi_{k'+q}(2) \pm \psi_k(2) \psi_{k'+q}(1) \rangle]$$

Снова используя ортонормированность волновых функций различных стационарных состояний приходим к тому, что из восьми оставшихся слагаемых отличны от нуля только два:

$$\langle n_1 | \hat{H}_{e-ph} | in \rangle = -\frac{i}{2} W_{-q} \cdot [1+1] = -iW_{-q}. \quad (67)$$

Матричный элемент-2:

$$\langle f | \hat{H}_{e-ph} | n_1 \rangle = -\frac{i}{2} \langle \psi_{k+q}(1) \psi_{k'-q}(2) \pm \psi_{k+q}(2) \psi_{k'-q}(1) | (0) \cdot$$

$$\cdot \sum_{p,l} W_l (\hat{a}_{p-l}^+ \hat{a}_p \hat{b}_l^+ - \hat{a}_p^+ \hat{a}_{p-l} \hat{b}_l) | \psi_{k+q}(1) \psi_{k'}(2) \pm \psi_{k+q}(2) \psi_{k'}(1) \rangle [-q].$$

По аналогии с предыдущими рассуждениями получим, что из бесконечной суммы по p и l выживают только слагаемые, для которых $l = -q$; а также $p-l = k+q$ или $p-l = k'$.

Следовательно:

$$\langle f | \hat{H}_{e-ph} | n_1 \rangle = +\frac{i}{2} W_{-q} \cdot [1+1] = iW_{-q}. \quad (68)$$

Матричный элемент-3:

$$\begin{aligned} \langle n_2 | \hat{H}_{e-ph} | in \rangle &= -\frac{i}{2} \langle \psi_{k'-q}(1) \psi_{k'}(2) \pm \psi_{k'-q}(2) \psi_{k'}(1) | (k+q-k') \rangle \cdot \\ &\cdot \sum_{p,l} W_l \left(\hat{a}_{p-l}^+ \hat{a}_p \hat{b}_l^+ - \hat{a}_p^+ \hat{a}_{p-l} \hat{b}_l \right) | \psi_k(1) \psi_{k'}(2) \pm \psi_k(2) \psi_{k'}(1) \rangle [0] = \\ &= -i W_{k+q-k'} \end{aligned}$$

Матричный элемент-4:

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{H}_{e-ph} | n_2 \rangle &= -\frac{i}{2} \langle \psi_{k+q}(1) \psi_{k'-q}(2) \pm \psi_{k+q}(2) \psi_{k'-q}(1) | (0) \rangle \cdot \\ &\cdot \sum_{p,l} W_l \left(\hat{a}_{p-l}^+ \hat{a}_p \hat{b}_l^+ - \hat{a}_p^+ \hat{a}_{p-l} \hat{b}_l \right) | \psi_{k'-q}(1) \psi_{k'}(2) \pm \psi_{k'-q}(2) \psi_{k'}(1) \rangle [k+q-k'] \end{aligned}$$

Опять отметим, что в конечном состоянии фононы отсутствуют; во втором промежуточном состоянии имеется фотон с волновым числом $k+q-k'$, а значит матричный элемент от всех слагаемых, содержащих только фотонные операторы рождения, обратится в ноль. Слагаемые, содержащие оператор уничтожения, дадут вклад в итоговый результат только при $l = k+q-k'$. Учитывая ортонормированность электронных волновых функций различных стационарных состояний, получим, что не обращаются окончательно в ноль только те матричные элементы, для которых еще и $p = k$ или $p = k+q$. Тогда:

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{H}_{e-ph} | n_2 \rangle &= \frac{i}{2} W_{k+q-k'} \left\langle \underline{\psi_{k+q}(1) \psi_{k'-q}(2)} \pm \underline{\psi_{k+q}(2) \psi_{k'-q}(1)} \right| \cdot \\ &\cdot \left[\left| \psi_k(1) \psi_{k'-q}(2) \pm \psi_k(2) \psi_{k'-q}(1) \right\rangle + \left| \underline{\psi_{k'-q}(1) \psi_{k+q}(2)} \pm \underline{\psi_{k'-q}(2) \psi_{k+q}(1)} \right\rangle \right] \end{aligned}$$

Здесь, в отличие от случая для *матричного элемента-1*, результат зависит от симметрии координатной (а значит – и спиновой) части электронной волновой функции.

Напомним, что рассчитанные матричные элементы позволяют среди прочего оценить влияние учета электрон-фононного взаимодействия на спектр электронной системы. Будем считать, что связанное с электрон-фононным взаимодействием возмущение мало (т.е. относительно мало меняет спектр системы). Тогда собственные (невырожденные) значения полного гамильтониана есть:

$$E_n = E_n^0 + \langle \hat{H}_{e-ph} \rangle_n + \sum_{j \neq n} \frac{|\langle n | \hat{H}_{e-ph} | j \rangle|^2}{E_n^0 - E_j^0} + \dots,$$

где $E_{n,j}^0$ – собственные значения оператора Гамильтона для невозмущенной задачи.

Задача 3.2 Оценить энергию взаимодействия двух электронов за счет обмена фононом.

Пользуясь теорией возмущений, запишем выражение для искомой энергии:

$$E_{e-ph} = \langle f | \hat{H}_{e-ph} | in \rangle + \sum_j \frac{\langle f | \hat{H}_{e-ph} | n_j \rangle \langle n_j | \hat{H}_{e-ph} | in \rangle}{E_f^0 - E_{nj}^0} + \sum_j \frac{\langle f | \hat{H}_{e-ph} | n_j \rangle \langle n_j | \hat{H}_{e-ph} | in \rangle}{E_{in}^0 - E_{nj}^0}.$$

Практически все требуемые для решения задачи матричные элементы оператора энергии электрон-фононного взаимодействия были получены при решении предыдущей задачи. Отметим лишь, что $\langle f | \hat{H}_{e-ph} | in \rangle = 0$, в силу отсутствия фононов в исходном и конечном состояниях, а также в силу ортонормированности фононных состояний. Для простоты (ведь нам требуется только оценить соответствующую энергию) будем рассматривать электрон-фононное взаимодействие двух электронов, находящихся на поверхности сферы Ферми, т.е. энергия частиц в нулевом приближении равна: $E_f^0 = E_{in}^0 = E_F$. Энергия промежуточного состояния отличается от энергии Ферми E_F на энергию испущенного электроном фонона ($\hbar\omega_q$ или $\hbar\omega_{k+q-k'}$, положим эту энергию равной $\hbar\omega$). Тогда получим, что

а) для антисимметричной (по перестановкам) спиновой части волновой функции и симметричной координатной (суммарный спин двухэлектронной системы $S=0$):

$$E_{e-ph}(\uparrow\downarrow) \approx \frac{-2}{\hbar\omega} (W_{-q}^2 + W_{k+q-k'}^2) \approx \frac{-4W^2}{\hbar\omega}.$$

б) для симметричной (по перестановкам) спиновой части волновой функции и антисимметричной координатной (суммарный спин двухэлектронной системы $S=1$):

$$E_{e-ph}(\uparrow\uparrow) \approx \frac{-2}{\hbar\omega} (W_{-q}^2 - W_{k+q-k'}^2).$$

Видно, что для случая, когда спины двух участвующих во взаимодействии электронов антипараллельны, мы имеем уменьшение общей энергии системы за счет обмена фононом, то есть электрон-фононное притяжение. Для случая, когда спиновая часть волновой функции симметрична, мы можем иметь как отрицательный, так и положительный вклад в общую энергию от учета электрон-фононного взаимодействия, причем абсолютная величина этого вклада заведомо очень мала.

Задача 3.3 Показать, что для двух электронов «над полностью заполненной Ферми-сферой» сколь угодно слабое притяжение может привести к формированию связанного состояния. Полагая электрон-фононное притяжение изотропным, оценить для этого случая энергию связи.

Начнем с того, что будем искать волновую функцию упомянутой пары электронов в виде:

$$\Psi(\vec{r}_1; \vec{r}_2) \propto e^{i\vec{k}\vec{R}} \phi(\rho), \quad (69)$$

где $\hbar k$ есть величина импульса электронной пары, $\vec{R} = \vec{r}_1 + \vec{r}_2$; $\rho = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$.

Стационарное уравнение Шредингера для пары электронов с волновой функцией вида (69):

$$\left[2\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U(\rho) \right] \phi(\rho) = (2E_F + \varepsilon) \phi(\rho). \quad (70)$$

Отметим, что для удобства энергию пары электронов ε отсчитываем от удвоенной энергии Ферми; $\phi(\rho)$ – описывает относительное движение двух частиц относительно их центра масс.

Далее неизвестную функцию $\phi(\rho)$ разложим по базису из плоских волн, учитывая вид распределения электронов по энергиям при нулевой температуре, и в таком виде подставим в уравнение (70):

$$\phi(\rho) = \sum_k g_k e^{ik\rho}; \quad g_k \equiv 0 \text{ при } k \leq k_F, \quad (71)$$

$$\sum_k U(\rho) g_k e^{ik\rho} = \sum_k \left(2E_F + \varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{m} \right) g_k e^{ik\rho}. \quad (72)$$

Введем удобное для ряда последующих задач обозначение: $\xi_k = \hbar^2 k^2 / 2m - E_F$. Далее, умножим уравнение (72) на $\exp(-ik'\rho)$, где k' – любое значение волнового числа (больше k_F), а затем проинтегрируем по всему пространству, поделив при этом на физический объем системы Ω . С учетом ортонормированности плоских волн получаем:

$$\frac{1}{\Omega} \sum_k U_{k,k'} g_k = (\varepsilon - 2\xi_{k'}) g_{k'}. \quad (73)$$

Матричный элемент притяжения между электронами есть по определению:

$$U_{k,k'} = \int_{\Omega} e^{-ik'\rho} U(\rho) e^{ik\rho} d^3 \rho. \quad (74)$$

Представим его в виде:

$$U_{k,k'} = \begin{cases} -V, & |\xi_k|, |\xi_{k'}| < \hbar\omega_D. \\ 0 & \end{cases} \quad (\text{Куп})$$

Такое предположение, называемое **приближение Купера**, нетрудно обосновать: (а) электрон-фононное притяжение в нулевом приближении разумно полагать (как и указано в условии задачи) изотропным, т.е. не зависящим от взаимного направления волновых векторов k' и k ; (б) энергия фононов, «связывающих» электроны, ограничена сверху величиной $\hbar\omega_D$, где дебаевская частота ω_D есть максимально возможная частота для колебаний решетки с заданным периодом, что делает практически невозможным взаимодействие между электронами, слишком далеко от сферы Ферми расположенными в k -пространстве. В рамках этой гипотезы упростим уравнение (73) на коэффициенты разложения в ряд Фурье:

$$\frac{-V}{\Omega} \sum_k g_k = (\varepsilon - 2\xi_{k'}) g_{k'} = \text{Const}. \quad (75)$$

В уравнении (75) слева от знака равенства стоит сумма по индексу k , справа – функция от k , что возможно, только если обе части равенства равны константе. Выражаем из (75) произвольный коэффициент разложения в ряд Фурье как функцию k :

$$g_k = \text{Const}/(\varepsilon - 2\xi_k). \quad (76)$$

И сразу приходим как интересующему нас уравнению на отсчитанную от удвоенного уровня Ферми энергию пары электронов:

$$\frac{V}{\Omega} \sum_{k>k_F} \frac{1}{2\xi_k - \varepsilon} = 1. \quad (77)$$

Это уравнение можно легко решить аналитически, если перейти от суммирования к интегрированию по энергиям в интервале $(E_F; E_F + \hbar\omega_D)$, умножить на характерный физический объем Ω и положить плотность электронных состояний примерно равной плотности состояний на уровне Ферми $N(0)$, $N(0) = m_e k_F / 2(\pi\hbar)^2$. Отметим, что последнее предположение вполне оправданно, так как плотность энергии медленно (как квадратный корень из энергии) растет на интервале, где мы проводим интегрирование. В результате исследуемое уравнение принимает вид:

$$VN(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{2\xi - \varepsilon} = 1, \quad (78)$$

$$\frac{1}{2} \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D - \varepsilon}{-\varepsilon} \right) = \frac{1}{VN(0)}. \quad (79)$$

Уравнение (79) имеет отрицательное решение (соответствующее энергии связи для пары электронов) даже и при крайне малой энергии электрон-фононной связи (что, напомним, не характерно для квантовой механики одной частицы в трехмерном пространстве). Эта энергия связи при $VN(0) \ll 1$:

$$\varepsilon \cong -2\hbar\omega_D \exp \left(-\frac{2}{VN(0)} \right). \quad (80)$$

Задача 3.4 Оценить размер пары электронов, связанных электрон-фононным взаимодействием.

В предыдущей задаче 3.3 нам удалось получить вид Фурье-образа волновой функции пары таких электронов:

$$g_k = \frac{\text{Const}}{(\varepsilon - 2\xi_k)}, \quad (81)$$

где ε – энергия связи, $\xi_k = \hbar^2 k^2 / 2m - E_F$. Очевидно, что характерный масштаб значений энергии, на котором меняется функция $g(\xi_k)$, можно оценить как $\Delta \cong 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{2}{VN(0)}\right)$. Следовательно, в k -пространстве характерный размер этой же функции есть $\tilde{k} \cong \Delta m / \hbar p_F$. Воспользовавшись соотношением неопределенностей, получим как оценку на размер пары: $\tilde{a} \cong \hbar v_F / \Delta$.

Другой способ, дающий аналогичную оценку, базируется на предположении о том, что разность кинетических энергий электронов в паре $|p_1^2 - p_2^2| / 2m$ не превосходит энергии связи, величину которой можно определить как Δ . Считая, что электроны расположены в импульсном пространстве достаточно близко к поверхности сферы Ферми, оценим величину $p_1 + p_2$ как $2mv_F$. Следовательно, из соотношения неопределенностей опять получим, что $\tilde{a} \cong \hbar / |p_1 - p_2| \approx \hbar v_F / \Delta$.

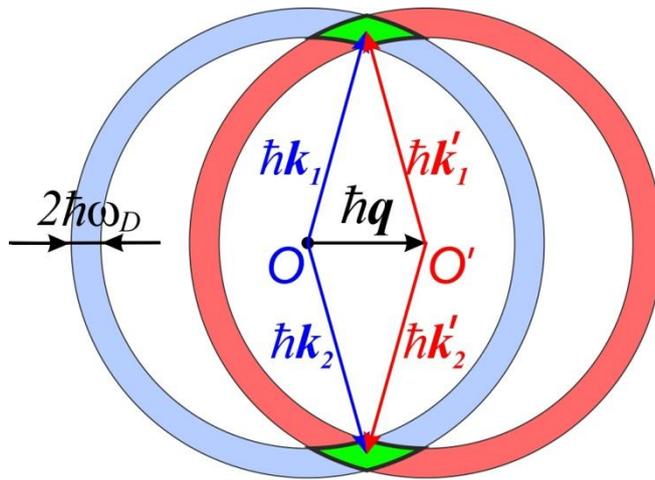


Рисунок 16 - Иллюстрация к задаче о наиболее вероятном импульсе пары «связанных» (скоррелированных) электронов

Упражнение 3.3 Известно, что коллектив электронов разбивается на пары «связанных» (скоррелированных) частиц при температуре, ниже критической. Оценить, какой импульс такой пары встретит вероятней всего.

Упражнение 3.4 Известно, что коллектив электронов разбивается на пары «связанных» (скоррелированных) частиц при температуре, ниже критической, лишь для части элементов таблицы Менделеева. Объяснить качественно это утверждение.

Указание. На рисунке 17 приведено схематическое изображение таблицы Менделеева, иллюстрирующее обсуждаемое утверждение.

KNOWN SUPERCONDUCTIVE ELEMENTS

■ BLUE = AT AMBIENT PRESSURE
■ GREEN = ONLY UNDER HIGH PRESSURE

1	KNOWN SUPERCONDUCTIVE ELEMENTS																2							
1	H																	He						
2	Li	Be																	B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg																	Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	Y	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr						
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe						
6	Cs	Ba	*La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn						
7	Fr	Ra	+Ac	Rf	Ha	106	107	108	109	110	111	112												

SUPERCONDUCTORS.ORG

Рисунок 17 — Таблица Менделеева с указанием элементов, для которых зафиксировано так называемое «сверхпроводящее состояние» при атмосферном и высоком давлении (выделены синим и зеленым цветами соответственно) (по данным сайта <http://superconductors.org>).

Подробно проблемы этой главы разобраны в работах: *Брандт (1990), Де Жен, Максимов, Мельников, Минеев, Шмидт, Тинкхам, Хакен, Zagoskin.*

Глава 4. Определение основного состояния ферми-газа с притяжением между частицами

Попробуем определить, как учет взаимодействия между электронами (за счет, например, разобранного выше электрон-фононного механизма) изменит вид основного состояния коллектива электронов. Начнем такой анализ с наиболее простого случая нулевой температуры.

Оператор Гамильтона для такой системы в общем случае

$$\hat{H} = \sum_{k;\sigma} E(k) \hat{a}_{k,\sigma}^+ \hat{a}_{k,\sigma} + \sum_{k_1, k_1', k_2, k_2'; \sigma} U_{k_1, k_1', k_2, k_2'} \underbrace{\hat{a}_{k_1, \sigma}^+ \hat{a}_{k_2, \sigma}^+ \hat{a}_{k_1, \sigma} \hat{a}_{k_2, \sigma}}_{k_1 + k_2 = k_1' + k_2'; k_1 \neq k_1'}. \quad (82)$$

Здесь первое слагаемое имеет смысл оператора кинетической энергии системы частиц с известным законом дисперсии $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ (см. выражение для оператора числа частиц в задаче 2.6). Второе слагаемое представлено суммой, каждое слагаемое из которой дает энергию взаимодействия, переводящего пару электронов из состояний с волновыми числами k_1, k_2 в состояния k_1', k_2' . Наконец отметим, что и оператор кинетической энергии, и оператор потенциальной энергии содержат суммирование по спиновому индексу σ .

В рамках гипотезы Бардина-Купера-Шриффера будем считать, что

- 1) во взаимодействии участвуют только электроны с противоположными спинами (см. задачу 3.1, продемонстрировавшую, что только в этом случае возможно притяжение между электронами за счет обмена фононами);
- 2) во взаимодействии участвуют только электроны с противоположными импульсами $\hbar \vec{k}_1 = -\hbar \vec{k}_2$ (именно такие электроны составляют подавляющее большинство среди всех счастливых, удовлетворяющих закону сохранения импульса);
- 3) взаимодействие является изотропным, т.е. вес каждого из слагаемых в операторе потенциальной энергии не зависит от взаимного направления волновых векторов, а энергия фононов, «связывающих» электроны, ограничена сверху величиной $\hbar \omega_D$.

С учетом всех этих сильных предположений гамильтониан Бардина-Купера-Шриффера для системы электронов с простым изотропным притяжением имеет вид:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{k;\sigma} E(k) \hat{a}_{k\sigma}^+ \hat{a}_{k\sigma} + \sum_{k,l} U_{k,l} \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow}. \quad (\text{БКШ})$$

Будем искать волновую функцию основного состояния такой системы в виде:

$$\Psi_{BCS} = \prod_k (u_k + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+) |0\rangle, \quad (\text{Осн.})$$

где $|0\rangle$ – вакуумное электронное состояние, а **неизвестные функции** u_k и v_k , еще только предстоит найти. Причем физический смысл, например, функции v_k – **амплитуда вероятности существования пары электронов (куперовской пары) в состояниях с импульсами и спинами $+\hbar\vec{k}; \uparrow$ и $-\hbar\vec{k}; \downarrow$** . Разберем основные свойства такого основного состояния.

Задача 4.1 Для волновой функции основного состояния электронной системы с притяжением в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера (БКШ) убедиться в выполнении соотношения $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$.

Исходя из вида волновой функции основного состояния:

$$\langle \Psi_{BCS} | \Psi_{BCS} \rangle = \langle 0 | \prod_p (u_p^* + v_p^* \hat{a}_{-p\downarrow} \hat{a}_{p\uparrow}) \times \prod_k (u_k + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+) | 0 \rangle.$$

В силу перестановочного правила для произведений и ортонормированности одноэлектронных волновых функций имеем:

$$\begin{aligned} \langle 0, \dots, n_k, 0, \dots | 0, \dots, m_p, 0, \dots \rangle &= \delta_{k,p} \delta_{n,m} \\ \langle \Psi_{BCS} | \Psi_{BCS} \rangle &= \langle 0 | \prod_k (u_k^* + v_k^* \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow}) (u_k + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+) | 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | \prod_k \left(\underbrace{|u_k|^2}_1 + \underbrace{u_k^* v_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+}_2 + \underbrace{v_k^* u_k \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow}}_3 + \underbrace{|v_k|^2 \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+}_4 \right) | 0 \rangle. \end{aligned}$$

В последнем выражении слагаемое «3» в скобках, действуя на вакуумное состояние, дает ноль. Слагаемое «2» превращает вакуумное состояние в состояние с двумя электронами, что при скалярном умножении на $\langle 0 |$ опять дает ноль. Таким образом, мы получаем, что

$$\langle \Psi_{BCS} | \Psi_{BCS} \rangle = \langle 0 | \prod_k (|u_k|^2 + |v_k|^2) | 0 \rangle.$$

Это означает, что волновая функция основного состояния электронной системы с притяжением в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера является нормированной на единицу, только если выполняется условие:

$$|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1. \quad (83)$$

Задача 4.2 Найти среднее значение кинетической энергии в основном состоянии электронной системы с притяжением в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера.

Закон дисперсии для частиц электронной системы будем «отсчитывать» от энергии Ферми и обозначим как $\zeta(k)$. В соответствии с известным определением среднего некоторой наблюдаемой величины для кинетической энергии T получим:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{BCS} | \hat{T} | \Psi_{BCS} \rangle &= \langle 0 | \prod_p (u_p^* + v_p^* \hat{a}_{-p\downarrow} \hat{a}_{p\uparrow}) \times \\ &\times \sum_{k;\sigma} \xi(k) \hat{a}_{k\sigma}^+ \hat{a}_{k\sigma} \prod_l (u_l + v_l \hat{a}_{l\uparrow}^+ \hat{a}_{-l\downarrow}^+) | 0 \rangle \end{aligned}$$

Как и в предыдущей задаче учтем перестановочное правило для произведений и ортонормированность одноэлектронных волновых функций:

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} \rangle_{BCS} &= 2 \sum_k \xi(k) \langle 0 | (u_k^* + v_k^* \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow}) \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{k\uparrow} (u_k + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+) | 0 \rangle \cdot 1 = \\ &= 2 \sum_k \xi(k) \langle 0 | \left(\underbrace{|u_k|^2 \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{k\uparrow}}_1 + \underbrace{u_k^* v_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+}_2 + \right. \\ &\left. + \underbrace{v_k^* u_k \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{k\uparrow}}_3 + \underbrace{|v_k|^2 \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+}_4 \right) | 0 \rangle \end{aligned}$$

Здесь слагаемые «1» и «3» в скобках, действуя на вакуумное состояние, сразу дают ноль. Слагаемое «2» превращает вакуумное состояние в состояние с двумя электронами, что при скалярном умножении на $\langle 0 |$ опять дает ноль. И только слагаемое «4» не меняет своим действием вакуумное состояние, что дает

$$\langle \hat{T} \rangle_{BCS} = 2 \sum_k \xi_k |v_k|^2. \quad (84)$$

Задача 4.3 Найти среднее значение потенциальной энергии в основном состоянии электронной системы с притяжением в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера.

По аналогии с предыдущей задачей запишем искомое выражение для средней потенциальной энергии V в виде:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{BCS} | \hat{V} | \Psi_{BCS} \rangle &= \langle 0 | \prod_p (u_p^* + v_p^* \hat{a}_{-p\downarrow} \hat{a}_{p\uparrow}) \times \\ &\times \sum_{k,l} U_{k,l} \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow} \prod_q (u_q + v_q \hat{a}_{q\uparrow}^+ \hat{a}_{-q\downarrow}^+) | 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | \sum_{k,l} U_{k,l} (u_k^* + v_k^* \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow}) (u_l^* + v_l^* \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow}) \times \\ &\times \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow} (u_k + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+) (u_l + v_l \hat{a}_{l\uparrow}^+ \hat{a}_{-l\downarrow}^+) | 0 \rangle \end{aligned}$$

Заметим, что в последнем выражении только подчеркнутое слагаемое одновременно

а) и не содержит прямого действия оператора уничтожения на вакуумное состояние,

б) и переводит это состояние $|0\rangle$ обратно в вакуумное состояние («рождаются» электроны в состояниях $l \uparrow, -l \downarrow$, затем «гибнут» электроны в этих же состояниях, рождаются в состояниях $-k \downarrow, k \uparrow$, а затем там же и гибнут). Следовательно:

$$\langle \hat{V} \rangle_{BCS} = \sum_{k,l} U_{k,l} u_l^* v_k^* u_k v_l. \quad (85)$$

Задача 4.4 Найти функции u_k и v_k , обеспечивающие равновесное состояние для коллектива электронов с притяжением в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера. Полагать эти функции действительными.

Учтем, что наш коллектив электронов можно рассматривать как статистический ансамбль с переменным числом частиц и равновесным химическим потенциалом (энергией, которую необходимо затратить, чтобы добавить в систему одну частицу при нулевой температуре), равным E_F . Это значит, что равновесное состояние такой системы можно определить из условия минимума большого термодинамического потенциала, оператор которого практически совпадает с Гамильтонианом БКШ:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega} &= \lim_{\theta \rightarrow 0} (\hat{H}_{BCS} - TS - E_F \hat{N}) = \{\lim_{T \rightarrow 0} S = 0\} = \hat{H}_{BCS} - E_F \hat{N} = \\ &= \sum_{k;\sigma} \xi(k) \hat{a}_{k\sigma}^+ \hat{a}_{k\sigma} + \sum_{k,l} U_{k,l} \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow}. \end{aligned} \quad (86)$$

Здесь $\xi_k = \hbar^2 k^2 / 2m - E_F$. Воспользовавшись результатами трех предыдущих задач, получим (учитывая равноправие здесь состояний с двумя возможными значениями спинов):

$$\langle \hat{T}_{\Omega} \rangle_{BCS} = 2 \sum_k \xi(k) |v_k|^2; \quad \langle \hat{V} \rangle_{BCS} = 2 \sum_{k,l} U_{k,l} u_l v_k u_k v_l, \quad (87)$$

$$|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1 \Rightarrow u_k = \cos \theta_k; \quad v_k = \sin \theta_k, \quad (88)$$

$$\langle \Omega \rangle_{BCS} = 2 \sum_k \xi(k) \frac{1 - \cos 2\theta_k}{2} + 2 \sum_{k,l} U_{k,l} \frac{1}{2} \sin 2\theta_k \frac{1}{2} \sin 2\theta_l. \quad (89)$$

Для определения точки экстремума большого термодинамического потенциала продифференцируем выражение (89) по θ_k и приравняем каждое из слагаемых в получившейся сумме по k к нулю:

$$\frac{\partial \langle \Omega \rangle}{\partial \theta_k} = 0 \Rightarrow 2\xi(k) \sin 2\theta_k + \sum_l U_{k,l} \cos 2\theta_k \sin 2\theta_l = 0,$$

$$\operatorname{tg} 2\theta_k = - \frac{\sum_l U_{k,l} \sin 2\theta_l}{2\xi(k)}. \quad (90)$$

Введем пока формальные обозначения (они нам пригодятся в ряде последующих задач):

$$-\frac{1}{2} \sum_l U_{k,l} \sin 2\theta_l = -\sum_l U_{k,l} u_l v_l \equiv \Delta_k; \quad \varepsilon_k \equiv \sqrt{\Delta_k^2 + \xi_k^2}. \quad (91)$$

В новых обозначениях уравнение (90) можно превратить в следующие соотношения для тригонометрических функций от $2\theta_k$:

$$\operatorname{tg} 2\theta_k = \frac{\Delta_k}{\xi_k}, \quad \cos 2\theta_k = \pm \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}, \quad \sin 2\theta_k = \pm \frac{\Delta_k}{\varepsilon_k}. \quad (92)$$

В результате мы приходим к следующим выражениям для вероятности обнаружить пару электронов (куперовскую пару, являющуюся бозе-частицей) в состоянии с импульсами и спинами $+\hbar\vec{k}; \uparrow$ и $-\hbar\vec{k}; \downarrow$:

$$v_k^2 = \sin^2 \theta_k = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\theta_k) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \right). \quad (93)$$

Знак для $\cos 2\theta_k$ выбран здесь из очевидных физических соображений, проиллюстрированных на прилагаемом к задаче графическом изображении функций $\frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \right)$: вероятность обнаружить электрон при очень больших значениях k должна стремиться к нулю, а не к единице. Обратим внимание на важный результат: мы получили для описания основного состояния размытую фермиевскую ступеньку при нулевой температуре, ширина размытия будет иметь размер порядка $\frac{\Delta}{\varepsilon_F}$ (определение Δ – см. **задачу 4.5**).

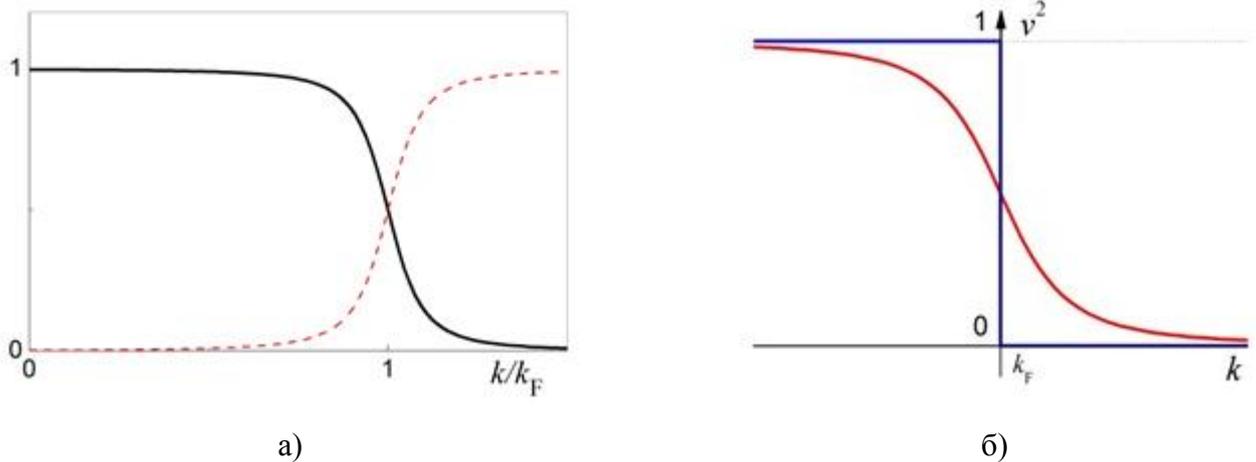


Рисунок 18 — (а) Вероятность обнаружить пару состояний $(k\uparrow; -k\downarrow)$ занятой (сплошная линия) и свободной (штриховая линия). б) Основное состояние для нормального металла (синий) и сверхпроводника (красный): на графике указана плотность вероятности для частицы занять квантовое состояние с волновым числом k при нулевой температуре $T=0$.

Задача 4.5 Для функций u_k и v_k , обеспечивающих равновесное состояние для коллектива электронов с притяжением в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера, определить, чему равна комбинация $\Delta_k = -\sum_l U_{k,l} u_l v_l$.

Выражения (88) и (92) из предыдущей задачи позволяют переписать искомое как:

$$\Delta_k = -\frac{1}{2} \sum_l U_{k,l} \sin 2\theta_l = -\sum_l U_{k,l} \frac{\Delta_l}{2\varepsilon_l} = -\sum_l U_{k,l} \frac{\Delta_l}{2\sqrt{\Delta_l^2 + \xi_l^2}}. \quad (94)$$

Очевидно, что получившееся уравнение на Δ имеет тривиально решение $\Delta_k \equiv 0$. Подставляя это решение в выражение (93) из предыдущей задачи, получаем:

$$v_k^2 (\Delta = 0) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{|\xi_k|} \right) = \begin{cases} 1, & k \leq k_F \\ 0, & k > k_F \end{cases}. \quad (95)$$

Т.е. в этом случае функция распределения электронов по энергиям (волновым числам) в точности совпадает с «фермиевской ступенькой» (см. рисунок к задаче 2.5). Можно сказать, что специфика неидеальной фермиевской системы проявляется только при $\Delta_k \neq 0$.

Будем искать нетривиальное решение. Для простоты воспользуемся гипотезой Купера (см. задачу 3.3), позволившей определить энергию связанного состояния двух электронов в присутствии крайне слабого притяжения между ними за счет обмена фононами. Будем считать, что (а) электрон-фононное притяжение изотропно, т.е. не зависит от взаимного направления волновых векторов l и k ; (б) энергия фононов, «связывающих» электроны, ограничена сверху величиной $\hbar\omega_D$:

$$U_{k,l} = \begin{cases} -V/\Omega, & |\xi_k|, |\xi_l| < \hbar\omega_D \\ 0 & \end{cases}. \quad (96)$$

Тогда мы получаем для Δ_k следующее выражение:

$$\Delta_k = -\sum_l U_{k,l} u_l v_l = \frac{V}{2\Omega} \sum_{l: 0 < \xi_k, \xi_l < \hbar\omega_D} u_l v_l \equiv \Delta.$$

Тогда уравнение (94) можно существенно упростить:

$$\Delta = \frac{V}{\Omega} \sum_l \frac{\Delta}{2\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} \Rightarrow 1 = \frac{V}{\Omega} \sum_l \frac{1}{2\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}}. \quad (97)$$

Это уравнение можно легко решить аналитически, если перейти от суммирования к интегрированию по энергиям в интервале $(E_F; E_F + \hbar\omega_D)$, умножить на физический объем системы Ω и в очередной раз положить плотность электронных состояний примерно равной плотности состояний на уровне Ферми $N(0)$:

$$VN(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} = 1. \quad (98)$$

Интеграл по отсчитанной от уровня Ферми энергии в уравнении (98) является табличным:

$$[VN(0)]^{-1} = \operatorname{arcsch}\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta}\right). \quad (99)$$

Отсюда для искомой величины получаем:

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_D}{\operatorname{sh}(1/VN(0))}. \quad (100)$$

В приближении слабой связи при $VN(0) \ll 1$ $\operatorname{sh}(1/VN(0)) \approx \exp(1/VN(0))/2$, и тогда (сравнить с выражением (80) в **задаче 3.3**):

$$\Delta \cong 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{VN(0)}\right). \quad (101)$$

Задача 4.6 Найти среднее значение и дисперсию числа частиц N в основном состоянии теории БКШ. Показать, что волновая функция основного состояния БКШ может быть представлена как суперпозиция состояний с определенным числом частиц N .

Вопрос о среднем значении числа частиц (то есть о среднем для оператора $\hat{N} = \sum_{k;\sigma} \hat{a}_{k\sigma}^+ \hat{a}_{k\sigma}$) в равновесном состоянии для коллектива электронов с притяжением в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера был уже фактически решен в **задаче 4.2**:

$$\langle \hat{N} \rangle_{BCS} = 2 \sum_k |v_k|^2. \quad (102)$$

Для определения дисперсии числа частиц отметим (отталкиваясь от аналогии с **задачей 4.3**), что

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{BCS} | \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{l\uparrow}^+ \hat{a}_{l\uparrow} | \Psi_{BCS} \rangle &= \langle \Psi_{BCS} | \hat{a}_{k\downarrow}^+ \hat{a}_{k\downarrow} \hat{a}_{l\downarrow}^+ \hat{a}_{l\downarrow} | \Psi_{BCS} \rangle = \\ &= \begin{cases} v_k^2 v_l^2, & k \neq l \\ v_k^2, & k = l \end{cases}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{BCS} | \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{l\downarrow}^+ \hat{a}_{l\downarrow} | \Psi_{BCS} \rangle &= \langle \Psi_{BCS} | \hat{a}_{k\downarrow}^+ \hat{a}_{k\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow}^+ \hat{a}_{l\uparrow} | \Psi_{BCS} \rangle = \\ &= \begin{cases} v_k^2 v_l^2, & k \neq -l \\ v_k^2, & k = -l \end{cases}. \end{aligned}$$

Отсюда сразу получаем, что

$$\begin{aligned} \langle \hat{N}^2 \rangle_{BCS} &= 2 \sum_{k,l,k \neq l} v_k^2 v_l^2 + 2 \sum_{k,l,k \neq -l} v_k^2 v_l^2 + 4 \sum_k v_k^2 = \\ &= 4 \left(\sum_{k,l} v_k^2 v_l^2 + \sum_k v_k^2 u_k^2 \right) \end{aligned} \quad (103)$$

Здесь мы для объединения сумм использовали простое следствие условия $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$:

$$\sum_k v_k^2 u_k^2 = \sum_k v_k^2 (1 - v_k^2) = \sum_k v_k^2 - \sum_k v_k^4.$$

В результате для искомой дисперсии получим:

$$D_{BCS}(N) = \langle \hat{N}^2 \rangle_{BCS} - \langle \hat{N} \rangle_{BCS}^2 = 4 \sum_k v_k^2 u_k^2 \quad (104)$$

Отметим, что сумма в выражении (96) пропорциональна среднему количеству частиц $\langle N \rangle$, а значит (как часто бывает в задачах о системах большого числа частиц), относительная величина отклонений от этого среднего $\delta N \equiv \sqrt{D}/\langle N \rangle \propto \langle N \rangle^{-1/2}$ пренебрежимо мала.

Задача 4.7 Определить разницу между (i) энергией основного состояния идеального электронного газа и (ii) энергией основного состояния электронной системы с притяжением в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера.

Энергия основного состояния идеального электронного газа (E_N) есть, по определению, кинетическая энергия электронов, занимающих все состояния вплоть до уровня Ферми. С учетом существования двух возможных значений проекции спина:

$$E_N = \langle \hat{T} \rangle_N = 2 \sum_{k < k_F} \xi_k. \quad (105)$$

Сравним эту величину с кинетической энергией электронов в основном состоянии электронной системы с притяжением в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера (из рисунка 18 к задаче 4.4 видно, что распределение по энергиям или импульсам для электронов в этом случае при нулевой температуре представляет размытую ступеньку Ферми):

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} \rangle_{BKS} - \langle \hat{T} \rangle_N &= 2 \sum_k \xi_k v_k^2 - 2 \sum_{k < k_F} \xi_k = 2 \left(\sum_{k < k_F} \xi_k (v_k^2 - 1) + \sum_{k > k_F} \xi_k v_k^2 \right) = \\ &= 2 \left(- \sum_{k < k_F} \xi_k \left(\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \right) \right) + \sum_{k > k_F} \xi_k \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \right) \right) = 2 \sum_{k > k_F} \xi_k \left(1 - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \right). \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались соотношениями (88) и (93) из задачи 4.4, а также четностью функции $\xi_k = \hbar^2 k^2 / 2m - E_F$.

Для того, чтобы вычислить искомую разницу кинетических энергий перейдем от суммирования к интегрированию по энергиям в интервале $(E_F; E_F + \hbar\omega_D)$, умножим на характерный физический объем Ω и положим плотность электронных состояний примерно равной плотности состояний на уровне Ферми $N(0)$:

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} \rangle_{BCS} - \langle \hat{T} \rangle_N &= 2N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \left(\xi - \frac{\xi^2}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \right) d\xi = \\ &= 2N(0) \left\{ \frac{1}{2} \xi^2 \Big|_0^{\hbar\omega_D} - I \Big|_0^{\hbar\omega_D} \right\} \end{aligned} \quad (106)$$

В выражении (106) интеграл I можно найти из уравнения:

$$\begin{aligned} I &= \int \frac{\xi^2 + \Delta^2 - \Delta^2}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi = \int \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} d\xi - \Delta^2 \int \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} = \\ &= \xi \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} - I - \Delta^2 \operatorname{arcsch} \left(\frac{\xi}{\Delta} \right) \end{aligned} \quad (107)$$

Другими словами:

$$I = \frac{1}{2} \left(\xi \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} - \Delta^2 \operatorname{arcsch} \left(\frac{\xi}{\Delta} \right) \right). \quad (108)$$

Легко заметить из выражений (106) и (108), что кинетическая энергия электронной системы с притяжением в рамках теории БКШ больше энергии идеального электронного газа (в принципе, для того, чтобы сделать такой вывод, достаточно внимательно посмотреть на рисунки к задачам 2.5 и 4.4). Однако, в случае (106) необходимо еще учесть отрицательную потенциальную энергию электрон-фононного притяжения:

$$\langle \hat{V} \rangle_{BCS} = -V \sum_{k,l} u_k v_k u_l v_l = -\frac{\Delta^2}{V}. \quad (109)$$

Здесь мы воспользовались введенным выше обозначением $\Delta_k = -\sum_l U_{k,l} u_l v_l$, а также гипотезой Купера. И тогда искомая разность полных энергий есть:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_{BCS} - \langle \hat{T} \rangle_N &= 2N(0) \left\{ \begin{aligned} &\left[\frac{1}{2} \xi^2 \Big|_0^{\hbar\omega_D} - \frac{1}{2} \xi \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \Big|_0^{\hbar\omega_D} + \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} \left(\Delta^2 \operatorname{arcsch} \left(\frac{\xi}{\Delta} \right) \right) \Big|_0^{\hbar\omega_D} \right] - \frac{\Delta^2}{V} \approx \end{aligned} \right. \\ &\approx N(0) \left\{ \begin{aligned} &\left[(\hbar\omega_D)^2 - (\hbar\omega_D)^2 \left(1 + \frac{\Delta^2}{2(\hbar\omega_D)^2} \right) + \right. \\ &\left. + \Delta^2 \operatorname{arcsch} \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \right) \right] - \frac{\Delta^2}{V} \end{aligned} \right. . \end{aligned} \quad (110)$$

Из выражения (100) в задаче 4.5 сразу следует, что $\operatorname{arcsch} \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \right) = [VN(0)]^{-1}$. Получаем,

что энергия основного состояния электронной системы с притяжением в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера меньше энергии основного состояния идеального электронного газа на относительно небольшую величину:

$$\langle \hat{H} \rangle_{BKS} - \langle \hat{T} \rangle_N = N(0) \left\{ -\frac{\Delta^2}{2} + \frac{\Delta^2}{N(0)V} \right\} - \frac{\Delta^2}{V} = -\frac{N(0)\Delta^2}{2}. \quad (111)$$

Задача 4.8 Определить дисперсионное соотношение для одного электрона (квазичастичного электроноподобного возбуждения), помещенного в коллектив электронов с притяжением, находящийся в основном состоянии (в рамках теории БКШ).

Учтем, что помещая один дополнительный электрон с импульсом $\hbar k$ в коллектив электронов с притяжением, находящийся в основном состоянии, мы «занимаем» пару состояний $(-k, k)$, то есть «изымаем» эту пару и из участия во взаимодействии, понижающем общую энергию системы, и из общей кинетической энергии. За счет этого одного «дополнительного» электрона мы меняем энергию системы на величину (с учетом результатов предыдущих задач 4.2, 4.3 и 4.4):

$$\begin{aligned} \delta E &= \xi_k - 2\xi_k v_k^2 + 2Vu_k v_k \sum_{l \neq k} u_l v_l = \\ &= \xi_k - 2\xi_k \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \right) + 2\sqrt{\frac{1}{4} \left(1 - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \right) \left(1 + \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \right)} \Delta = . \\ &= \xi_k - \xi_k + \frac{\xi_k^2}{\varepsilon_k} + \sqrt{1 - \frac{\xi_k^2}{\varepsilon_k^2}} \Delta = \varepsilon_k \end{aligned}$$

Функция $\varepsilon_k \equiv \sqrt{\Delta_k^2 + \xi_k^2}$, представленная на рисунке в окрестности точки k_F (для сравнения на рисунке 19 представлен закон дисперсии электроноподобного возбуждения в идеальном

электронном газе из задачи 2.2), и есть закон дисперсии для квазичастичного электроноподобного возбуждения в коллективе электронов с притяжением в рамках теории БКШ. Минимально возможная энергия такого возбуждения равна Δ .

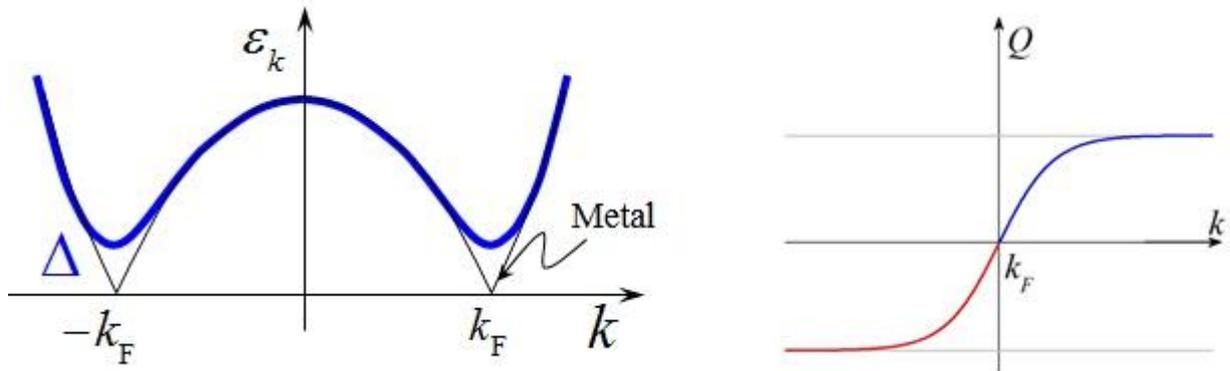


Рисунок 19 — Сравнение законов дисперсии для возбуждений в идеальном ферми-газе (тонкая линия) и сверхпроводнике (жирная линия).

Отметим важную особенность возбуждений в рассматриваемом неидеальном ферми-газе:

их эффективный заряд (в единицах заряда электрона) $u_k^2 - v_k^2 = \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}$ зависит от величины

импульса и даже может менять знак, что наглядно проиллюстрировано на прилагаемом рисунке. Групповую скорость таких квазичастиц можно оценить как:

$$v_{gr} = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \propto \frac{\varepsilon}{E} v_F = -v_F q.$$

Подробно проблемы этой главы разобраны в работах: *Де Жен, Зайцев (2004), Мельников, Минеев, Шмидт, Тинкхам, Anderson, Zagoskin.*

Глава 5. Возбуждения в сверхпроводнике: преобразования Боголюбова

Теория Бардина-Купера-Шриффера позволяет, как мы только что убедились, найти основное состояние электронного газа с учетом электрон-фононного взаимодействия. Но вот описать возбужденные состояния в такой системе совсем не просто. Убедимся в этом на двух простейших примерах.

Задача 5.1 Показать, что оператор уничтожения электрона (в определенной ячейке фазового пространства) не превращает в ноль основное (вакуумное) состояние в теории БКШ:

$$\begin{aligned}\hat{a}_{k\uparrow}\Psi_{BKS} &= \hat{a}_{k\uparrow}\prod_l(u_l + v_l\hat{a}_{l\uparrow}^+\hat{a}_{-l\downarrow}^+)|0\rangle = \prod_{l\neq k}(u_l + v_l\hat{a}_{l\uparrow}^+\hat{a}_{-l\downarrow}^+)\hat{a}_{k\uparrow}(u_k + v_k\hat{a}_{k\uparrow}^+\hat{a}_{-k\downarrow}^+)|0\rangle = \\ &= \prod_{l\neq k}(u_l + v_l\hat{a}_{l\uparrow}^+\hat{a}_{-l\downarrow}^+)\hat{a}_{k\uparrow}\hat{a}_{k\uparrow}^+(v_k\hat{a}_{-k\downarrow}^+)|0\rangle \neq 0\end{aligned}$$

Аналогичным образом (полагая для простоты функции u_k, v_k действительными) легко показать, что $\hat{a}_{k\downarrow}\Psi_{BCS} \neq 0$.

Задача 5.2 Проверить, переходит ли под действием оператора рождения электрона основное (вакуумное) состояние в теории БКШ в возбужденное состояние, ортогональное исходному: $(\hat{a}_k^+\Psi_{BKS}, \Psi_{BKS}) \neq 0$?

$$\{\hat{a}_{k\sigma}^+, \hat{a}_{k'\sigma'}\} = \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}, \quad \{\hat{a}_{k\sigma}, \hat{a}_{k'\sigma'}\} = \{\hat{a}_{k\sigma}, \hat{a}_{k'\sigma'}\} = 0$$

Произведем подготовительные вычисления: $\hat{a}_{k\uparrow}^+\Psi_{BCS} = \hat{a}_{k\uparrow}^+\prod_l(u_l + v_l\hat{a}_{l\uparrow}^+\hat{a}_{-l\downarrow}^+)|0\rangle$, теперь эрмитово сопрягаем: $(\hat{a}_{k\uparrow}^+\Psi_{BCS})^+ = \langle 0|\prod_l(u_l + v_l\hat{a}_{-l\downarrow}\hat{a}_{l\uparrow})\hat{a}_{k\uparrow}$. Здесь мы воспользовались известным соотношением для сопряжения двух произвольных операторов: $(\hat{F}\hat{G})^+ = \hat{G}^+\hat{F}^+$. Теперь можно показать, что интересующее нас скалярное произведение равно 0:

$$\begin{aligned}(\hat{a}_k^+\Psi_{BCS}, \Psi_{BCS}) &= \langle 0|\prod_l(u_l + v_l\hat{a}_{-l\downarrow}\hat{a}_{l\uparrow})\hat{a}_{k\uparrow}\prod_l(u_l + v_l\hat{a}_{l\uparrow}^+\hat{a}_{-l\downarrow}^+)|0\rangle = \\ &= \langle 0|\prod_l(u_l + v_l\hat{a}_{-l\downarrow}\hat{a}_{l\uparrow})\prod_{l\neq k}(u_l + v_l\hat{a}_{l\uparrow}^+\hat{a}_{-l\downarrow}^+)(u_k + v_k\hat{a}_{-k\downarrow}\hat{a}_{k\uparrow})\hat{a}_{k\uparrow}(u_k + v_k\hat{a}_{k\uparrow}^+\hat{a}_{-k\downarrow}^+)|0\rangle\end{aligned}$$

Как видим, в теории БКШ основное состояние не обращается в ноль под действием «электронного» оператора уничтожения, что мешает построению последовательной теории, описывающей возбуждения в сверхпроводнике (и, в частности, так называемые «токовые состояния»). Исправить ситуацию мог бы переход к новым эффективным операторам рождения/уничтожения возбуждения в рассматриваемом неидеальном электронном газе, обеспечивающим (а) диагонализацию гамильтониана системы и (б) построение спектра

«правильных» ортонормированных возбужденных состояний (в том числе и для случая конечной температуры).

В 1947 году Н. Н. Боголюбов предложил оригинальный вид преобразования к новым операторам рождения/уничтожения для бозе-частиц. В 1958 году аналогичный подход был реализован для анализа неидеального ферми-газа на основе представления вида:

$$\hat{\alpha}_i = \sum_k (u_{ik} \hat{a}_k + v_{ik} \hat{a}_k^+), \quad \hat{\alpha}_j^+ = \sum_k (u_{jk}^* \hat{a}_k^+ + v_{jk} \hat{a}_k).$$

Такие преобразования при правильном подборе весовых коэффициентов u_{ik} и v_{ik} обеспечивают приведение произвольного гамильтониана, представимого в виде квадратичной формы, к диагональному виду:

$$\hat{H} = \sum (h_{ij}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ + h_{ij}^{(2)} \hat{a}_i \hat{a}_j) + C.C. \xrightarrow{\hat{\alpha}, \hat{\alpha}^+} \hat{H} = \sum_i \varepsilon_i \hat{\alpha}_i^+ \hat{\alpha}_i + E_0.$$

Задача 5.3 Привести гамильтониан БКШ

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{k;\sigma} E(k) \hat{a}_{k\sigma}^+ \hat{a}_{k\sigma} + \sum_{k,l} U_{k,l} \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow}$$

к квадратичному виду.

Для упрощения записи выражения для потенциальной энергии в рассматриваемом гамильтониане ведем понятие аномального среднего в виде:

$$\langle \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow} \rangle_{BCS} \equiv b_k \neq 0. \quad (112)$$

Это выражение фактически задает амплитуду вероятности перехода системы из «дырочного» состояния $\hat{a}_{\vec{k}\uparrow} |\Psi_{BCS}\rangle$, в котором отсутствовал электрон с импульсом и спином $\vec{k} \uparrow$ в «электронное» состояние $\hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^+ |\Psi_{BCS}\rangle$. Найдем эту величину при помощи прямых вычислений:

$$\langle \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow} \rangle_{\Psi} = \left\langle 0 \left| \prod_p (u_p^* + v_p^* \hat{a}_{-p\downarrow} \hat{a}_{p\uparrow}) \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow} \prod_l (u_l + v_l \hat{a}_{l\uparrow}^+ \hat{a}_{-l\downarrow}^+) \right| 0 \right\rangle. \quad (113)$$

Теперь выделим из общего количества множителей только те два, которые имеют один и тот же индекс, совпадающий с индексом воздействующего оператора, т.е. $p=k$, $l=k$ (далее можно для удобства опускать знак вектора над импульсами). Переставляя местами все пары, получаем (полагая пока для простоты функции u_k , v_k действительными):

$$\begin{aligned} & \langle 0 \left| \prod_p (u_p + v_p \hat{a}_{-p\downarrow} \hat{a}_{p\uparrow}) (\hat{a}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}) \prod_l (u_l + v_l \hat{a}_{-l\downarrow}^+ \hat{a}_{l\uparrow}^+) \right| 0 \rangle = \\ & \langle 0 \left| (u_k + v_k \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}) (\hat{a}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}) (u_k + v_k \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^+ \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^+) \prod_{p \neq k} (u_p + v_p \hat{a}_{-p\downarrow} \hat{a}_{p\uparrow}) \prod_{l \neq k} (u_l + v_l \hat{a}_{-l\downarrow}^+ \hat{a}_{l\uparrow}^+) \right| 0 \rangle. \end{aligned} \quad (114)$$

Общий вид последнего выражения портит произведение двух произведений. Попробуем от него избавиться.

$$\begin{aligned} \langle 0 | \prod_{p \neq k} (u_p + v_p \hat{a}_{-p\downarrow} \hat{a}_{p\uparrow}) \prod_{l \neq k} (u_l + v_l \hat{a}_{-l\downarrow}^+ \hat{a}_{l\uparrow}^+) | 0 \rangle &= \langle 0 | \underbrace{(p_1)(p_2) \dots}_{p} \dots \underbrace{(p_1)(p_2) \dots}_{l} | 0 \rangle = \\ \langle 0 | (p_1 \dots)(p_1 \dots)(p_2 \dots)(p_2 \dots) \dots | 0 \rangle &= \langle 0 | \prod_p (u_p + v_p \hat{a}_{-p\downarrow} \hat{a}_{p\uparrow}) (u_p + v_p \hat{a}_{-p\downarrow}^+ \hat{a}_{p\uparrow}^+) | 0 \rangle = 1 \end{aligned}$$

В центре получившегося выражения стоит пара подчеркнутых операторов уничтожения, что заставляет оставить справа лишь слагаемое с двумя операторам рождения \hat{a}^+ , а слева – вообще без операторов рождения. Следовательно, получаем

$$\langle \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow} \rangle_{BCS} = u_k^* v_k \neq 0 \quad (115)$$

Для сравнения посчитаем среднее по волновой функции основного состояния идеального электронного газа («нормального металла»):

$$|\Psi_N\rangle = \prod_{k\sigma} (u_{k\sigma} + v_{k\sigma} \hat{a}_{k\sigma}^+) |0\rangle \quad (116)$$

В этом случае корреляций вида $(k \uparrow \rightarrow -k \downarrow)$ нет. Следовательно, в равенстве (114) в центре по-прежнему находятся два оператора уничтожения \hat{a} , и их не может скомпенсировать один оператор рождения \hat{a}^+ справа. Таким образом, мы получаем, что $\langle \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow} \rangle_{\Psi_N} = 0$.

Теперь можем представить пару операторов для потенциальной энергии в гамильтониане БКШ в следующем виде:

$$\hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow} \equiv \underbrace{b_k}_{\text{среднее}} + \underbrace{(\hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow} - b_k)}_{\text{флуктуации}}$$

Тогда получаем модифицированный гамильтониан БКШ:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{MOD} &= \sum_{k\sigma} \xi_k \hat{a}_{k\sigma}^+ \hat{a}_{k\sigma} + \sum_{kl} V_{kl} \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow} = \\ &= K_{ин} + \sum_{kl} V_{kl} (b_k^* + (\hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ - b_k^*)) (b_l + (\hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow} - b_l)) \end{aligned} \quad (117)$$

Пренебрегаем квадратом флуктуаций, считая выполненным условие

$$(\hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ - b_k^*)(\hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow} - b_l) \ll 1.$$

$$\hat{H}_{MOD} = \sum_{k\sigma} \xi_k \hat{a}_{k\sigma}^+ \hat{a}_{k\sigma} + \sum_{kl} V_{kl} (b_k^* b_l + b_l \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ - b_k^* b_l + b_k^* \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow} - b_k^* b_l), \quad (118)$$

$$\hat{H}_{MOD} = K_{ин} + \sum_{kl} V_{kl} (b_l \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ + b_k^* \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow} - b_k^* b_l). \quad (119)$$

Далее вводим обозначение

$$\Delta_k = -\sum_l V_{kl} b_l = -\sum_l V_{kl} \langle \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow} \rangle_{БКШ}, \quad (120)$$

$$\hat{H}_{MOD} = \sum_{k\sigma} \xi_k \hat{a}_{k\sigma}^+ \hat{a}_{k\sigma} - \sum_k (\Delta_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ + \Delta_k^* \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow} - \Delta_k b_k^*). \quad (121)$$

Обратите, внимание на то, как произошла смена индексов суммирования:

$$\sum_{kl} V_{kl} b_k^* \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow} = \sum_{kl} V_{lk}^* b_k^* \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow} = \sum_l \Delta_l^* \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow} = \sum_k \Delta_k^* \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow}.$$

Гамильтониан БКШ, записанный в виде квадратичной формы, можно привести к каноническому виду при помощи преобразований Боголюбова, причем введенные операторы

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_{k\uparrow} &= u_k \hat{a}_{k\uparrow} - v_k \hat{a}_{-k\downarrow}^+, & \hat{\alpha}_{-k\uparrow} &= u_{-k} \hat{a}_{-k\uparrow} - v_{-k} \hat{a}_{k\downarrow}^+, \\ \hat{\alpha}_{k\downarrow} &= u_{-k} \hat{a}_{k\downarrow} + v_{-k} \hat{a}_{-k\uparrow}^+, & \hat{\alpha}_{-k\downarrow} &= u_k \hat{a}_{-k\uparrow} + v_k \hat{a}_{k\downarrow}^+ \end{aligned} \quad (122)$$

можно понимать, как операторы уничтожения/рождения «боголюбовских квазичастиц».

Задача 5.4 Антиккоммутационные соотношения для «электронных» операторов рождения и уничтожения имеют вид $\{\hat{a}_{k\sigma}^+, \hat{a}_{k'\sigma'}\} = \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'}$, $\{\hat{a}_{k\sigma}^+, \hat{a}_{k'\sigma'}^+\} = \{\hat{a}_{k\sigma}, \hat{a}_{k'\sigma'}\} = 0$. При каких условиях боголюбовские операторы удовлетворяют антикоммутационным соотношениям, типичным для ферми-частиц?

Выполним прямые вычисления:

$$\{\hat{\alpha}_{k\uparrow}; \hat{\alpha}_{p\uparrow}\} = \{u_k \hat{a}_{k\uparrow} - v_k \hat{a}_{-k\downarrow}^+; u_p \hat{a}_{p\uparrow} - v_p \hat{a}_{-p\downarrow}^+\} = 0 \quad (123)$$

Разные спины

$$\{\hat{\alpha}_{k\uparrow}; \hat{\alpha}_{p\downarrow}\} = u_k v_{-p} \underbrace{\{\hat{a}_{k\uparrow}; \hat{a}_{-p\uparrow}^+\}}_{\delta_{k,-p}} - u_{-p} v_k \underbrace{\{\hat{a}_{-k\downarrow}^+; \hat{a}_{p\downarrow}\}}_{\delta_{-k,p}} = (u_k v_{-p} - u_{-p} v_k) \delta_{k,-p} = 0 \quad (124)$$

$$\{\hat{\alpha}_{k\uparrow}^+; \hat{\alpha}_{p\downarrow}\} = \{u_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ - v_k \hat{a}_{-k\downarrow}; u_{-p} \hat{a}_{p\downarrow} - v_{-p} \hat{a}_{-k\uparrow}^+\} = 0 \quad (125)$$

$$\{\hat{\alpha}_{k\uparrow}^+; \hat{\alpha}_{p\uparrow}\} = u_k u_p \delta_{kp} + v_k v_p \delta_{-k,-p} = (u_k^2 + v_k^2) \delta_{kp} \quad (126)$$

При выполнении условия $u_k^2 + v_k^2 = 1$ боголюбовские частицы удовлетворяют антикоммутационным соотношениям, типичным для ферми-частиц.

Задача 5.5 Получить преобразования, обратные к преобразованиям Боголюбова.

Комбинируем в пары выражения из (122) и домножаем на u_k или v_k (учитывая, что $u_k^2 + v_k^2 = 1$):

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_{k\uparrow} &= u_k \hat{a}_{k\uparrow} - v_k \hat{a}_{-k\downarrow}^+ \\ \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+ &= u_k \hat{a}_{-k\downarrow}^+ + v_k \hat{a}_{k\uparrow} \end{aligned} \left| \begin{array}{l} \cdot u_k \\ \cdot v_k \end{array} \right. \oplus \Rightarrow \hat{a}_{k\uparrow} = u_k \hat{\alpha}_{k\uparrow} + v_k \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+.$$

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_{k\downarrow} &= u_{-k} \hat{a}_{k\downarrow} + v_{-k} \hat{a}_{-k\uparrow}^+ \\ \hat{\alpha}_{-k\uparrow}^+ &= u_{-k} \hat{a}_{-k\uparrow}^+ - v_{-k} \hat{a}_{k\downarrow} \end{aligned} \left| \begin{array}{l} \cdot u_{-k} \\ \cdot (-v_{-k}) \end{array} \right. \oplus \Rightarrow \hat{a}_{k\downarrow} = u_{-k} \hat{\alpha}_{k\downarrow} - v_{-k} \hat{\alpha}_{-k\uparrow}^+.$$

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_{-k\downarrow} &= u_k \hat{a}_{-k\downarrow} + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ \\ \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ &= u_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ - v_k \hat{a}_{-k\downarrow} \end{aligned} \left| \begin{array}{l} \cdot u_k \\ \cdot (-v_k) \end{array} \right. \oplus \Rightarrow \hat{a}_{-k\downarrow} = u_k \hat{\alpha}_{-k\downarrow} - v_k \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+.$$

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_{-k\uparrow}^+ &= u_{-k} \hat{a}_{-k\uparrow} - v_{-k} \hat{a}_{k\downarrow}^+ \\ \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ &= u_{-k} \hat{a}_{k\downarrow}^+ + v_{-k} \hat{a}_{-k\uparrow} \end{aligned} \Big| \cdot \begin{matrix} u_k \\ v_k \end{matrix} \oplus \Rightarrow \hat{a}_{-k\uparrow} = u_{-k} \hat{\alpha}_{-k\uparrow}^+ + v_{-k} \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+.$$

Обратные преобразования Боголюбова получены.

Задача 5.6 Определить вид весовых коэффициентов u_{ik} и v_{ik} в рассматриваемых преобразованиях Боголюбова, обеспечивающий диагонализацию гамильтониана (БКШ).

Подставим в приведенный к квадратичной форме гамильтониан (БКШ):

$$\hat{H}_{\text{mod}} = \sum_{k,\sigma} \xi_k \hat{a}_{k\sigma}^+ \hat{a}_{k\sigma} - \sum_{k,l} (\Delta_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ + \Delta_l \hat{a}_{-l\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow} - \Delta_k b_k^*) = (*),$$

только что полученные обратные преобразования Боголюбова. Будем считать поверхность Ферми изотропной, что позволяет положить:

$$u_k^2 = u_{-k}^2 \text{ и } v_k^2 = v_{-k}^2.$$

$$(*) = \sum_k \xi_k \left[\underbrace{(u_k \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ + v_k \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+)(u_k \hat{\alpha}_{k\uparrow} + v_k \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+)}_{\text{спин вверх}} + \underbrace{(u_{-k} \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ - v_{-k} \hat{\alpha}_{-k\uparrow}^+)(u_{-k} \hat{\alpha}_{k\downarrow} - v_{-k} \hat{\alpha}_{-k\uparrow}^+)}_{\text{спин вниз}} \right] - \sum_k (\Delta_k (u_k \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ + v_k \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+)(u_k \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+ - v_k \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+) + \Delta_k^* (u_k \hat{\alpha}_{-k\downarrow} - v_k \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+)(u_k \hat{\alpha}_{k\uparrow} + v_k \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+) - \Delta_k b_k^*) = (**)$$

$$\begin{aligned} (**) &= \sum_{k\sigma} \xi_k \left[\underbrace{u_k^2 \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+}_{\{1\}} + \underbrace{v_k^2 \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+}_{\{2\} \text{ антикомм. + меняем } k \rightarrow -k} + \underbrace{u_k v_k (\hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+ + \hat{\alpha}_{-k\downarrow} \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+)}_{\{3\}} + \right. \\ &\quad \left. \underbrace{u_{-k}^2 \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+}_{\{2\}} + \underbrace{v_{-k}^2 \hat{\alpha}_{-k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\uparrow}^+}_{\{1\} \text{ антикомм. + меняем } k \rightarrow -k} - \underbrace{u_{-k} v_{-k} (\hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\uparrow}^+ + \hat{\alpha}_{-k\uparrow} \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+)}_{\{3\} \text{ антикомм. + меняем } k \rightarrow -k} \right] \\ &\quad - \sum_k \Delta_k \left(\underbrace{-u_k v_k \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+}_{\{4\}} + \underbrace{u_k v_k \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+}_{\{4\} + \text{антикомм.}} + \underbrace{u_k^2 \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+}_{\{5\}} - \underbrace{v_k^2 \hat{\alpha}_{-k\downarrow} \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+}_{\{6\}} \right) + \\ &\quad \Delta_k^* \left(\underbrace{-u_k v_k \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+}_{\{4\}} + \underbrace{u_k v_k \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+}_{\{4\} + \text{антикомм}} + \underbrace{u_k^2 \hat{\alpha}_{-k\downarrow} \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+}_{\{6\}} - \underbrace{v_k^2 \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+}_{\{5\}} \right) - \Delta_k b_k^* \\ &= \sum_k \xi_k \left[\underbrace{(u_k^2 - v_k^2) \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ + v_k^2}_{\{1\}} + \underbrace{(u_k^2 - v_k^2) \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ + v_{-k}^2}_{\{2\}} + \underbrace{2u_k v_k (\hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+ + \hat{\alpha}_{-k\downarrow} \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+)}_{\{3\}} \right] + \\ &\quad + \underbrace{(\Delta_k + \Delta_k^*) u_k v_k (\hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ + \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+ - 1)}_{\{4\}} - \underbrace{(\Delta_k u_k^2 - \Delta_k^* v_k^2) \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+}_{\{5\}} - \\ &\quad - \underbrace{(\Delta_k^* u_k^2 - \Delta_k v_k^2) \hat{\alpha}_{-k\downarrow} \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+}_{\{6\}} + \Delta_k b_k^* \end{aligned}$$

В конечном итоге мы хотим, чтобы гамильтониан был диагонален! Поэтому потребуем, чтобы все недиагональные слагаемые обратились в ноль. Это требование дает формально два (сопряженных) уравнения:

$$\begin{aligned} 2u_k v_k \xi_k - \Delta_k u_k^2 + \Delta_k^* v_k^2 &= 0 & (\alpha^+ \alpha^+) \\ 2u_k v_k \xi_k - \Delta_k^* u_k^2 + \Delta_k v_k^2 &= 0 & (\alpha \alpha) \end{aligned} \quad (127)$$

Теперь учитывая требование $u_k^2 + v_k^2 = 1$, производя замену $u = \cos(\theta)$, $v = \sin(\theta)$ и используя тригонометрические формулы $2uv = \sin(2\theta)$, $u^2 - v^2 = \cos(2\theta)$, мы приходим к тригонометрическому уравнению на искомые весовые коэффициенты вида:

$$tg(2\theta_k) = \frac{\Delta_k}{\xi_k}$$

Такое тригонометрическое уравнение мы уже встречали при определении основного состояния для электронного газа с учетом электрон-фононного взаимодействия (уравнения (92) в задаче 4.4). Из отмеченной аналогии следует, что

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}\right) \\ v_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}\right) \\ \varepsilon_k &= \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2} \end{aligned} \quad (128)$$

Причем

$$u_k^2 - v_k^2 = \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}; \quad u_k v_k = \frac{\Delta_k}{2\xi_k} (u_k^2 - v_k^2) = \frac{\Delta_k}{2\varepsilon_k}. \quad (129)$$

Задача 5.7 Найти закон дисперсии для боголюбовских квазичастиц.

В явном виде запишем гамильтониан (БКШ), приведенный к каноническому (диагональному) виду, используя соотношения (129) из предыдущей задачи:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{MOD} &= \sum_k \xi_k \left[\underbrace{(u_k^2 - v_k^2) \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{k\uparrow}}_{\{1\}} + \underbrace{(u_k^2 - v_k^2) \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{k\downarrow}}_{\{2\}} + v_{-k}^2 \right] + \\ &+ \underbrace{(\Delta_k + \Delta_k^*) u_k v_k (\hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{k\uparrow} + \hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\downarrow} - 1)}_{\{3\}} + \Delta_k b_k^* = \sum_k \xi_k \left[\frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{k\uparrow} + 2 \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}\right) + \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{k\downarrow} \right] + \\ &+ (2\Delta_k) \frac{\Delta_k}{2\varepsilon_k} (\hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{k\uparrow} + \underbrace{\hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-k\downarrow}}_{k \rightarrow -k \text{ -изотропность}} - 1) + \Delta_k b_k^* = \sum_k \left[\varepsilon_k \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{k\uparrow} + \xi_k \left(1 - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}\right) + \varepsilon_k \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{k\downarrow} - \frac{\Delta_k^2}{\varepsilon_k} + \Delta_k b_k^* \right] \\ &= \sum_k \left[\varepsilon_k \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{k\uparrow} + \varepsilon_k \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{k\downarrow} + \xi_k - \varepsilon_k + \Delta_k b_k^* \right] = \sum_{k\sigma} \left[\varepsilon_k \hat{\alpha}_{k\sigma}^+ \hat{\alpha}_{k\sigma} \right] + \sum_k \left[\xi_k - \varepsilon_k + \Delta_k b_k^* \right] \end{aligned}$$

В результате получаем для модифицированного Гамильтониана

$$\hat{H}_{MOD} = \underbrace{\sum_{k\sigma} \varepsilon_k \hat{\alpha}_{k\sigma}^+ \hat{\alpha}_{k\sigma}}_{\text{кин. энергия}} + \underbrace{\sum_k \xi_k - \varepsilon_k + \Delta_k b_k^*}_{\text{эн. осн. состо}} \quad (130)$$

Здесь k -ое собственное значение для оператора кинетической энергии идеального ферми-газа боголюбовских квазичастиц в размерных единицах может быть выражено как

$$\varepsilon_k = \sqrt{(\hbar^2 k^2 / 2m - E_F)^2 + \Delta_k^2}.$$

Можно убедиться (почти дословно повторив выкладки из **задачи 4.7**) в том, что энергия основного состояния в рамках рассматриваемой теории будет отличаться от кинетической энергии основного состояния идеального газа на величину $E_s - E_N = -N(0) \frac{\Delta^2}{2}$.

Задача 5.8 Выразить энергетическую щель в спектре боголюбовских квазичастиц через функцию распределения для ферми-частиц при известной конечной температуре.

$$\begin{aligned} \Delta_l &= -\sum_k V_{kl} \langle \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow} \rangle = -\sum_k V_{kl} \langle (u_k \hat{a}_{-k\downarrow} - v_k \hat{a}_{k\uparrow}^+) (u_k \hat{a}_{k\uparrow} + v_k \hat{a}_{-k\downarrow}^+) \rangle = \\ &= -\sum_k V_{kl} \langle u_k v_k \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{-k\downarrow}^+ - u_k v_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{k\uparrow} \rangle = -\sum_k V_{kl} u_k v_k \langle 1 - \hat{a}_{-k\downarrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow} - \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{k\uparrow} \rangle. \\ &\Rightarrow \Delta_l = -\sum_k V_{kl} u_k v_k \langle 1 - n_{-k\downarrow} - n_{k\uparrow} \rangle. \end{aligned}$$

Здесь введено обозначение: $n_{k\uparrow} = \langle \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{k\uparrow} \rangle$, причем, усредняя оператор числа ферми-частиц по основному состоянию при заданной температуре, мы должны получить фермиевскую функцию распределения

$$n_{k\sigma} \equiv n_{|k|} = \frac{1}{1 + \exp(\varepsilon_k / k_B T)} = f_k.$$

Отметим (без доказательства), что боголюбовские частицы – это ферми-частицы с нулевым химическим потенциалом : $\mu = \partial F / \partial N = 0$.

Итак:

$$\Delta_l = -\sum_k V_{kl} u_k v_k (1 - 2f_k) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \Delta_l = -\sum_k V_{kl} \frac{\Delta_k}{2\varepsilon_k} (1 - 2f_k). \quad (131)$$

Задача 5.9 Из решения **задачи 4.5** получить связь между энергетической щелью в спектре боголюбовских квазичастиц при нулевой температуре и критической температурой, при которой эта щель обращается в ноль.

Запишем среднюю энергию основного состояния при конечной температуре, полагая, что боголюбовские квазичастицы, занимая ячейку фазового пространства (k, σ) , «закрывают» её для электрона из куперовской пары в соответствии с требованием принципа Паули:

$$\langle E \rangle_{BCS} = 2 \sum_k |\xi_k| f_k + 2 \sum_k \xi_k v_k^2 (1 - 2f_k) - V \sum_{k,l} v_k u_k v_l u_l (1 - 2f_k) (1 - 2f_l).$$

Первое слагаемое здесь – это кинетическая энергия боголюбовских квазичастиц, второе – кинетическая энергия куперовских пар, где множитель v_k^2 задает вероятность того, что k -ая ячейка фазового пространства занята электроном из куперовской пары, а множитель $(1 - 2f_k) -$

того, что она же не занята квазичастицей. Наконец, третье слагаемое в выражении для энергии – это потенциальная энергия электрон-фононного взаимодействия, записанная с учетом гипотезы Купера.

Как и раньше, ищем функции u_k, v_k , которые бы минимизировали плотность свободной энергии. Функция распределения f_k минимизирует энтропию системы невзаимодействующих фермионов по определению. Таким образом, мы ищем минимум следующего функционала: $\langle E \rangle_{BKS} - TS|_{\min}$ и закономерно приходим к известному по **задаче 4.4** и **задаче 5.6** тригонометрическому уравнению

$$|\operatorname{tg} 2\theta_k| = \frac{\Delta(T)}{\xi_k}, \quad v_l u_l = \frac{1}{2} \sin 2\theta_l = \frac{\Delta(T)}{2\varepsilon_l}$$

$$\Delta(T) = V \sum_l v_l u_l (1 - 2f_l) = V \sum_l \frac{\Delta(T)}{2\varepsilon_l} (1 - 2f_l). \quad (132)$$

Сокращая в выражении (132) левую и правую часть на $\Delta(T)$, мы получим следующее равенство:

$$1 = \frac{V}{2} \sum_l \frac{1 - 2f_l}{\sqrt{\xi_l^2 + \Delta^2(T)}}. \quad (133)$$

Учтем следующую особенность фермиевской функции распределения:

$$1 - 2f_k = 1 - \frac{2}{e^x + 1} = \frac{e^{x/2} - e^{-x/2}}{e^{x/2} + e^{-x/2}} = \operatorname{th}(x/2). \quad (134)$$

В выражении (133) совершим предельный переход – перейдем от суммы к интегралу (считая для простоты физический объем единичным): $\sum_l \rightarrow \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} N(\xi) d\xi$, и при этом предположим,

что плотность состояний в интересующем нас интервале энергий мало уходит от своего значения, взятого на уровне Ферми $N(\xi) \approx N(0)$.

Тогда мы получим по аналогии с уравнением (98) из **задачи 4.5**:

$$1 = \frac{N(0)V}{2} 2 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}} \cdot \operatorname{th}\left(\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}}{2k_B T}\right). \quad (135)$$

К сожалению, мы не можем найти из этого уравнения прямой связи между энергетической щелью и температурой $\Delta(T)$, но зато можем рассмотреть частный случай – случай критической температуры $T = T_C$, при которой по определению щель обращается в ноль: $\Delta(T_C) = 0$.

$$1 = \frac{N(0)V}{2} 2 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\xi} \cdot th\left(\frac{\xi}{2k_B T_C}\right).$$

При переходе к безразмерным переменным мы получаем интеграл вида:

$$I = \int_0^{\hbar\omega_D/k_B T_C} \frac{dx}{x} \cdot th\left(\frac{x}{2}\right) \cong \ln(x)th(x/2) \Big|_0^{\hbar\omega_D/k_B T_C} - \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dx \frac{\ln x}{ch^2(x/2)}.$$

Здесь мы воспользовались тем, что $\hbar\omega_D \gg k_B T_C$. По этой же причине

$$th\left(\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_C}\right) \approx 1, \quad ch^2(x/2) \rightarrow e^x/4.$$

Итак: $\frac{1}{N(0)V} = \ln\left(\frac{\hbar\omega_D}{k_B T_C}\right) - \frac{1}{2}C$, где C – интеграл Эйлера:

$C = \ln \gamma = \int_0^{\infty} dx \ln x \exp(-x) = -0.577$. Мы получили следующее выражение уже на величину критической температуры:

$$k_B T_C = 1.14 \cdot \exp\left(-\frac{1}{N(0)V}\right) \cdot \hbar\omega_D. \quad (136)$$

Напомним, что аналогично выглядела формула (101) из **задачи 4.5**:

$$\Delta(T=0) \equiv \Delta_0 = 2\hbar\omega_D \cdot \exp\left(-\frac{1}{N(0)V}\right).$$

Сравнивая полученные выражения, мы получаем:

$$k_B T_C = 0.57 \cdot \Delta_0. \quad (137)$$

Задача 5.10 Исследовать зависимость энергетической щели в спектре боголюбовских квазичастиц от температуры.

В **задаче 5.8** была получена связь энергетической щели в спектре боголюбовских квазичастиц с функцией распределения для ферми-частиц

$$\Delta_l = -\sum_k V_{kl} u_k v_k (1 - 2f_k). \quad (138)$$

При формулировке приближения Купера мы не делали никаких предположений о том, при каких температурах оно верно, а, значит, и в данном случае мы можем положить, что

$$V_{kl} = -\frac{V}{L^3} = const \Rightarrow \Delta_k \equiv \Delta. \Rightarrow 1 = \frac{V}{2L^3} \sum_k \frac{1 - 2f_k}{\sqrt{(\Delta(T))^2 + \xi_k^2}}. \quad (139)$$

Полученное уравнение позволяет исследовать зависимость $\Delta(T)$.

Отметим, что при $T \rightarrow 0$ мы получаем уравнение (97) из задачи 4.5:

$$1 = \frac{V}{2L^3} \sum_k \frac{1}{\sqrt{\Delta_0^2 + \xi_k^2}}, \quad \Delta_0 \equiv \Delta(T=0) \equiv \Delta_T|_{T=0}.$$

В этом пределе выражение для энергетической щели нам уже известно:

$$\Delta_0 = \frac{\hbar\omega_D}{sh(1/VN(0))} \quad \text{или} \quad 1 = VN(0) \cdot arcsh\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0}\right).$$

При $T \neq 0$ из уравнения (139) получаем, что:

$$\frac{V}{2L^3} \sum_k \frac{1}{\varepsilon_k} - 1 = \frac{V}{L^3} \sum_k \frac{f_k}{\varepsilon_k}, \quad \varepsilon_k = \sqrt{\xi_k^2 + (\Delta(T))^2}. \quad (140)$$

Учтем, что $\frac{V}{2L^3} \sum_k \frac{1}{\varepsilon_k} = VN(0) \cdot arcsh\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_T}\right)$ и тогда левая часть полученного уравнения будет

иметь вид:

$$VN(0) \cdot arcsh\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_T}\right) - VN(0) \cdot arcsh\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0}\right).$$

При анализе правой части уравнения (140) подставим явный вид распределения Ферми:

$$\begin{aligned} \frac{V}{L^3} \sum_k \frac{f_k}{\varepsilon_k} &= \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{VN(0)d\xi}{\varepsilon(\exp(\varepsilon/k_B T) + 1)} = // \sum \rightarrow L^3 \int N(\xi)d\xi; \quad N(\xi) \approx N(0) // \\ &= I\left(\frac{\Delta}{T}\right) \cdot VN(0) \cdot 2 \end{aligned}$$

Выполним замену $x = \xi/T, u = \Delta/T, T = k_B T$ (последнее равенство означает, что в рамках данной задачи далее мы будем измерять температуру в энергетических единицах) и займемся исследованием возникшего в правой части уравнения (140) интеграла:

$$I(u) = \int_0^{\hbar\omega_D/T} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + u^2} (\exp(\sqrt{x^2 + u^2}) + 1)}. \quad (141)$$

Рассмотрим предельные случаи поведения этого интеграла.

1) Предел $\Delta \ll \hbar\omega_D; T \ll \Delta, u \gg 1$.

В этом приближении распределение Ферми-Дирака переходит в хорошо известное распределение Больцмана:

$$\Rightarrow (\exp(\sqrt{x^2 + u^2}) + 1)^{-1} \cong \exp(-\sqrt{x^2 + u^2})$$

Тогда интеграл (141) можно переписать в следующем виде:

$$I(u) = \int_0^{\hbar\omega_D \rightarrow \infty} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + u^2}} \exp(-\sqrt{x^2 + u^2}) \cong \int_0^{\infty} \frac{dx}{u\sqrt{1 + x^2/u^2}} \exp\left(-u\sqrt{1 + x^2/u^2}\right).$$

Квадратный корень в экспоненте можно разложить в ряд Тейлора $\sqrt{1 + x^2/u^2} = 1 + \frac{x^2}{2u^2} - \frac{x^4}{8u^4}$, оставив в знаменателе предэкспоненциальной дроби только одно слагаемое:

$$\Rightarrow I(u) \approx \frac{e^{-u}}{u} \int_0^{\infty} dx \cdot \exp(-x^2 / 2u) = /x = \sqrt{2u} y // = \sqrt{\frac{\pi}{2u}} \cdot e^{-u}.$$

Тогда уравнение (140) принимает относительно простой вид:

$$\operatorname{arcsch}\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_T}\right) - \operatorname{arcsch}\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0}\right) = 2 \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2u}} \cdot \exp(-u). \quad (142)$$

Представим $\operatorname{arcsch}(\cdot)$ через натуральный логарифм и разложим первое слагаемое в (142) в ряд Тейлора около точки $x_0 = \frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0}$ для $T=0$, сразу учитывая, что $x \gg I$:

$$\operatorname{arcsch}(x) = \ln\left(x + \sqrt{1 + x^2}\right); \operatorname{arcsch}(x)|_{x_0} = \ln(2x_0) + \frac{1}{x_0} \cdot (x - x_0).$$

Тогда для левой части уравнения (142) получим:

$$\ln\left(2 \frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0}\right) + \frac{\Delta_0}{\hbar\omega_D} \cdot \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_T} - \frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0}\right) - \ln\left(2 \frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0}\right) = \frac{\Delta_0 - \Delta_T}{\Delta_T}.$$

В линейном приближении $\Delta_T \approx \Delta_0$, поэтому:

$$\frac{\Delta_0 - \Delta_T}{\Delta_T} \approx \frac{\Delta_0 - \Delta_T}{\Delta_0} = 2 \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2u}} \cdot \exp(-u).$$

Отсюда получаем вид зависимости $\Delta = \Delta(T)$ при малых температурах:

$$\Delta(T) = \Delta_0 \cdot \left\{ 1 - \sqrt{\frac{2\pi T}{\Delta_0}} \cdot \exp(-\Delta_0 / T) \right\}. \quad (143)$$

Отметим, что экспонента $\exp(-\Delta_0 / T)$ в выражении (143) определяет концентрацию возбуждений в рассматриваемом идеальном газе. Итак, на прилагаемом рисунке представлена зависимость $\Delta(T)$ для случая малых температур.

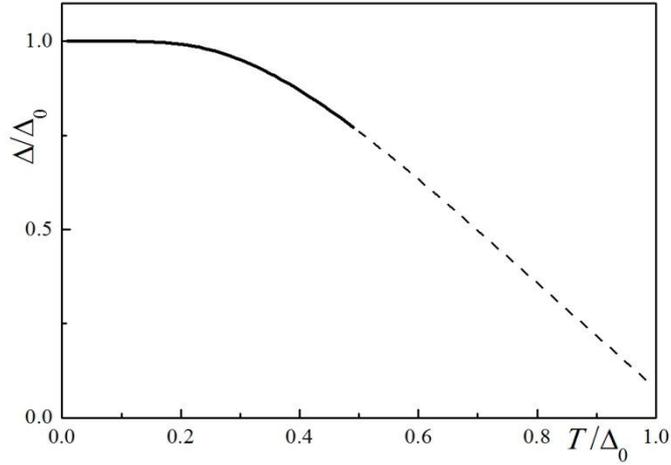


Рисунок 20 - График зависимости величины щели от температуры в «низкотемпературном» приближении.

2) Осталось еще один интересный частный случай: когда температура близка к критической, при которой энергетическая щель обращается в ноль ($T \approx T_C$). В таком случае, мы считаем, что $\Delta(T) \rightarrow 0$ и $u \rightarrow 0$.

Преобразуем уравнение (3) для данного предельного случая:

$$1 - 2f_k = 1 - \frac{2}{e^x + 1} = \frac{e^{x/2} - e^{-x/2}}{e^{x/2} + e^{-x/2}} = th(x/2). \quad (144)$$

Тогда,

$$1 = \frac{VN(0)}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}} \cdot th\left(\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}}{2T}\right), \quad (145)$$

и, проводя замену $x = \xi/T$, $u = \Delta/T$, $T = k_B T$ получим:

$$1 = \frac{VN(0)}{2} 2 \underbrace{\int_0^{\hbar\omega_D/T} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + u^2}} \cdot th\left(\frac{\sqrt{x^2 + u^2}}{2}\right)}_{I(u)}. \quad (146)$$

Представим входящий в правую часть уравнения (146) интеграл в следующем виде:

$$I(u) = \int_0^{\infty} dx \cdot \left\{ \frac{1}{\sqrt{x^2 + u^2}} \cdot th\left(\frac{\sqrt{x^2 + u^2}}{2}\right) - \frac{1}{x} \cdot th\left(\frac{x}{2}\right) \right\} + \int_0^{\infty} dx \cdot \frac{1}{x} \cdot th\left(\frac{x}{2}\right) = \underset{=0, \text{ при } u=0}{I_1} + I_0.$$

Вычислим слагаемое I_1 , полагая возможным верхний предел интегрирования заменить на бесконечность:

$$\frac{d}{dx} \left\{ \frac{1}{\sqrt{x^2 + u^2}} \cdot th\left(\frac{\sqrt{x^2 + u^2}}{2}\right) \right\}_{u^2=0} = -\frac{1}{x^2} \cdot th(x/2) + \frac{1}{x} \cdot \frac{d}{dx} \{th(x/2)\} = \frac{d}{dx} \left\{ \frac{1}{x} \cdot th(x/2) \right\}.$$

$$I_1 = u^2 \cdot \int_0^{\infty} \frac{dx}{x} \cdot \left\{ \frac{1}{x} \cdot th(x/2) \right\} = // \text{Разлагаем } th(x/2) \text{ в ряд Лорана} // = - \underbrace{\frac{7\xi(3)}{8\pi^2}}_{=A<0} u^2,$$

где введена дзета-функция Римана $\xi(z) = \sum_{n=1}^{\infty} 1/n^z$, причем $\xi(3) = 1.2$.

Теперь приступим к вычислению интеграла I_0 . Здесь уже верхний предел интегрирования заменить бесконечностью нельзя, так как в этом случае интеграл будет расходиться.

$$I_0 = \int_0^{\hbar\omega_D/T} dx \cdot \frac{1}{x} \cdot th(x/2) = \left(\ln x \cdot th(x/2) \right) \Big|_0^{\hbar\omega_D/T} - \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^{\infty} dx \frac{\ln x}{ch^2(x/2)}}_{B=\ln(\pi/2\gamma)},$$

где $\ln \gamma = C = \int_0^{\infty} dx \ln x \cdot e^{-x} = -0.577$. В итоге I_0 перепишем как: $I_0 = \ln \frac{\hbar\omega_D}{T} - B$.

Собирая все вместе, получим, что $1 = VN(0) \cdot \left\{ \ln \frac{\hbar\omega_D}{T} - B - A \cdot \left(\frac{\Delta(T)}{T} \right)^2 \right\}$, но, с другой стороны,

$$1 = VN(0) \cdot \operatorname{arcsch} \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0} \right) \cong VN(0) \cdot \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta_0} \right).$$

Получаем следующее равенство:

$$\ln \left(\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta_0} \right) = \ln \left(\frac{\hbar\omega_D}{T} \right) - B - A \cdot \left(\frac{\Delta(T)}{T} \right)^2,$$

$$\ln \left(\frac{2T}{\Delta_0} \right) = -B - A \cdot \left(\frac{\Delta(T)}{T} \right)^2,$$

$$\ln \left(\frac{\Delta_0}{T} \right) = \underbrace{B + \ln 2}_{\tilde{B}} + A \cdot \left(\frac{\Delta(T)}{T} \right)^2. \quad (147)$$

Из последнего равенства можно получить уже известную связь критической температуры с Δ_0 :

$$\frac{\Delta_0}{T_C} = \exp(\tilde{B}) = 1.76.$$

Остался последний рывок – и мы получим выражение для энергии щели в окрестности критической температуры. Преобразуем левую часть выражения (147) следующим способом:

$$\ln\left(\frac{\Delta_0}{T}\right) = \ln\left(\frac{\Delta_0}{T_C} \cdot \frac{T_C}{T}\right) = \ln\left(\frac{\Delta_0}{T_C}\right) + \ln\left(\frac{T_C}{T}\right) = \ln\left(\frac{\Delta_0}{T_C}\right) + \ln\left(\frac{1}{1 + \frac{T - T_C}{T_C}}\right) \cong$$

$$\cong \underbrace{\ln\left(\frac{\Delta_0}{T_C}\right)}_B + \frac{T_C - T}{T_C}.$$

Тогда из выражения (147), сократив \tilde{B} слева и справа от знака равенства, получаем:

$$\Delta(T \rightarrow T_C) = \frac{1}{\sqrt{A}} \cdot T_C \cdot \sqrt{1 - T/T_C} \approx 3.06 \cdot T_C \cdot \sqrt{1 - T/T_C}.$$

Объединяем два случая для $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow T_C$ и получаем асимптотики зависимости, представленной на рисунке к данной задаче.

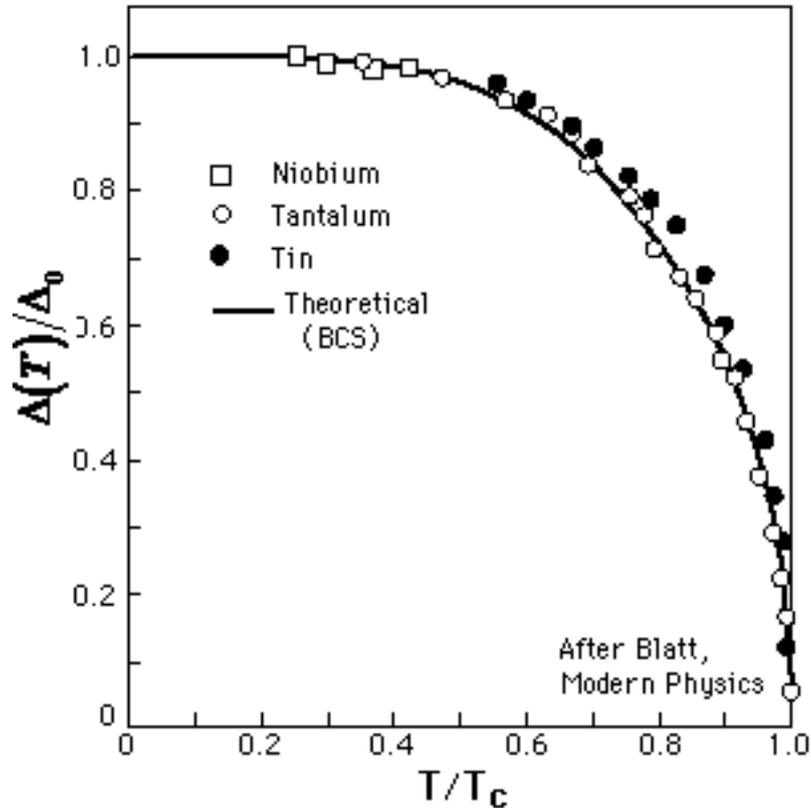


Рисунок 21 — Зависимость величины энергетической щели в спектре возбуждений от температуры (теория и эксперимент). По материалам работы: *Blatt*.

Подробно проблемы этой главы разобраны в работах: *Де Жен, Зайцев, Мельников, Свидзинский, Тинкхам, Anderson, Zagoskin*.

Глава 6. Пространственно-неоднородные задачи сверхпроводимости: уравнения Боголюбова – де Жена

Ранее мы рассматривали пространственно однородный (изотропный) неидеальный ферми-газ в качестве простейшей модели сверхпроводящего материала. Для перехода к анализу реальных устройств, использующих это макроскопическое квантовое явление сверхпроводимости, необходимо построить математический аппарат, позволяющий, как минимум, учитывать:

- 1) присутствие внешних полей, задаваемых через векторный потенциал $\vec{A}(\vec{r})$ и скалярный потенциал $\eta(\vec{r})$;
- 2) существование примесей, границ и иных нарушений в регулярной структуре кристаллической решетки, поля от которых дают вклад $U_0(\vec{r})$ в оператор Гамильтона всей системы.

В этом случае, квазиимпульс электронов в рассматриваемом неидеальном ферми-газе уже не сохраняется, что заставляет нас перейти из импульсного представления в координатное и ввести здесь операторы уничтожения/рождения частицы в заданной точке с заданной проекцией спина:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_k e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}_{k,\sigma}; \quad \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \sigma) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_k e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}_{k,\sigma}^+$$

Для этих операторов по-прежнему действуют антикоммутиационные соотношения, введенные во второй главе:

$$\begin{aligned} \{\hat{\psi}(\vec{r}, \sigma), \hat{\psi}^+(\vec{r}', \sigma')\} &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \delta_{\sigma, \sigma'}; \\ \{\hat{\psi}(\vec{r}, \sigma), \hat{\psi}(\vec{r}', \sigma')\} &= \{\hat{\psi}^+(\vec{r}, \sigma), \hat{\psi}^+(\vec{r}', \sigma')\} = 0 \end{aligned}$$

Будем, как и ранее рассматривать электронный газ с учетом электрон-фононного взаимодействия, выделяя две части в гамильтониане этой системы с переменным числом частиц:

$$\hat{H}_0 + \hat{H}_1 = \hat{H} \Rightarrow \hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}, \quad \mu = E_F,$$

где

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma} \int d^3r \left(\hat{\Psi}^+(\vec{r}, \sigma) \left(\frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U_0(\vec{r}, \sigma) \right) \hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma) \right)$$

есть «одночастичная» часть, не включающая учет взаимодействия между частицами. Будем по умолчанию считать, что рассматриваемые «примеси» не обладают магнитным моментом, т.е.

$U_0(\vec{r}, \sigma) = U_0(\vec{r})$. Анализ потенциальной энергии в гамильтониане (БКШ) потребует модификации гипотезы Купера при переходе в координатное представление.

Задача 6.1 Показать, что гипотеза Купера при переходе в координатное представление эквивалентна гипотезе о существовании исключительно двухчастичных контактных взаимодействий, математическая формулировка которой представлена ниже:

$$V_{\sigma\sigma'}(\vec{r}, \vec{r}') = \delta_{\sigma\sigma'} \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}') \cdot V. \quad (148)$$

Эту задачу нетрудно решить, если начать с более общего принципа. Рассмотрим хорошо известные из курса теоретической физики операторы координаты и импульса частицы \hat{P} и \hat{Q} . Теперь вспомним, как записываются эти операторы в координатном представлении:

$$\hat{P}_x \varphi_x(x) \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi_x(x); \quad \hat{Q}_x \varphi_x(x) \equiv x \varphi_x(x) \quad (149)$$

Теперь запишем импульсное представление:

$$\hat{P}_p \varphi_p(p) \equiv p \varphi_p(p); \quad \hat{Q}_p \varphi_p(p) \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \varphi_p(p) \quad (150)$$

При этом волновые функции в координатном и импульсном представлении оказываются связанными преобразованием Фурье (интегрирование ведется по всему множеству действительных чисел):

$$\varphi_x(x) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \varphi_p(p) dp; \quad \varphi_p(p) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \varphi_x(x) dx \quad (151)$$

Мы научились преобразовывать волновые функции. Теперь посмотрим, как преобразуются операторы при переходе между координатным и импульсным представлениями. Рассмотрим произвольный оператор \hat{A}_x , действующий на волновую функцию в координатном представлении. Результат действия этого оператора, $\hat{A}_x \varphi_x(x)$, можно переписать в интегральной форме через вспомогательную функцию $A(x, y)$ по следующему правилу:

$$\hat{A}_x \varphi_x(x) = \int_{\mathbb{R}^3} A(x, y) \varphi_x(y) dy. \quad (152)$$

Далее мы при преобразовании оператора должны поступить так же, как и с волновой функцией в выражении (151):

$$\hat{A}_p \varphi_p(p) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \hat{A}_x \varphi_x(x) dx, \quad (153)$$

и теперь подставляем интегральное представление оператора (4) в (3):

$$\begin{aligned}\hat{A}_p \varphi_p(p) &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \int_{\mathbb{R}^3} A_x(x, y) \varphi_x(y) dx dy \\ \hat{A}_p \varphi_p(p) &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \int_{\mathbb{R}^3} A(x, y) \int_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{iqy}{\hbar}} \varphi_p(q) dq dx dy = \int_{\mathbb{R}^3} A_p(p, q) \varphi_p(q) dq\end{aligned}\quad (154)$$

Здесь введено обозначение:

$$A_p(p, q) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int_{\mathbb{R}^6} e^{\frac{i(q-p)y}{\hbar}} A(x, y) dx dy. \quad (155)$$

При этом, вспоминая выражение (152), нетрудно заметить, что если оператор \hat{A}_x является оператором умножения на функцию (это наш случай-гипотеза Купера), то $A(x, y) = f(x)\delta(x-y)$ – будет называться ядром оператора.

$$\begin{aligned}A_p(p, q) &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int_{\mathbb{R}^6} e^{\frac{i(q-p)y}{\hbar}} A(x, y) dx dy = \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int_{\mathbb{R}^6} e^{\frac{i(q-p)y}{\hbar}} f(x) \delta(x-y) dx dy = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int_{\mathbb{R}^6} e^{\frac{i(q-p)x}{\hbar}} f(x) dx\end{aligned}\quad (156)$$

При этом можно построить обратное преобразование:

$$A_x(x, y) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int_{\mathbb{R}^6} e^{\frac{i(x-y)p}{\hbar}} f(p) dp, \text{ где } f(p) \text{ – оператор в имп. предст.} \quad (157)$$

$$\hat{A}_x \varphi_x(x) = \int_{\mathbb{R}^3} A_x(x, y) \varphi_x(y) dq. \quad (158)$$

Теперь перейдем к основной части решения, используя интегральное представление вида: $\hat{A}_x \varphi_x(x) = \int_{\mathbb{R}^3} A_x(x, y) \varphi_x(y) dq$, при этом выражение для $A_x(x, y)$ мы уже получили выше как формулу (10). Найдем вид $A_x(x, y)$ (т.е. вид фурье-образа оператора взаимодействия в рамках теории БКШ):

$$A_x(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int_{\mathbb{R}^6} e^{\frac{i(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)p}{\hbar}} (-V \delta(\sigma_1, -\sigma_2)) dp = -V \delta(\sigma_1, -\sigma_2) \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

Это и требовалось нам получить. Далее, мы будем полагать ради собственного удобства, что $V = V \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3$.

С учетом сделанных предположений вклад межчастичных взаимодействий в гамильтониан можно записать следующим образом:

$$\hat{H}_1 = -V \int d^3r \{ \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \uparrow) \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \downarrow) \hat{\Psi}(\vec{r}, \downarrow) \hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow) \}.$$

Вспомним, что для выделенного электрона в многоэлектронном атоме в приближении Хартри задачу на определение собственных функций и собственных значений одноэлектронного оператора полной энергии можно существенно упростить:

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + \sum_{i=1}^N \int U(\vec{r} - \vec{r}_i) |\psi_i(\vec{r}_i)|^2 d\vec{r}_i \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}). \quad (\text{Хартри})$$

Здесь для сокращения объема выкладок мы использовали атомную систему единиц: $e = m_e = \hbar = 1$. Суммирование в выражении (Хартри) выполняется по номерам всех N электронов, за исключением рассматриваемого. Взаимодействие между электронами является короткодействующим из-за обсуждавшегося выше эффекта экранирования электрического поля в металле, что позволяет описать его при помощи дельта-функции, $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = U_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, и дает

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + U(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}); \quad U(\vec{r}) = N U_0 \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}).$$

Обобщение метода Хартри-Фока на случай рассматриваемого неидеального ферми-газа при замене взаимодействия между частицами на взаимодействие со «средним полем» позволяет построить модельный гамильтониан (по аналогии с задачей 5.3) в виде квадратичной формы:

$$\hat{H}_{eff} = \int d^3r \left\{ \sum_{\sigma} [\hat{\Psi}^+(\vec{r}, \sigma) \hat{H}_e \hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma) + B(\vec{r}) \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \sigma) \hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma)] + \Delta(\vec{r}) \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \uparrow) \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \downarrow) + \Delta^*(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow) \hat{\Psi}(\vec{r}, \downarrow) \right\},$$

где $\hat{H}_e = \frac{1}{2m} (-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 + U_0(\vec{r}, \sigma) - E_F$ – «одноэлектронный гамильтониан»;

$B(\vec{r})$ – энергия взаимодействия между электронами за счет сил кулоновского отталкивания, представленная за счет взаимодействия со «средним полем» Хартри-Фока (существующее и в нормальном металле «действительное среднее поле»),

$\Delta(\vec{r})$ – аналог этого поля, учитывающий существование электрон-фононного взаимодействия между электронами с противоположно направленными спинами, называемый потенциалом спаривания (характерное для сверхпроводников «комплексное среднее поле»).

Получившийся гамильтониан не является диагональным относительно операторов $\hat{\Psi}$ и $\hat{\Psi}^+$, а значит – необходимо его диагонализировать с помощью известного преобразования Боголюбова:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow) = \sum_k \{u_k(\vec{r})\hat{\alpha}_{k\uparrow} - v_k^*(\vec{r})\hat{\alpha}_{k\downarrow}^+\}, \quad \hat{\Psi}(\vec{r}, \downarrow) = \sum_k \{u_k(\vec{r})\hat{\alpha}_{k\downarrow} + v_k^*(\vec{r})\hat{\alpha}_{k\uparrow}^+\}.$$

Рассматриваемые преобразования должны быть унитарными, и это обстоятельство накладывает определенные условия на веса u_k, v_k .

Задача 6.2 Найти уравнения для определения весовых коэффициентов u_k, v_k в преобразованиях Боголюбова, обеспечивающих диагонализацию эффективного гамильтониана БКШ в координатном представлении.

Будем решать обратную задачу: считаем, что мы уже нашли выражения для u_k, v_k , тогда эффективный гамильтониан должен иметь следующий вид:

$$\hat{H}_{eff}^{diag} = E_0 + \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k \hat{\alpha}_{k\sigma}^+ \hat{\alpha}_{k\sigma}. \quad (159)$$

Теперь запишем уравнения движения для определения вида u_k, v_k .

Сначала вычислим коммутаторы вида $[\hat{\alpha}_{k,\sigma}, \hat{H}_{eff}^{diag}]$ и $[\hat{\alpha}_{k,\sigma}^+, \hat{H}_{eff}^{diag}]$. Для этого сосредоточимся на анализе лишь одного слагаемого из суммы:

$$\begin{aligned} [\hat{\alpha}_{k',\sigma'}^+, \varepsilon_k \hat{\alpha}_{k,\sigma}^+ \hat{\alpha}_{k,\sigma}] &= (\hat{\alpha}_{k',\sigma'}^+ \hat{\alpha}_{k,\sigma}^+ \hat{\alpha}_{k,\sigma} - \hat{\alpha}_{k,\sigma}^+ \hat{\alpha}_{k,\sigma} \hat{\alpha}_{k',\sigma'}^+) \cdot \varepsilon_k = \\ &= \varepsilon_k [(1 - \hat{\alpha}_{k,\sigma}^+ \hat{\alpha}_{k,\sigma}) \hat{\alpha}_{k,\sigma} - \hat{\alpha}_{k,\sigma}^+ \hat{\alpha}_{k,\sigma} \hat{\alpha}_{k',\sigma'}^+] \Rightarrow [\hat{\alpha}_{k,\sigma}, \hat{H}_{eff}^{diag}] = \varepsilon_k \hat{\alpha}_{k,\sigma}, \end{aligned}$$

Аналогичным образом можно получить, что

$$[\hat{\alpha}_{k,\sigma}^+, \hat{H}_{eff}^{diag}] = -\varepsilon_k \hat{\alpha}_{k,\sigma}^+.$$

1) Вычислим коммутатор $[\hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma), \hat{H}_{eff}]$. Будем решать задачу по частям:

$$\begin{aligned} &\left[\hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma), \int d^3 r' \left\{ \sum_{\sigma'} \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \sigma') \hat{H}_e(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}', \sigma') \right\} \right] = \hat{H}_e(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma); \\ &\left[\hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma), \int d^3 r' \left\{ \sum_{\sigma'} B(\vec{r}') \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \sigma') \hat{\Psi}(\vec{r}', \sigma') \right\} \right] = B(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma); \\ &\left[\hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow), \int d^3 r' \Delta(\vec{r}') \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \uparrow) \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \downarrow) \right] = \\ &= \int d^3 r' \{ \Delta(\vec{r}') \cdot (\hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow) \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \uparrow) \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \downarrow) - \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \uparrow) \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \downarrow) \hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow)) \} = \\ &= \int d^3 r' \{ \Delta(\vec{r}') \cdot (\hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow) \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \uparrow) \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \downarrow) - \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \uparrow) \hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow) \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \downarrow)) \} = \\ &= \int d^3 r' \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \Delta(\vec{r}') \cdot \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \downarrow) = \Delta(\vec{r}) \cdot \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \downarrow) \\ &\left[\hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow), \int d^3 r' \Delta^*(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}', \downarrow) \hat{\Psi}(\vec{r}', \uparrow) \right] = 0. \end{aligned}$$

Итак, мы получили следующие выражения:

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow), \hat{H}_{eff}] = (\hat{H}_e + B(\vec{r})) \hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow) + \Delta(\vec{r}) \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \downarrow), \quad (160)$$

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}, \downarrow), \hat{H}_{eff}^{\downarrow}] = (\hat{H}_e + B(\vec{r}))\hat{\Psi}(\vec{r}, \downarrow) - \Delta(\vec{r})\hat{\Psi}^+(\vec{r}, \uparrow). \quad (161)$$

Теперь выразим $\hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow)$ и $\hat{\Psi}(\vec{r}, \downarrow)$ через дискретные преобразования Боголюбова и запишем коммутатор:

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow), \hat{H}_{eff}^{diag}] &= \left[\sum_k \{u_k(\vec{r})\hat{\alpha}_{k\uparrow} - v_k^*(\vec{r})\hat{\alpha}_{k\downarrow}^+\}, \hat{H}_{eff}^{diag} \right] = \\ &= \sum_k \left\{ u_k(\vec{r}) \left[\hat{\alpha}_{k\uparrow}, \hat{H}_{eff}^{diag} \right] - v_k^*(\vec{r}) \left[\hat{\alpha}_{k\downarrow}^+, \hat{H}_{eff}^{diag} \right] \right\} = \sum_k \varepsilon_k \left\{ u_k(\vec{r})\hat{\alpha}_{k\uparrow} + v_k^*(\vec{r})\hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ \right\}. \end{aligned} \quad (162)$$

Очевидно, что основные уравнения динамики при диагонализации гамильтониана должны сохраняться, а, значит, должно выполняться условие

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma), \hat{H}_{eff}^{\downarrow}] = [\hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma), \hat{H}_{eff}^{diag}].$$

Приравняем значения коэффициентов при операторах $\hat{\alpha}_{k\sigma}$ и $\hat{\alpha}_{k\sigma}^+$ и получим **уравнения для определения весовых коэффициентов в преобразованиях Боголюбова**

$$\varepsilon_k u_k(\vec{r}) = (\hat{H}_e + B(\vec{r}))u_k(\vec{r}) + \Delta(\vec{r})v_k(\vec{r}), \quad (163)$$

$$\varepsilon_k v_k(\vec{r}) = -(\hat{H}_e^* + B(\vec{r}))v_k(\vec{r}) + \Delta^*(\vec{r})u_k(\vec{r}), \quad (164)$$

называемые уравнениями Боголюбова – де Жена.

Их также можно переписать в матричном виде:

$$\varepsilon_k \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \hat{\Omega} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}, \quad \hat{\Omega} = \begin{pmatrix} \hat{H}_e + B(\vec{r}) & \Delta(\vec{r}) \\ \Delta^*(\vec{r}) & -(\hat{H}_e^* + B(\vec{r})) \end{pmatrix}. \quad (165)$$

Оператор $\hat{\Omega}$, как видно из его формы – эрмитов, а значит его собственные функции – ортонормированы. Можно сказать, что собственные значения и ортонормированные собственные функции (спиноры) оператора Боголюбова – де Жена $\hat{\Omega}$ определяют **спектр состояний** в рассматриваемом неидеальном ферми-газе (сверхпроводнике). Элементы спинора $\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}$ определяют амплитуды вероятности обнаружить в окрестности заданной точки частицу либо в «электроноподобном», либо в «дырочноподобном» состоянии соответственно. Отметим, что если в модифицированном гамильтониане БКШ положить «комплексное среднее поле» равным нулю, то тогда уравнение (165) распадается на два уравнения Шредингера для электроно- и дырочноподобных квазичастиц, обсуждавшиеся в рамках решения **задачи 2.3**.

Задача 6.3 Пусть вектор $\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}$ является собственным для оператора Боголюбова – де

Жена и соответствует собственному значению $+\varepsilon$. Покажите, что вектор $\begin{pmatrix} v_k^* \\ -u_k^* \end{pmatrix}$ также является собственным и $(-\varepsilon)$ является соответствующим собственным значением.

Попробуем подставить спинор $\begin{pmatrix} v_k^* \\ -u_k^* \end{pmatrix}$ в уравнения, комплексно сопряженные к уравнениям Боголюбова – де Жена. Придется рассмотреть следующее матричное произведение:

$$\begin{pmatrix} \hat{H}_e + B(\vec{r}) & \Delta(\vec{r}) \\ \Delta^*(\vec{r}) & -(\hat{H}_e^* + B(\vec{r})) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_k^* \\ -u_k^* \end{pmatrix} = \lambda_k \begin{pmatrix} v_k^* \\ -u_k^* \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} (\hat{H}_e + B(\vec{r}))v_k^*(\vec{r}) - \Delta(\vec{r})u_k^*(\vec{r}) &= \lambda_k v_k^*(\vec{r}) \\ (\hat{H}_e^* + B(\vec{r}))u_k^*(\vec{r}) + \Delta^*(\vec{r})v_k^*(\vec{r}) &= -\lambda_k u_k^*(\vec{r}) \end{aligned}$$

Комплексно сопрягаем эти два уравнения и учтем, что $\varepsilon_k \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \hat{\Omega} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}$:

$$\begin{aligned} (\hat{H}_e^* + B(\vec{r}))v_k(\vec{r}) - \Delta^*(\vec{r})u_k(\vec{r}) &= \lambda_k v_k(\vec{r}) \equiv -\varepsilon_k v_k(\vec{r}) \\ (\hat{H}_e + B(\vec{r}))u_k(\vec{r}) + \Delta(\vec{r})v_k(\vec{r}) &= -\lambda_k u_k(\vec{r}) \equiv \varepsilon_k u_k(\vec{r}) \end{aligned}$$

Осюда получаем простой вывод: собственному вектору $\begin{pmatrix} v_k^* \\ -u_k^* \end{pmatrix}$ оператора Боголюбова – де Жена соответствует собственное значение $-\varepsilon_k$.

Задача 6.4 Проверить калибровочную инвариантность уравнений Боголюбова – де Жена.

Отметим, что $\hat{H}_e^* = \frac{1}{2m} \left(i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U_0(\vec{r}, \sigma) - E_F \neq \hat{H}_e$, так как указанные

операторы отличаются знаком перед векторным потенциалом, описывающем внешнее поле. При наличии магнитного поля обобщенный импульс электрона, входящий через одноэлектронный гамильтониан в операторе Боголюбова – де Жена, меняет свой вид:

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - \frac{1}{c} \vec{A}.$$

Здесь \vec{A} – векторный потенциал магнитного поля, для сокращения объема выкладок снова используется атомная система единиц: $e = m_e = \hbar = 1$. Калибровочное преобразование

$\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi$ не меняет такой наблюдаемой в эксперименте величины как напряженность магнитного поля. Для анализа на градиентную инвариантность уравнения (165) произведем следующую замену:

$$u_p'(\vec{r}) = u_p(\vec{r}) \exp(i\chi/c); \quad v_p'(\vec{r}) = v_p(\vec{r}) \exp(-i\chi/c); \quad \Delta'(\vec{r}) = \Delta(\vec{r}) \exp(2i\chi/c).$$

Тогда для действия оператора обобщенного импульса на новое «предполагаемое» решение получим:

$$\begin{aligned} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{1}{c} \vec{A}' \right) u_p'(\vec{r}) &= \left(-i\nabla - \frac{1}{c} \vec{A} - \frac{1}{c} \nabla\chi \right) u_p(\vec{r}) \exp(i\chi/c) = \\ &= \exp(i\chi/c) \left(-i\nabla - \frac{1}{c} \vec{A} - \frac{1}{c} \nabla\chi + \frac{1}{c} \nabla\chi \right) u_p(\vec{r}) = \exp(i\chi/c) \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{1}{c} \vec{A} \right) u_p(\vec{r}). \\ \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{1}{c} \vec{A}' \right)^2 u_p'(\vec{r}) &= \exp(i\chi/c) \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{1}{c} \vec{A} \right)^2 u_p(\vec{r}) \end{aligned}$$

Следовательно, уравнение (163) из **задачи 6.2** преобразуется в уравнение

$$\varepsilon_p u_p'(\vec{r}) = \left\{ \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{1}{c} \vec{A}' \right)^2 - \varepsilon_F + U_0(\vec{r}) + B(\vec{r}) \right\} u_p'(\vec{r}) + \Delta'(\vec{r}) v_p'(\vec{r}),$$

с той же общей структурой, что и исходное. Видно, что при таком калибровочном преобразовании не меняется энергия боголюбовской квазичастицы ε_p .

Упражнение 6.1 Рассмотреть для квантовой системы, связанной с термостатом, возможность введения понятия температуры с использованием формализма матрицы плотности.

При анализе этой проблемы рекомендуется выделить в гамильтониане системы части, связанные с квантовой системой, термостатом и взаимодействием между ними:

$$\hat{H}_{tot} = \hat{H}_n + \hat{H}_T + V_{int}.$$

Волновая функция, описывающая состояние всей системы имеет вид:

$$|\psi_{tot}(t)\rangle = \sum_{k,\alpha} C_{k,\alpha}(t) |k\rangle \otimes |\alpha\rangle, \quad \otimes - \text{тензорное произведение,}$$

$\{|k\rangle\}$ – полный набор функций подсистемы, $\{|\alpha\rangle\}$ – полный набор функций термостата

Оператор \hat{A} , соответствующий переменной квантовой подсистемы, характеризуется матричными элементами $\langle k | \hat{A} | k' \rangle$ и зависимость от переменных термостата пропорциональна символу Кронекера $\delta_{\alpha,\alpha'}$. Его среднее значение по волновой функции будет записываться, как:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \langle \psi_{tot}(t) | \hat{A} | \psi_{tot}(t) \rangle = \sum_{\substack{k,\alpha \\ k',\alpha'}} C_{k,\alpha}^*(t) C_{k',\alpha'}(t) \langle k | \hat{A} | k' \rangle \langle \alpha | \delta_{\alpha,\alpha'} | \alpha' \rangle = \sum_{k,k'} \hat{\rho}_{k',k}(t) \langle k | \hat{A} | k' \rangle.$$

Можно ввести оператор плотности $\hat{\rho}(t)$ для описания квантовой системы в контакте с термостатом вместо волновой функции:

$$\rho_{k',k}(t) = \sum_{\alpha} C_{k,\alpha}^*(t) C_{k',\alpha}(t) \Leftrightarrow \rho_{k,k'}(t) = \sum_{\alpha} C_{k,\alpha}(t) C_{k',\alpha}^*(t).$$

Оператору соответствует эрмитова матрица $\rho_{k,k'} = \rho_{k',k}^*$, на диагонали которой стоят вероятности обнаружения k - того квантового состояния подсистемы $w_k = \rho_{kk}$ (при любом состоянии термостата T), причем $Sp\{\hat{\rho}\} = \sum_k \rho_{k,k} = 1$, и матрица при размерности пространства состояний n имеет $n^2 - 1$ элементов.

В каждый момент времени эту матрицу можно привести к диагональному виду. Если система изолирована и находится в определённом квантовом состоянии, то на диагонали матрицы будет одна единица. При этом $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$, что можно толковать как критерий чистого состояния.

Изолированную систему (подсистему: $\hat{\rho}_{tot} = \hat{\rho} \otimes \hat{\rho}_T$, $\hat{V}_{int} \equiv 0$, где $\hat{\rho}_T$ описывает остальную «Вселенную») можно описывать, как с помощью матрицы плотности, так и волновой функцией. Если речь идет о чистом состоянии, то эволюция системы задаётся обсуждавшимся в первой главе уравнением Шредингера, имеющем в терминах матрицы плотности следующий вид:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho_{k',k}(t)}{\partial t} &= i\hbar \sum_{\alpha} \frac{\partial C_{k,\alpha}^*(t)}{\partial t} C_{k',\alpha}(t) + i\hbar \sum_{\alpha} C_{k,\alpha}^*(t) \frac{\partial}{\partial t} C_{k',\alpha}(t) \\ &\downarrow \sum_{\alpha} C_{k,\alpha}^*(t) \qquad \qquad \qquad \downarrow \sum_{\alpha} C_{k',\alpha}(t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{k',\alpha}(t) &= \sum_{k''} \hat{H}_{k',k''} C_{k'',\alpha}(t), \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{k,\alpha}^*(t) = \sum_{k''} \hat{H}_{k,k''}^* C_{k'',\alpha}^*(t) \\ i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} &= [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \end{aligned}$$

Этому уравнению удовлетворяют и матрицы плотности для смешанных состояний, причем $\sum_k C_{k\alpha}^*(t) C_{k,\alpha}(t) = w_{\alpha} (\{C_{k,\alpha}(t)\})$ задает вероятности для набора коэффициентов $\{C_{k,\alpha}(t)\}$, определяющих некоторое смешанное или чистое состояние $|\psi\rangle = \sum_k C_{k,\alpha}(t) |k\rangle$. В любой момент t матрица в пространстве квантовых переменных подсистемы $C_{k\alpha}^*(t) C_{k,\alpha}(t)$ может быть диагонализирована, и вклад в выражении для матрицы плотности слагаемых с данным α можно представить как $|\psi_{\alpha}\rangle w_{\alpha} \langle\psi_{\alpha}| = |\psi\rangle w(\psi) \langle\psi|$, любая матрица плотности представима, как

$\hat{\rho} = \sum_{\psi} |\psi\rangle w(\psi) \langle\psi|^1$. Состояния, по которым идёт суммирование в последнем выражении, в общем случае могут быть неортогональными и образовывать переполненную систему.

Усреднение с использованием матрицы плотности можно интерпретировать, как усреднение по совокупности одинаковых подсистем, находящихся в разных квантовых состояниях (усреднение по ансамблю). Равновесный ансамбль должен описываться матрицей плотности, не зависящей от времени. Поэтому, согласно уравнениям для эволюции матрицы плотности: $[\hat{H}, \hat{\rho}^T] = 0$. Такому уравнению удовлетворит любая функция от гамильтониана $\hat{\rho}^T = f(\hat{H})$. Потребуем, чтобы для двух независимых систем, что означает $\hat{H}_{1+2} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, вероятностные распределения были бы независимы, тогда

$$\hat{\rho}_{1+2}^T(\hat{H}_{1+2}) = \hat{\rho}_1^T(\hat{H}_1) \otimes \hat{\rho}_2^T(\hat{H}_2).$$

Такому уравнению удовлетворяет:

$$\hat{\rho}^T(\hat{H}) = \frac{e^{-\frac{\hat{H}}{T}}}{Z} = e^{\frac{F - \hat{H}}{T}}, \quad F = -T \cdot \ln Z, \quad \text{где } Z = sp \left\{ e^{-\frac{\hat{H}}{T}} \right\} \quad (166)$$

В энергетическом представлении матрица оператора $\hat{\rho}^T(\hat{H})$ диагональна, и на диагонали стоит вероятность для получения квантового состояния системы, контактирующей с термостатом: $w_k = e^{-E_k/T} / Z$. Это распределение по квантовым состояниям системы и есть распределение Гиббса для канонического ансамбля.

Задача 6.5 Для оператора Боголюбова – де Жена выразить через операторы рождения и уничтожения (полевые операторы) функции $B(\vec{r})$ – энергию взаимодействия со «средним полем» Хартри-Фока для нормального металла – и $\Delta(\vec{r})$ – потенциал спаривания для электрон-фононного взаимодействия.

Проведем далее усреднение полученных операторных уравнений по основному состоянию ферми-квазичастиц. Выпишем еще раз гамильтониан БКШ в координатном представлении и эффективный гамильтониан, представленный в виде квадратичной формы:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\sigma} \int d^3r \{ \hat{\Psi}_{\sigma}^+ \hat{H}_e \hat{\Psi}_{\sigma} - V \hat{\Psi}_{\uparrow}^+ \hat{\Psi}_{\downarrow}^+ \hat{\Psi}_{\downarrow} \hat{\Psi}_{\uparrow} \}, \quad (167)$$

¹ $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ – критерий чистого состояния, поскольку $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle\psi|$ и, взяв $|\psi\rangle$ в качестве одного из базисных состояний при диагонализации, получим для матрицы этого оператора только одну единицу на диагонали, остальные элементы будут равны нулю.

$$\hat{H}_{eff} = \int d^3r \left\{ \sum_{\sigma} [\hat{\Psi}^+(\vec{r}, \sigma)(\hat{H}_e + B(\vec{r}))\hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma) + \Delta(\vec{r})\hat{\Psi}^+(\vec{r}, \uparrow)\hat{\Psi}^+(\vec{r}, \downarrow) + \Delta^*(\vec{r})\hat{\Psi}(\vec{r}, \uparrow)\hat{\Psi}(\vec{r}, \downarrow)] \right\}. \quad (168)$$

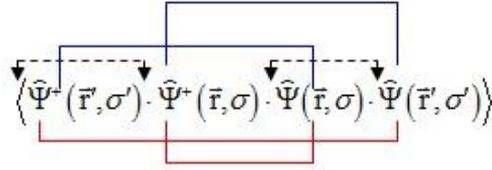
Из термодинамики нам известно, что если предоставить нашу систему (с переменным числом частиц – куперовских пар) самой себе, то со временем система достигнет минимума большого термодинамического потенциала $F=H-TS-\mu N$. Так как член TS будет входить равно как в БКШ-гамильтониан, так и в эффективный, а последнее слагаемое может быть привычно включено в кинетическую энергию, нас будет интересовать именно оператор энергии полной.

Усреднение гамильтониана БКШ в координатном представлении (167) требует вычисления среднего от произведений четырех операторов рождения и уничтожения.

Для анализа этого «объекта» воспользуемся теоремой Вика:

- а) среднее от произведения любого нечетного числа операторов $\hat{\Psi}^+$ и $\hat{\Psi}$ равно нулю;
- б) среднее от произведения четного их числа есть сумма всех возможных произведений попарных средних.

Всевозможные пары для произведения четырёх полевых операторов схематически представлены на следующей схеме:



Интересующее нас среднее значение распадается на сумму трёх слагаемых, в каждом из которых мы, используя свойства антикоммутирующих операторов, добиваемся единого порядка в расположении операторов рождения и уничтожения:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \sigma') \cdot \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \sigma) \cdot \hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma) \cdot \hat{\Psi}(\vec{r}', \sigma') \rangle &= \langle \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \sigma') \cdot \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \sigma) \rangle \langle \hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma) \cdot \hat{\Psi}(\vec{r}', \sigma') \rangle - \\ &- \langle \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \sigma') \cdot \hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma) \rangle \langle \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \sigma) \cdot \hat{\Psi}(\vec{r}', \sigma') \rangle + \langle \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \sigma') \cdot \hat{\Psi}(\vec{r}', \sigma') \rangle \langle \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \sigma) \cdot \hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma) \rangle. \end{aligned} \quad (169)$$

«Аномальное» среднее от произведения двух операторов рождения, которое иногда называют оператором рождения пары, отлично от нуля в сверхпроводящем состоянии и даётся формулой:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \sigma') \cdot \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \sigma) \rangle &= \sum_{\substack{\vec{k}_1 = -\vec{k}_2 \\ \sigma' = -\sigma}} \frac{e^{-i(\vec{r}'\vec{k}_1 + \vec{r}\vec{k}_2)}}{\Omega} \left\langle \left(u_{\vec{k}_1, \sigma}^* \hat{\alpha}_{\vec{k}_1, \sigma'}^+ + v_{\vec{k}_1, \sigma}^* \hat{\alpha}_{-\vec{k}_1, -\sigma'}^- \right) \left(u_{\vec{k}_2, \sigma}^* \hat{\alpha}_{\vec{k}_2, \sigma}^+ + v_{\vec{k}_2, \sigma}^* \hat{\alpha}_{-\vec{k}_2, -\sigma}^- \right) \right\rangle = \\ &= \delta_{\sigma, -\sigma'} \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{e^{-i\vec{k}(\vec{r}' - \vec{r})}}{\Omega} \left(u_{\vec{k}, \sigma}^* v_{-\vec{k}, -\sigma}^* \langle \hat{\alpha}_{\vec{k}, \sigma}^+ \hat{\alpha}_{\vec{k}, \sigma}^- \rangle + v_{\vec{k}, \sigma}^* u_{-\vec{k}, -\sigma}^* \langle \hat{\alpha}_{-\vec{k}, -\sigma}^- \hat{\alpha}_{-\vec{k}, -\sigma}^+ \rangle \right) \sim \delta_{\sigma, -\sigma'} \end{aligned}$$

Для «обычного» парного среднего имеем:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Psi}^+(\vec{r}', \sigma') \cdot \hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma) \rangle &= \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \sigma, \sigma'} \frac{e^{-i(\vec{r}'\vec{k}_1 - \vec{r}\vec{k}_2)}}{\Omega} \left\langle \left(u_{\vec{k}_1, \sigma'}^* \hat{\alpha}_{\vec{k}_1, \sigma'}^+ + v_{\vec{k}_1, \sigma'}^* \hat{\alpha}_{-\vec{k}_1, -\sigma'}^+ \right) \left(u_{\vec{k}_2, \sigma} \hat{\alpha}_{\vec{k}_2, \sigma} + v_{\vec{k}_2, \sigma} \hat{\alpha}_{-\vec{k}_2, -\sigma}^+ \right) \right\rangle = \\ &= \delta_{\sigma, \sigma'} \sum_k \frac{e^{-i\vec{k}(\vec{r}' - \vec{r})}}{\Omega} \left(u_{\vec{k}, \sigma}^* u_{\vec{k}, \sigma} \langle \hat{\alpha}_{\vec{k}, \sigma}^+ \hat{\alpha}_{\vec{k}, \sigma} \rangle + v_{\vec{k}, \sigma}^* v_{\vec{k}, \sigma} \langle \hat{\alpha}_{-\vec{k}, -\sigma}^+ \hat{\alpha}_{-\vec{k}, -\sigma}^+ \rangle \right) \sim \delta_{\sigma, \sigma'} \end{aligned}$$

Наконец, отметим, что когда в среде нет магнитоактивных примесей, способных «перевернуть» спин отдельной частицы, второе слагаемое в правой части выражения (169) равно нулю.

Приступим непосредственно к решению вариационной задачи на определение минимума свободной энергии системы. И гамильтониан БКШ в координатном представлении, и эффективный гамильтониан с этой точки зрения равносильны, и, следовательно, их вариации должны совпадать.

$$\delta \langle \hat{H}_{BCS} \rangle = \sum_{\sigma} \int d^3r \left\{ \begin{aligned} &\delta \langle \hat{\Psi}_{\sigma}^+ \hat{H}_e \hat{\Psi}_{\sigma} \rangle - V \cdot \delta \langle \hat{\Psi}_{\uparrow}^+ \hat{\Psi}_{\downarrow}^+ \rangle \langle \hat{\Psi}_{\downarrow} \hat{\Psi}_{\uparrow} \rangle \\ &+ V \cdot \delta \langle \hat{\Psi}_{\uparrow}^+ \hat{\Psi}_{\uparrow} \rangle \langle \hat{\Psi}_{\downarrow}^+ \hat{\Psi}_{\downarrow} \rangle \end{aligned} \right\} + C.C. \quad (170)$$

$$\delta \langle \hat{H}_{eff} \rangle = \int d^3r \left\{ \begin{aligned} &\sum_{\sigma} \delta \langle \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \sigma) (\hat{H}_e + B(\vec{r})) \hat{\Psi}(\vec{r}, \sigma) \rangle + \\ &+ \Delta(\vec{r}) \cdot [\delta \langle \hat{\Psi}^+(\vec{r}, \uparrow) \hat{\Psi}(\vec{r}, \downarrow) \rangle + C.C.] \end{aligned} \right\}. \quad (171)$$

Для одного и того же состояния и при произвольных вариациях должны совпадать коэффициенты в выражениях (170) и (171):

$$B(\vec{r}) = -V \cdot \langle \hat{\Psi}_{\uparrow}^+ \hat{\Psi}_{\uparrow} \rangle = -V \cdot \langle \hat{\Psi}_{\downarrow}^+ \hat{\Psi}_{\downarrow} \rangle; \quad (172)$$

$$\Delta(\vec{r}) = -V \cdot \langle \hat{\Psi}_{\downarrow} \hat{\Psi}_{\uparrow} \rangle = +V \cdot \langle \hat{\Psi}_{\uparrow} \hat{\Psi}_{\downarrow} \rangle. \quad (173)$$

Задача 6.6 Найти явные выражения для действительного и комплексного среднего поля в операторе Боголюбова – де Жена.

Исследуем выражения (172) и (173) из предыдущей задачи для энергии взаимодействия выделенного электрона со «средним полем» Хартри-Фока с учетом сперва межэлектронного отталкивания, а затем – электрон-фононного притяжения:

$$\begin{aligned} B(\vec{r}) = -V \cdot \langle \hat{\Psi}_{\uparrow}^+ \hat{\Psi}_{\uparrow} \rangle &= -V \cdot \left\langle \sum_k (u_k(\vec{r}) \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ - v_k^*(\vec{r}) \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+) \sum_j (u_j(\vec{r}) \hat{\alpha}_{j\uparrow} - v_j^*(\vec{r}) \hat{\alpha}_{j\downarrow}^+) \right\rangle = \\ &= // \langle \hat{\alpha}_k^+ \hat{\alpha}_j \rangle_T = f_k \delta_{kj} // = -V \cdot \left\{ \sum_k |u_k(\vec{r})|^2 f_k + |v_k(\vec{r})|^2 (1 - 2f_k) \right\}, \end{aligned} \quad (174)$$

$$\Delta(\vec{r}) = +V \cdot \langle \hat{\Psi}_{\uparrow} \hat{\Psi}_{\downarrow} \rangle = V \cdot \sum_k u_k(\vec{r}) v_k(\vec{r}) (1 - 2f_k), \quad (175)$$

$\frac{1}{1+\exp(\varepsilon_k/T)} = f_k$, ε_k – закон дисперсии для боголюбовских квазичастиц.

Полученные выражения полезно сравнить с формулами для энергии однородного электронного газа с электрон-фононным взаимодействием, выписанной, например, при решении **задачи 5.9**.

Стоит отметить, что в выражениях (174) и (175) $\sum_k |u_k(\vec{r})|^2 f_k$ можно толковать как концентрацию электронов с определенным значением спина, $\sum_k |v_k(\vec{r})|^2 (1-2f_k)$ – дырок, $\sum_k u_k(\vec{r})v_k(\vec{r})(1-2f_k)$ – как функцию, пропорциональную вероятности обнаружения в окрестности заданной точки «скореллированные» электроны с противоположно направленными спинами в окрестности выбранной точки. Это позволяет нам ввести «волновую функцию бозе-конденсата куперовских пар» (или комплексный параметр порядка) в следующей простой форме:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{|\Delta(\vec{r})|}{V} \exp(i\chi(\vec{r})). \quad (176)$$

Для пространственно однородного сверхпроводника выражение (176) сводится к виду $\psi = \frac{\Delta_0}{V} \exp(i\chi)$. Также в этом случае мы приходим из уравнений (165) к целому ряду уже известных по предыдущим главам выводов:

$$\begin{aligned} u_k(\vec{r}) &= u_k \exp\{i\vec{k}\vec{r}\}, \quad v_k(\vec{r}) = v_k \exp\{i\vec{k}\vec{r}\} \\ (\xi_k - \varepsilon_k)u_k - \Delta v_k &= 0, \quad \xi_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_F, \\ \Delta^* u_k + (\xi_k + \varepsilon_k)v_k &= 0, \\ \xi_k^2 = \varepsilon_k^2 - |\Delta|^2, \quad \hbar^2 k^2 &= 2mE_F \pm \sqrt{\varepsilon_k^2 - |\Delta|^2}, \\ u_k &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}}, \quad |v_k| = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}}, \\ \Delta &\propto \sum_k \frac{\Delta}{\varepsilon_k} \frac{\varepsilon_k}{2T}. \end{aligned}$$

Задача 6.7 Найти закон дисперсии для боголюбовских квазичастиц в пространственно однородном сверхпроводнике с током, величина которого определена общим для всех куперовских пар импульсом центра масс \vec{q} . Магнитным полем, в том числе и создаваемым за счет упорядоченного движения куперовских пар, пренебречь.

Система уравнений Боголюбова – де Жена является системой самосогласованных уравнений для определения всех входящих туда величин. Будем искать её решение (пользуясь атомной системой единиц) в виде

$$u_p(\vec{r}) = U_p \exp[i(\vec{p} + \vec{q})\vec{r}]; \quad v_p(\vec{r}) = V_p \exp[i(\vec{p} - \vec{q})\vec{r}]; \quad \Delta(r) = \Delta \exp[2i\vec{q}\vec{r}]. \quad (177)$$

Подставляя такие функции в уравнения (165), получим систему алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} \varepsilon_p U_p &= \left\{ \frac{1}{2}(\vec{p} + \vec{q})^2 - \varepsilon_F \right\} U_p + \Delta V_p; \\ \varepsilon_p V_p &= - \left\{ \frac{1}{2}(\vec{p} - \vec{q})^2 - \varepsilon_F \right\} V_p + \Delta U_p. \end{aligned} \quad (178)$$

Введем стандартное обозначение $\xi_p = \frac{1}{2}(p^2 - p_F^2) = p_F(p - p_F)$ и перепишем эту систему в следующем виде, полагая длину вектора \vec{q} малой:

$$\begin{aligned} (\varepsilon_p - \xi_p - \vec{p}\vec{q})U_p &= -\Delta V_p; \\ (\varepsilon_p + \xi_p - \vec{p}\vec{q})V_p &= -\Delta U_p. \end{aligned} \quad (179)$$

Выражение для искомого закона дисперсии (напоминающее, например, выражение (127) из задачи 5.6 после преобразования Лоренца) элементарно получается из этой системы:

$$\varepsilon_p = \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2} + \vec{p}\vec{q}. \quad (180)$$

Как видим, спектр боголюбовских возбуждений снова содержит щель, причем последняя обращается в ноль ($\varepsilon_p = 0$, $\xi_p = 0$, сверхпроводящие свойства вещества исчезают) при выполнении условия $q = \Delta / p_F$.

Задача 6.8 Используя уравнения Боголюбова – де Жена, определить через микроскопические параметры гамильтониана БКШ коэффициенты в функционале Гинзбурга-Ландау (свободной энергии), отнесенном к единице объема, в окрестности критической температуры определяемом как:

$$\phi(T) = \phi_0 + A(T)\Delta^2 + \frac{1}{2}b\Delta^4.$$

В предыдущей задаче было получено уравнение для щели в энергетическом спектре «сверхпроводящего» ферми-газа

$$\Delta(\mathbf{r}) = -V \sum_{\mathbf{p}} u_p(\mathbf{r}) v_p^*(\mathbf{r}) (1 - 2f_p). \quad (181)$$

Коэффициенты преобразования Боголюбова даются соотношением (181) из задачи 6.7 для равной нулю величины сверхпроводящего тока, т.е. при $q = 0$:

$$u_p(r) = U_p \exp[i\vec{p}\vec{r}]; \quad v_p(r) = V_p \exp[i\vec{p}\vec{r}]; \quad \Delta(\vec{r}) = \Delta.$$

Для этих коэффициентов верны следующие равенства:

$$(\varepsilon_p - \xi_p)U_p = -\Delta V_p; \quad (\varepsilon_p + \xi_p)V_p = -\Delta U_p. \quad (182)$$

Здесь $\xi_p = p_F(p - p_F)$; $\varepsilon_p = \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}$. Как и ранее $f_p = [\exp(\varepsilon_p/k_B T) + 1]^{-1}$ – функция распределения Ферми для свободных квазичастиц, $U_p^2 + V_p^2 = 1$ (см. задачу 5.4). Из (182) тогда следуют привычный вид выражений для весовых коэффициентов в преобразованиях Боголюбова и величины Δ :

$$U_p = \frac{\Delta}{\sqrt{2\varepsilon_p(\varepsilon_p - \xi_p)}}; \quad V_p = \frac{\Delta}{\sqrt{2\varepsilon_p(\varepsilon_p + \xi_p)}} \\ 1 = V \sum_p \frac{1}{2\varepsilon_p} \tanh\left(\frac{\varepsilon_p}{2T}\right) = \frac{Vmp_F}{4\pi^2\hbar^3} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\varepsilon_p} \tanh\left(\frac{\varepsilon_p}{2T}\right) d\xi_p. \quad (183)$$

Пределы интегрирования по ξ_p здесь лежат в окрестности энергии E_F и ограничены величиной энергии Дебая $\hbar\omega_D$ (которая мала по сравнению с энергией Ферми). При нулевой температуре из (183) получим хорошо нам известное уравнение для энергетической щели Δ_0 и явный вид оной:

$$1 = \frac{Vmp_F}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi_p}{\sqrt{\xi_p^2 + \Delta_0^2}} = \frac{Vmp_F}{2\pi^2\hbar^3} \ln \frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0}. \quad (184)$$

$$\Delta_0 = \hbar\omega_D \exp\left(-\frac{2\pi^2\hbar^3}{Vmp_F}\right) \ll \hbar\omega_D \ll E_F. \quad (185)$$

Для общего случая конечных температур основное уравнение запишем как

$$\ln \frac{\Delta_0}{\Delta} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi_p}{\varepsilon_p} \left\{ 1 - \tanh\left(\frac{\varepsilon_p}{2T}\right) \right\}, \quad (186)$$

и опять «переведем» температуру в энергетические единицы $T = k_B T$. Ввиду сходимости интеграла верхний предел в (186) распространен до бесконечности.

Теперь обратимся к окрестности критической температуры T_C (т.е. к окрестности точки фазового перехода из нормального состояния в сверхпроводящее), где величина Δ мала. Заменяем переменную интегрирования в (186) на безразмерную энергию $x = \xi_p/T$ и обозначим $u = \Delta/T \ll 1$. Далее, перепишем интеграл в правой части (186) в виде

$$I = \int_0^{\infty} dx \left\{ \frac{1}{\sqrt{x^2 + u^2}} - \frac{1}{x} \tanh \frac{x}{2} - \frac{1}{\sqrt{x^2 + u^2}} \tanh \frac{\sqrt{x^2 + u^2}}{2} + \frac{1}{x} \tanh \frac{x}{2} \right\}. \quad (187)$$

Вычислим отдельные слагаемые в этом интеграле, используя при необходимости приемы из задачи 5.10 и численное интегрирование:

$$I_1 = \int_0^{C \gg 1} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + u^2}} = \ln \frac{2C}{u}. \quad (188)$$

$$\begin{aligned} I_2 &= - \int_0^{C \gg 1} \frac{dx}{x} \tanh \frac{x}{2} = - \int_0^{C \gg 1} \tanh \left(\frac{x}{2} \right) d(\ln x) = \\ &= - \ln C + \int_0^{\infty} \frac{\ln x \cdot dx}{2 \cosh^2(x/2)} = - \ln C - 0.126 \end{aligned} \quad (189)$$

$$I_1 + I_2 = \ln \frac{1.76}{u} \quad (\text{константа } C \text{ сокращается}). \quad (190)$$

В двух последних слагаемых интеграла в (187) проводим разложение в ряд Тейлора

$$I_3 = - \frac{u^2}{2} \int_0^{\infty} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{x} \tanh \frac{x}{2} \right) \frac{dx}{x} = 0.106u^2 \quad (191)$$

Подставляем (190) и (191) в выражение (186) и получаем

$$\ln \frac{\Delta_0}{\Delta} = \ln \frac{1.76T}{\Delta} + 0.106 \left(\frac{\Delta}{T} \right)^2. \quad (192)$$

Из выражения (192) следует, что щель обращается в ноль при критической температуре

$$T_c = 0.568\Delta_0 \ll T_D. \quad (193)$$

В окрестности критической температуры из (192) имеем важное промежуточное итоговое соотношение

$$\Delta = 3.06T_c \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}} \quad (194)$$

Для функционала Гинзбурга-Ландау (свободная энергия) $\phi(T) = \phi_0 + A(T)\Delta^2 + \frac{1}{2}b\Delta^4$ также можно определить величину Δ , исходя из условия минимума:

$$\Delta^2 = - \frac{A}{b}.$$

Подставляя в это соотношение выражение (194), находим коэффициенты в виде

$$A(T) = a(T - T_c) \quad \text{и} \quad b = 0.107 \frac{a}{T_c}. \quad (195)$$

Итак, равновесное значение свободной энергии равно

$$\phi(T) = \phi_0 - \frac{1}{2}b\Delta^4 = \phi_0 - \frac{a^2}{2b}(T_C - T)^2. \quad (196)$$

Строго говоря, в действительности здесь в качестве термодинамического потенциала должна выступать не свободная энергия, определенная при заданном числе частиц, а термодинамический потенциал Ξ , определенный при заданном химическом потенциале, т.е. фиксированной энергии Ферми, однако это замечание не отменяет справедливость полученного выражения.

С другой стороны, эту величину можно вычислить, исходя из микроскопического гамильтониана. Воспользуемся формулой квантовой механики

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial\lambda}\right)_T = \left\langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial\lambda}\right\rangle \quad (197)$$

где λ - параметр задачи. В данном случае в качестве этого параметра выступает характерная величина электрон-фононного взаимодействия V .

Контактное взаимодействие между электронами можно представить в виде

$$\delta\hat{H} = -V\sum_{pp'}\hat{B}_p^+\hat{B}_p \quad (198)$$

где $\hat{B}_p = u_p^2\hat{\alpha}_{-p}\hat{\alpha}_{p+} - v_p^2\hat{\alpha}_{p+}^+\hat{\alpha}_{-p}^+ + u_p v_p \{\hat{\alpha}_{-p}\hat{\alpha}_{-p}^+ - \hat{\alpha}_{p+}^+\hat{\alpha}_{p+}\}$. При усреднении этого выражения при заданных числах заполнения для квазичастиц первые два слагаемых обращаются в ноль, а из последнего слагаемого получим по аналогии, например, с **задачей 6.6**

$$\langle\hat{B}_p\rangle = u_p v_p (1 - 2f_p).$$

Следовательно, из (198) получим, учитывая (181), что

$$\langle\delta\hat{H}\rangle = -V\left[\sum_p u_p v_p (1 - 2f_p)\right]^2 = -\frac{\Delta^2}{V} \sim V. \quad (199)$$

Согласно (197) и (198) находим

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial V}\right)_T = -\frac{\Delta^2}{V^2}; \quad \delta\phi = -\int_0^V \frac{\Delta^2}{V^2} dV. \quad (200)$$

Дифференцируем соотношение (192):

$$\frac{d\Delta_0}{\Delta_0} = 0.212\Delta \frac{d\Delta}{T_C^2}. \quad (201)$$

Из (185) следует, что

$$d\Delta_0 = \frac{2\pi^2\hbar^3}{V^2 m p_F} \Delta_0 dV. \quad (202)$$

Подставляя (202) в (201), находим

$$\frac{2\pi^2\hbar^3}{V^2mp_F}dV = 0.212\Delta\frac{d\Delta}{T_C^2}. \quad (203)$$

Подставляя далее (203) в (200), вычисляем интеграл

$$\delta\phi = -\frac{0.106mp_F}{\pi^2\hbar^3T_C^2}\int_0^\Delta\Delta^3d\Delta = -\frac{0.106mp_F}{4\pi^2\hbar^3T_C^2}\Delta^4. \quad (204)$$

Подставляя (194) в (204), находим окончательное микроскопическое выражение для свободной энергии, связанной образованием куперовских пар:

$$\delta\phi = -\frac{2.32mp_F}{\pi^2\hbar^3}(T_C - T)^2. \quad (205)$$

Сравнивая микроскопическое выражение (205) с феноменологическими выражениями (195) и (196), находим

$$\frac{a^2}{2b} = \frac{2.32mp_F}{\pi^2\hbar^3}; \quad b = 0.107\frac{a}{T_C}. \quad (206)$$

Наконец, из выражения (206) запишем явно коэффициент a :

$$a = \frac{mp_F}{2\pi^2\hbar^3T_C}. \quad (207)$$

Полученные формулы устанавливают связь между феноменологической теорией Гинзбурга-Ландау, удобной для описания коллективов сверхпроводящих электронов при температурах, близкой к критической, и микроскопической теорией сверхпроводимости. Для дальнейшего использования можно их переписать с использованием привычной плотности состояний на поверхности Ферми $N(0) = \frac{mp_F}{2\pi^2\hbar^3}$:

$$a = \frac{N(0)}{T_C}; \quad b = \frac{0.1N(0)}{T_C^2}. \quad (208)$$

Подробности см.: Горелкин; Левитов, Шитов; Шмидт.

Подведем промежуточный итог. При рассмотрении пространственно неоднородных задач сверхпроводимости логичным шагом оказывается переход из импульсного представления в координатное. Соответствующим образом вводятся обратные преобразования Боголюбова, которые, фактически, являются своеобразными Фурье-образами использованных в **Главе 5**:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_\uparrow(\vec{r}) &= \sum_k u_k(\vec{r})\hat{\alpha}_{k\uparrow} + v_k^*(\vec{r})\hat{\alpha}_{-k\downarrow}^+ \\ \hat{\psi}_\downarrow(\vec{r}) &= \sum_k u_k(\vec{r})\hat{\alpha}_{k\downarrow} - v_k^*(\vec{r})\hat{\alpha}_{-k\uparrow}^+ \\ \hat{\psi}_\uparrow^+(\vec{r}) &= \sum_k u_k^*(\vec{r})\hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ + v_k(\vec{r})\hat{\alpha}_{-k\downarrow}, \\ \hat{\psi}_\downarrow^+(\vec{r}) &= \sum_k u_k^*(\vec{r})\hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ - v_k(\vec{r})\hat{\alpha}_{-k\uparrow} \end{aligned}$$

где $u_k(\vec{r}) = u_k e^{i\vec{k}\vec{r}}$ и $v_k(\vec{r}) = v_k e^{i\vec{k}\vec{r}}$.

Замена двухчастичных электрон-электронных и электрон-фононных взаимодействий на эффективные поля приводит гамильтониан БКШ в координатном представлении к виду:

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d^3r \left\{ \hat{\psi}_{r\sigma}^+ \hat{H}_e \hat{\psi}_{r\sigma} + B(\vec{r}) \hat{\psi}_{r\sigma}^+ \hat{\psi}_{r\sigma} \right\} + \int d^3r \left\{ \Delta(r) \hat{\psi}_{r\uparrow}^+ \hat{\psi}_{r\downarrow} + \Delta^*(r) \hat{\psi}_{r\uparrow} \hat{\psi}_{r\downarrow} \right\}.$$

Здесь $\hat{H}_e = \frac{1}{2m} (-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 + U_0(\vec{r}) - E_F$ – одночастичный гамильтониан,

$B(\vec{r}) = -V \langle \psi_{r\downarrow}^+ \psi_{r\downarrow} \rangle = -V \langle \psi_{r\uparrow}^+ \psi_{r\uparrow} \rangle$ – самосогласованный потенциал для электрон-

электронного кулоновского отталкивания, $\Delta(\vec{r}) = +V \langle \psi_{r\uparrow} \psi_{r\downarrow} \rangle = -V \langle \psi_{r\downarrow} \psi_{r\uparrow} \rangle$ –

самосогласованный потенциал для электрон-фононного притяжения или потенциал спаривания,

$\sigma = (\uparrow, \downarrow)$ – проекция спина.

После использования преобразований Боголюбова стационарное уравнение Шредингера для модельного гамильтониана БКШ принимает вид системы уравнений Боголюбова – Де Жена

для спиноров $\begin{pmatrix} u_k(r) \\ v_k(r) \end{pmatrix}$:

$$\varepsilon_k \begin{pmatrix} u_k(r) \\ v_k(r) \end{pmatrix} = \hat{\Omega} \begin{pmatrix} u_k(r) \\ v_k(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_e + B(r) & \Delta(r) \\ \Delta^*(r) & -(\hat{H}_e^* + B(r)) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k(r) \\ v_k(r) \end{pmatrix}.$$

Необходимо добавить, что существование сверхпроводимости в этой модели определяется именно сложным видом введенных квазичастиц. В случае же диагонализации гамильтониана для обычных электронов и дырок матричные элементы потенциала спаривания обращались бы в ноль, и вся построенная теория описывала уже обычный металл.

Эта система дополняется уравнением самосогласования для потенциала спаривания:

$$\Delta(\vec{r}) = V \sum_k u_k(r) v_k^*(r) \left(1 - f_k \left(\frac{\varepsilon_k}{T} \right) \right) = V \sum_k u_k(r) v_k^*(r) \text{th} \left(\frac{\varepsilon_k}{2T} \right). \quad (209)$$

По сути уравнения Боголюбова – де Жена описывают поведение квазичастицы в сложном потенциале $\Delta(\vec{r})$ (самосогласованный потенциал $B(\vec{r})$ можно включить в эффективный химический потенциал системы) над основным состоянием сверхпроводника. Но за счет сильной связи возмущения и сверхпроводящего конденсата решение этой задачи дает нам полную информацию как о квазичастице, так и о взаимодействующем с ней бозе-коллективе. В частности, рост потенциала спаривания в некоторой области при фиксированной температуре ведет там к уменьшению концентрации «нескоррелированных» возбуждений и увеличению концентрации куперовских пар. На качественном уровне переход электронного коллектива в сверхпроводящее состояние при температуре ниже критической можно связать с

возникновением щели в спектре частиц, подчиняющихся уравнению Боголюбова – Де Жена, при этом все члены электронного коллектива, энергии которых попали «в запрещенную Δ -окрестность химического потенциала», включаются в состав бозе-конденсата куперовских пар и конденсируются на основном состоянии.

Уравнения Боголюбова – де Жена позволили описывать произвольные неоднородные структуры со сверхпроводящими слоями, а также наведенную при физическом контакте сверхпроводимость в нормальном металле и диэлектрике. Граничные условия на неоднородностях, которые также понадобятся для полного описания квазичастицы в потенциале, представляют собой обычные условия непрерывности для спиноров и их производных, взятых по нормали к границе. Построение эффективных моделей токопереноса (особенно для достаточно «грязных» материалов) существенно затруднила необходимость описания каждой неоднородности как отдельного потенциального барьера. По сути это означает, что «уделом теории Боголюбова – де Жена является описание «чистых» структур, в которых длина свободного пробега частицы l_e гораздо больше характерных длин разрушения когерентности куперовских пар.

Похожие проблемы неоднократно встречались в квантовой теории поля и квантовой статистике, и применение методов этих теорий для решения задач сверхпроводимости оказалось вполне успешным. Так можно ввести пару функций Грина:

$$G_E(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_n \frac{u_n(\vec{r})u_n^*(\vec{r}')}{E - E_n}$$

$$F_E(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_n \frac{u_n(\vec{r})v_n^*(\vec{r}')}{E - E_n},$$

где G_E и F_E – нормальная и аномальная функции Грина, соответственно. «Структура» последней, как видим, вызывает ассоциации с введенными ранее определениями «аномального среднего» и щели в спектре возбуждений в сверхпроводнике.

Упражнение 6.2 Отталкиваясь от представления взаимодействия рассмотреть причинные функции Грина для простейших квантовых систем.

Гамильтониан квантовой системы стоит рассматривать в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}$. В представлении взаимодействия в качестве базиса используются собственные состояния невозмущенной задачи: $|\alpha\rangle(t) = \exp(-iE_\alpha t/\hbar)|\alpha\rangle$, где E_α – спектр оператора \hat{H}_0 . Уравнение Шредингера в таком базисе имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{B3}}{\partial t} = \hat{H}_{\text{int}}(t)\psi_{B3}, \quad \hat{H}_{\text{int}}(t) = e^{(i/\hbar)\hat{H}_0 t} \hat{H}_{\text{int}} e^{-(i/\hbar)\hat{H}_0 t}.$$

Формальное решение записывается в виде $\psi_{B3}(t) = \hat{S}(t)\psi_{B3}(0)$, где

$$\hat{S}(t) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}_{\text{int}}(t') dt' \right],$$

T – хронологическое произведение операторов:

$$T\hat{A}(x)\hat{B}(x') = \begin{cases} \hat{A}(x)\hat{B}(x'); & t > t' \\ \pm \hat{B}(x')\hat{A}(x); & t < t' \end{cases}.$$

Знак «+» соответствует бозе-операторам, «-» – ферми-операторам. Упомянутые выше ψ -операторы (много частиц!) в представлении взаимодействия записываются как:

$$\hat{\Psi}_{B3}(x) = e^{(i/\hbar)\hat{H}_0 t} \hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{r}) e^{-(i/\hbar)\hat{H}_0 t}; \quad \hat{\Psi}_{B3}^+(x) = e^{(i/\hbar)\hat{H}_0 t} \hat{\Psi}_{\alpha}^+(\vec{r}) e^{-(i/\hbar)\hat{H}_0 t}.$$

Здесь x – четырехкоордината, α – спиновой индекс (для фермионов). Тогда введем **причинную функцию Грина**:

$$G_{\alpha\beta}^c(x, x') = -i \langle T \hat{\Psi}_{B3}(x) \hat{\Psi}_{B3}^+(x') \rangle. \quad (210)$$

Скобки $\langle \dots \rangle$ означают $\langle S_0 \rangle^{-1} \langle 0 | \dots | 0 \rangle$, $\langle S_0 \rangle = \langle 0 | e^{-iH_0 t/\hbar} | 0 \rangle$ – матричный элемент по основному состоянию невозмущенной системы.

В однородной системе легко перейти в импульсное представление:

$$G_{\alpha\beta}^c(x-x') = \iint G_{\alpha\beta}(\varepsilon, \mathbf{p}) e^{-i\varepsilon(t-t') + i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{d\varepsilon d^3 p}{(2\pi)^4}.$$

Отметим следующие интересные соотношения: $\hat{\psi}_{\alpha}(t) = \sum_k e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{+(i/\hbar)\hat{H}_0 t} \hat{a}_{k,\alpha} e^{-(i/\hbar)\hat{H}_0 t}$, $\hat{H}_0 = \sum_k \hat{a}_k^{\dagger} \hat{a}_k$.

$$f(\alpha) \equiv e^{\alpha \hat{a}^{\dagger} \hat{a}} \hat{a} e^{-\alpha \hat{a}^{\dagger} \hat{a}} = e^{-\alpha} \hat{a}, \quad f_+(\alpha) \equiv e^{\alpha \hat{a}^{\dagger} \hat{a}} \hat{a}^{\dagger} e^{-\alpha \hat{a}^{\dagger} \hat{a}} = e^{+\alpha} \hat{a}^{\dagger} \quad (\text{см.: Хаккен}).$$

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{\alpha}(t) &= \sum_k e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}_{k,\alpha} e^{-(i/\hbar)\xi_k t} \\ \Rightarrow \hat{\psi}_{\alpha}^+(t) &= \sum_k e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger} e^{+(i/\hbar)\xi_k t}. \end{aligned}$$

$$G(x, x') = -i \left\langle \sum_{k,k'} e^{-i(\vec{k}\vec{r}' - \xi_k t'/\hbar)} e^{+i(\vec{k}\vec{r} - \xi_k t/\hbar)} \cdot \underbrace{(\hat{a}_k \hat{a}_k^{\dagger} + \hat{a}_{k'}^{\dagger} \hat{a}_{k'})}_{\delta_{k,k'}} \right\rangle = -i \sum_{k,k'} \exp \left\{ +i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}') - i\xi_k(t' - t)/\hbar \right\}.$$

Пусть $\vec{r}' = 0; t' = 0$, тогда $G_0(\vec{r}, t) = \begin{cases} -i \sum_k e^{i\vec{k}\vec{r}} G_k(t), & t \geq 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases}$, где $G_k(t) = \exp\left(-i \frac{\xi_k t}{\hbar}\right)$ – функция

Грина свободной частицы.

Для идеального ферми-газа функция Грина в импульсном представлении:

$$G_{\alpha\beta}(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{p}} + i0 \operatorname{sgn}(|\mathbf{p}| - p_0)}; \quad \varepsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E_F; \quad p_0 = \sqrt{2mE_F}.$$

Для описания термодинамических равновесных систем обычно используется мацубаровское представление с переходом к мнимому времени: $t \rightarrow i\tau_M$, $E_n \rightarrow i\omega_n$, $\hbar = 1$. В основе мацубаровской техники лежит аналогия между:

$$\begin{array}{ll} \text{операторной экспонентой} & \text{оператором эволюции} \\ \hat{U}_\beta = \exp(-\beta(\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}})) & \hat{U}(t) = \exp(-it(\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}})). \end{array}$$

Усреднение различных величин по распределению Гиббса: $\langle \hat{A} \dots \hat{B} \rangle_T = \sum_n w_n \langle n | \hat{A} \dots \hat{B} | n \rangle$,

где $|n\rangle$ – собственное состояние системы с энергией E_n , $w_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}$; $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$. Далее можно

ввести гайзенберговские операторы, и мацубаровское представление взаимодействия, везде заменяя время мнимым временем (связанным с обратной температурой β): $\tau = -i\beta$.

Мацубаровская S-матрица удовлетворяет уравнению:

$$\hat{S}(\tau) = e^{-\tau \hat{H}_0} \hat{A} e^{\tau \hat{H}_0}; \quad \frac{d\hat{S}(\tau)}{d\tau} = -\hat{H}_{\text{int}}(\tau) \hat{S}(\tau); \quad \hat{S}(\tau) = T_\tau \exp\left(-\int_0^\tau \hat{H}_{\text{int}}(\tau) d\tau\right).$$

Средние в мацубаровском представлении взаимодействия:

$$\langle \hat{A} \dots \hat{B} \rangle_T = \frac{Sp(\hat{A}(\beta) \dots \hat{B}(\beta) \hat{S}(\beta) e^{-\beta \hat{H}_0})}{Sp(\hat{S}(\beta) e^{-\beta \hat{H}_0})}.$$

Мнимое время τ изменяется в пределах от 0 до β , а функции Грина определены на отрезке $[-\beta; \beta]$. Правила диаграммной техники почти не меняются, только коэффициент перед мацубаровской диаграммой есть $(-1)^{F+n}$

Удобно перейти к частотному представлению, где

$$G(\tau, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = T \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} G(\omega_n, \mathbf{r}, \mathbf{r}'),$$

где $\omega_n = \pi n / \beta$. Условие (анти)периодичности для $G(\tau) = \pm G(\tau + \beta)$ означает, что $G(i\omega_n) \neq 0$ для $\omega_n = 2\pi n T$ в случае бозе-частиц и для $\omega_n = (2n+1)\pi T$ в случае фермионов.

Упражнение 6.3 Рассмотреть мацубаровское представление для операторов рождения и уничтожения и средних чисел заполнения.

Рекомендуется начать рассмотрение со случая идеального газа с оператором Гамильтона вида $\hat{H} = \sum_k \xi_k \cdot \hat{a}_k^+ \hat{a}_k$, причем через ξ_k здесь мы обозначаем закон дисперсии для частиц в этой системе. Тогда отдельные интересные операторные соотношения в представлении Мацубары будут иметь вид:

$$\hat{a}_k(\tau) = e^{\tau \hat{H}} \cdot \hat{a} \cdot e^{-\tau \hat{H}}, \quad \frac{d\hat{a}_k(\tau)}{d\tau} = e^{\tau \hat{H}} \left[\hat{H} \cdot \hat{a}_k \right] \cdot e^{-\tau \hat{H}},$$

$$\begin{aligned} [\hat{H} \cdot \hat{a}_{ki_0}] &= \left[\sum_k \xi_k \cdot \hat{a}_k^+ \hat{a}_k, \hat{a}_{ki_0} \right] = \xi_{k_0} (\hat{a}_{k_0}^+ \hat{a}_k \hat{a}_{ki_0} - \hat{a}_{ki_0} \hat{a}_{k_0}^+ \hat{a}_{k_0}) = \xi_{k_0} (\hat{a}_{k_0}^+ \hat{a}_{k_0} - \hat{a}_{ki_0} \hat{a}_{k_0}^+) \hat{a}_{k_0} = -\xi_k \hat{a}_{k_0}, \\ \frac{d\hat{a}_k(\tau)}{d\tau} &= -\xi_k \hat{a}_k(\tau) \Rightarrow \hat{a}_k(\tau) = e^{-\tau \xi_k} \hat{a}_k. \end{aligned}$$

В итоге можно прийти, используя статистическое распределение Гиббса, к следующим выражениям для средних чисел заполнения в системе бозонов/фермионов (sp – сумма диагональных элементов матрицы, под этим знаком можно производить циклическую перестановку операторов):

$$\begin{aligned} \bar{n}_k = \langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle &= \frac{sp \{ \hat{a}_k^+ \hat{a}_k e^{-\hat{H}/T} \}}{sp \{ e^{-\hat{H}/T} \}} = \frac{sp \{ \hat{a}_k^+ e^{\hat{H}/T} e^{-\hat{H}/T} \hat{a}_k e^{-\hat{H}/T} \}}{sp \{ e^{-\hat{H}/T} \}} = \frac{sp \{ \hat{a}_k^+ e^{-\hat{H}/T} \hat{a}_k (1/T) \}}{sp \{ e^{-\hat{H}/T} \}} = \\ &= \frac{sp \{ \hat{a}_k^+ e^{-\hat{H}/T} \hat{a}_k (1/T) \}}{sp \{ e^{-\hat{H}/T} \}} = \frac{sp \{ \hat{a}_k^+ e^{-\hat{H}/T} \hat{a}_k (1/T) \}}{sp \{ e^{-\hat{H}/T} \}} = \frac{e^{-\xi_k/T} sp \{ \hat{a}_k^+ e^{-\hat{H}/T} \hat{a}_k \}}{sp \{ e^{-\hat{H}/T} \}} = \\ &= \frac{e^{-\xi_k/T} sp \{ \hat{a}_k \hat{a}_k^+ e^{-\hat{H}/T} \}}{sp \{ e^{-\hat{H}/T} \}} = e^{-\xi_k/T} = e^{-\xi_k/T} (1 \pm \bar{n}_k) \begin{cases} B - \mathcal{E} \\ \Phi - D \end{cases} \\ \bar{n}_k = e^{-\xi_k/T} (1 \pm \bar{n}_k) &\Rightarrow \bar{n}_k = \frac{1}{e^{\xi_k/T} \mp 1} \begin{cases} B - \mathcal{E} \\ \Phi - D \end{cases}. \end{aligned}$$

В представлении Мацубары интеграл по всем энергиям записывается в виде суммы по мацубаровским частотам $\omega_n = \pi T(2n+1)$, а уравнения Боголюбова – де Жена принимают вид:

$$\begin{pmatrix} i\omega - \hat{H}_e - B(r) & \Delta(r) \\ \Delta^*(r) & i\omega + \hat{H}_e^* + B(r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_\omega \\ F_\omega \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta(r-r') \\ 0 \end{pmatrix}$$

Эта система называется уравнениями Горькова. При фиксированной температуре эти функции имеют смысл корреляционных для электронов с параллельными и антипараллельными спинами.

Упражнение 6.4 Получить уравнения Горькова в представлении Мацубары из уравнений Горькова в энергетическом представлении.

Напомним (см. формулу (165)), что уравнения Боголюбова – де Жена в матричном представлении выглядят следующим образом:

$$\mathcal{E}_k \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_e + B(\vec{r}) & \Delta(\vec{r}) \\ \Delta^*(\vec{r}) & -(\hat{H}_e^* + B(\vec{r})) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}.$$

Так как собственная функция вида $\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}$ ортогональна, то следовательно должны выполняться следующие соотношения:

$$\sum_n u_n(\vec{r}) u_n^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

$$\sum_n v_n(\vec{r}) u_n^*(\vec{r}') = 0,$$

$$\begin{pmatrix} E - \hat{H}_e - B(r) & \Delta(r) \\ \Delta^*(r) & E + \hat{H}_e^* + B(r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_E \\ F_E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta(r - r') \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим следующее соотношение, которое нам пригодится чуть позже:

$$\hat{T}_\tau \{ \hat{A}(\tau_1) \hat{B}(\tau_2) \} = \theta(\tau_1 - \tau_2) \hat{A}(\tau_1) \hat{B}(\tau_2) - \theta(\tau_2 - \tau_1) \hat{B}(\tau_2) \hat{A}(\tau_1),$$

где $\theta(\tau_1 - \tau_2)$ - функция Хэвисайда, а \hat{T}_τ - хронологический оператор. Продифференцируем выражение для определения функции Грина (210) по переменной τ_1 и учтем, что производная от функции Хэвисайда является δ -функцией.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau_1} \left[\hat{T}_\tau \{ \hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r}_1, \tau_1) \hat{\Psi}_\uparrow^+(\vec{r}_2, \tau_2) \} \right] = \\ & = \delta(\tau_1 - \tau_2) \underbrace{\left\{ \hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r}_1, \tau_1), \hat{\Psi}_\uparrow^+(\vec{r}_2, \tau_2) \right\}_+}_{\text{антикоммутирует}} + \hat{T}_\tau \left\{ \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial \tau_1} \hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r}_1, \tau_1) \right]}_{\text{уравнение Гайзенберга}} \cdot \hat{\Psi}_\uparrow^+(\vec{r}_2, \tau_2) \right\} = \quad (211) \\ & = \delta(\tau_1 - \tau_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - \hat{T}_\tau \left[\hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r}_1, \tau_1), \hat{H} \right]_- \hat{\Psi}_\uparrow^+(\vec{r}_2, \tau_2). \end{aligned}$$

Подставим в полученное выражение гамильтониан \hat{H} в виде приведенного методом Хартри-Фока гамильтониана \hat{H}_{eff} для неоднородного сверхпроводника. Напомним, что для такого гамильтониана мы знаем коммутационные соотношения:

$$\left[\hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r}_1, \tau_1), \hat{H}_{eff} \right]_- = \left(\hat{H}_e + B(\vec{r}) \right) \hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r}_1, \tau_1) + \Delta(\vec{r}_1) \hat{\Psi}_\downarrow^+(\vec{r}_1, \tau_1).$$

Тогда учитывая соотношение (211), получим:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau_1} G(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \tau_1, \tau_2) = -\delta(\tau_1 - \tau_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \\ & + \underbrace{\left(\hat{H}_e + B(\vec{r}) \right)}_{=\hat{\xi}} G(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \tau_1, \tau_2) + \Delta(\vec{r}_1) \underbrace{\left\langle \hat{T}_\tau \hat{\Psi}_\downarrow^+(\vec{r}_1, \tau_1) \hat{\Psi}_\uparrow^+(\vec{r}_2, \tau_2) \right\rangle}_{\text{термодинамическое среднее}} \end{aligned}$$

Усредненная часть последнего слагаемого в полученном выражении называется **аномальной функцией Грина** в представлении Мацубары F_ω . Комбинируя слагаемые, мы приходим к **уравнениям Горькова в представлении Мацубары**:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial \tau_1} - \hat{\xi} \right) G_\omega + \Delta(\vec{r}) F_\omega &= -\delta(\tau_1 - \tau_2) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ \left(\frac{\partial}{\partial \tau_1} + \hat{\xi}^* \right) F_\omega + \Delta^*(\vec{r}) G_\omega &= 0 \end{aligned} \quad (212)$$

Традиционно эти уравнения записываются в следующей форме:

$$\begin{aligned} \left\{ i\omega \hat{\sigma}_z + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \mu + U(r_1) + \hat{\Delta} - \hat{P} \right\} \hat{G}(r_1, r_2) &= \delta(r_1 - r_2), \\ \hat{\Delta} = \begin{bmatrix} 0 & \Delta \\ -\Delta^* & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{G}(r_1, r_2) = \begin{bmatrix} G & -F \\ F^+ & G^+ \end{bmatrix}, \quad \hat{P} = \frac{1}{2\pi\tau N(0)} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ \Delta = -\frac{\pi T}{2} \sum_{\omega} Sp(\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y) \hat{G}(r_1, r_1), \quad N(0) = mp_F / 2\pi^2, \quad \tau = \ell / v_F \\ j = i \frac{eT}{m} \sum_{\omega} \lim_{r_1 \rightarrow r_2} \left\{ \frac{\partial}{\partial r_1} - \frac{\partial}{\partial r_2} \right\} Sp \hat{\sigma}_z \hat{G}(r_1, r_2), \quad \omega = \pi T(2n+1) \end{aligned}$$

Упражнение 6.5 Исследовать решения уравнений Горькова для пространственно-однородного сверхпроводника.

Указание. Запишем уравнения Горькова в интуитивно более понятном (несколько упрощенном) виде:

$$\begin{aligned} \left(-i\omega + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + E_F \right) G_\omega(r, r') + \Delta(r) F_\omega(r, r') &= \delta(r - r') \\ \left(i\omega + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + E_F \right) F_\omega(r, r') - \Delta^*(r) G_\omega(r, r') &= 0 \end{aligned}$$

Заодно здесь следует развить отмеченную ранее связь между потенциалом спаривания (щелью в спектре возбуждений) и аномальной функцией Грина:

$$\begin{aligned} \Delta(r) &= V \sum_k u_k(r) v_k^*(r) th(\varepsilon_k / 2T) = VT \sum_k \sum_{\omega} u_k(r) v_k^*(r) \frac{2\varepsilon_k}{\omega^2 + \varepsilon_k^2} = \\ &= VT \sum_k \sum_{\omega} \left[\frac{u_k(r) v_k^*(r)}{i\omega - \varepsilon_n} - \frac{u_k(r) v_k^*(r)}{i\omega + \varepsilon_n} \right] = VT \sum_{\omega} F_\omega(r, r) \end{aligned}$$

Для однородного сверхпроводника задача радикально упрощается:

$$\begin{aligned} G_\omega(\vec{r}, \vec{r}') &= \int d\vec{p} G_\omega(\vec{p}) \exp\{i\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')\}, \quad F_\omega(\vec{r}, \vec{r}') = \int d\vec{p} F_\omega(\vec{p}) \exp\{i\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')\}, \\ \left(-i\omega + \frac{1}{2m} p^2 + E_F \right) G_\omega(p) + \Delta F_\omega(p) &= 1 \\ \Delta^* G_\omega(p) - \left(i\omega + \frac{1}{2m} p^2 + E_F \right) F_\omega(p) &= 0 \end{aligned}$$

И тогда получаем:

$$G_{\omega}(p) = \frac{i\omega - \xi_p}{\omega^2 + \xi_p^2 + |\Delta|^2}, \quad F_{\omega}(p) = \frac{\Delta^*}{\omega^2 + \xi_p^2 + |\Delta|^2}, \quad \xi_p = \frac{p^2}{2m} - E_F \propto T_C \ll E_F$$

$$\Delta = V\pi T \sum_{\omega} \int d\vec{p} \frac{\Delta}{\omega^2 + \xi_p^2 + |\Delta|^2}, \quad \vec{p} \approx \vec{n}(p_F + \xi_p / v_F) \approx \vec{n}(p_F + i\sqrt{\omega^2 + |\Delta|^2} / v_F)$$

Так как в импульсе содержится и действительная, и мнимая части, аномальная функция Грина в одномерном координатном пространстве при заданном значении x' ведет себя как быстро осциллирующая функция с медленно (на масштабах длины когерентности) меняющейся огибающей. Особое значения для определения наблюдаемых величин (например, потенциала спаривания) имеет значение функции $F_{\omega}(\vec{r}, \vec{r}' = \vec{r})$.

Уравнения Горькова часто записывают в более симметричной форме в матричном *представлении Намбу*:

$$(i\omega\sigma_3 + (\hat{H}_e + B(r))\sigma_0 + \hat{\Delta})\hat{G}(r_1, r_2) = \delta(r_1 - r_2)$$

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G & F \\ F^* & -G \end{pmatrix}, \quad \hat{\Delta} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ -\Delta^* & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\sigma} - \text{матрицы Паули:}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Перейдя к этому представлению, мы не делали никаких серьезных предположений и упрощений, а, значит, решение системы оказывается не менее сложным. С другой стороны, решение квантово-механической задачи ведет к получению избыточной информации о быстрых фазовых осцилляциях функций Грина, так как измеряемые величины определяются их амплитудами. Таким образом, следующим шагом станет использование *квазиклассического приближения*. Введем вместо \vec{r}_1, \vec{r}_2 новые координаты $\vec{r} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$, $\vec{r}^- = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$. Период

осцилляций функций Грина $\lambda_F = \frac{\hbar v_F}{E_F}$ относительно разностной координаты r^- оказывается

намного меньше так называемой длины когерентности $\xi_0 = \frac{\hbar v_F}{\Delta}$. Таким образом, членами

высокого порядка малости по параметру $\frac{\lambda_F}{\xi_0}$ можно пренебречь, а гриновские функции

усреднить по быстрому относительному движению. Введем далее «функции Эйленбергера»:

$$f(\vec{r}, \vec{n}) = \frac{i}{\pi} \int F_p d\varepsilon, \quad g(\vec{r}, \vec{n}) = \frac{i}{\pi} \int G_p d\varepsilon, \quad \vec{r} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2,$$

$$F_p = \frac{1}{(2\pi)^3} \int F(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \exp\{i\vec{p}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\} d(\vec{r}_1 - \vec{r}_2),$$

$$G_p = \frac{1}{(2\pi)^3} \int G(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \exp\{i\vec{p}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\} d(\vec{r}_1 - \vec{r}_2),$$

$$g^2 + ff^+ = 1, \quad f^+(\vec{r}, \vec{n}) = f(\vec{r}, -\vec{n}).$$

Введенные таким образом функции $g(\vec{r}, \vec{n})$ и $f(\vec{r}, \vec{n})$ зависят только от координаты квазичастицы \vec{r} и от направления её движения \vec{n} . Результатом предложенных упрощений является *уравнение Эйленберга*:

$$\left[\omega\sigma_3 + \hat{\Delta}(r) - \frac{1}{\tau} \langle \hat{g} \rangle, \hat{g} \right] + \vec{v}_F \partial_r \hat{g} = 0,$$

$$\hat{g} = \begin{pmatrix} g & f \\ f^* & -g \end{pmatrix}, \quad \hat{\Delta} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ -\Delta^* & 0 \end{pmatrix},$$

где τ – характерное время между двумя рассеяниями квазичастицы на неоднородностях (время свободного пробега), $[f_1, f_2]$ – коммутатор, а $\langle \hat{g} \rangle$ – это изотропная часть, получающаяся после усреднения по направлениям импульса на поверхности Ферми. При этом учет примесей в виде потенциальных барьеров заменяется на учет концентрации центров рассеяния. Условие на самосоглашение потенциала спаривания тоже приводится к усредненным функциям:

$$\Delta \ln \frac{T}{T_c} - \pi T \sum_{\omega} \left(\frac{\Delta}{\omega} - \langle f \rangle \right) = 0.$$

Новой стороной оборачивается вопрос о постановке граничных условий. Применяемые раньше условия сшивки волновых функций оказываются некорректными после усреднения по разностной координате. Для решения этой проблемы нужно сопоставлять средние измеряемые величины. Так, граничные условия Зайцева требует равенства токов по разные стороны от границы.

Для описания «грязных» структур, в которых плотность примесей настолько велика, что длина свободного пробега l_e оказывается намного меньше длины когерентности ξ_0 , уравнение может быть упрощено еще сильнее. В этом случае в выражении $\omega\sigma_3 + \hat{\Delta}(r) - \frac{1}{\tau} \langle \hat{g} \rangle$ начинает доминировать диффузный член, что означает малость анизотропной части функций Грина по параметру $\frac{l_e}{\xi_0} \ll 1$. После проведения соответствующих преобразований получаем *уравнение Узаделя*:

$$i\hbar D \partial_r (\hat{G}(r) \partial_r \hat{G}(r)) = [\omega \sigma_3 + \hat{\Delta}(r), \hat{G}(r)], \quad \hat{G} = \begin{pmatrix} G & F \\ F^* & -G \end{pmatrix}, \quad \hat{\Delta} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ -\Delta^* & 0 \end{pmatrix},$$

где $D = \frac{v_F l_e}{3}$ – коэффициент диффузии, а G и F – усредненные по углам функции Грина.

Уравнение самосогласования в этом случае:

$$\Delta \ln \frac{T}{T_c} - \pi T \sum_{\omega} \left(\frac{\Delta}{\omega} - F_{\omega} \right) = 0.$$

Если раскрыть матричную форму представленных здесь уравнений Узаделя, то тогда одно из уравнений перейдет в условие нормировки:

$$\omega F_{\omega} + \frac{1}{2} D (F_{\omega} \nabla^2 G_{\omega} - G_{\omega} \nabla^2 F_{\omega}) = \Delta G_{\omega},$$

при этом считаем, что $G_{\omega}^2 + F_{\omega} F_{\omega}^* = const$ (константу можно положить равной единице).

Тогда физический смысл усредненной функции Грина можно пояснить следующим образом: аномальная функция описывает плотность электронов, объединенных в куперовские пары, а нормальная – плотность неспаренных электронов.

Часто удобно использовать запись уравнений Узаделя и самосогласования в «Ф-параметризации»:

$$G = \langle g \rangle = \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 + \Phi \Phi^*}}, \quad F = \langle f \rangle = \frac{1}{\omega} G \Phi,$$

$$\Phi = \frac{\pi T_c}{\omega G} (\xi^*)^2 \nabla (G^2 \nabla \Phi) + \Delta; \quad \Delta \ln \frac{T}{T_c} - 2\pi T \sum_{\omega} \frac{1}{\omega} (\Delta - \Phi G) = 0.$$

Отметим, что в пространственно-однородном сверхпроводнике для гриновских функций и плотности состояний квазичастиц верны следующие выражения:

$$G = \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}}, \quad F = \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}}, \quad N(\varepsilon) = \text{Re}(G(-i\varepsilon)) = N(0) \begin{cases} 0, & \varepsilon < \Delta \\ \varepsilon / \sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}, & \varepsilon > \Delta \end{cases}.$$

$$\Phi G = \Delta G + \frac{\pi T_c}{\omega} (\xi^*)^2 \nabla (G^2 \nabla \Phi),$$

$$\Delta \ln \frac{T}{T_c} - 2\pi T \sum_{\omega} \frac{1}{\omega} (\Delta - \Phi G) = 0,$$

$$\Delta \ln \frac{T}{T_c} - 2\pi T \sum_{\omega} \frac{1}{\omega} \left(\Delta - \Delta G - \frac{\pi T_c}{\omega} (\xi^*)^2 \nabla (G^2 \nabla \Phi) \right) = 0,$$

$$\Delta \ln \frac{T}{T_c} - 2\pi T \Delta \sum_{\omega} \frac{1-G}{\omega} + 2\pi T \sum_{\omega} \left(\frac{\pi T_c}{\omega} (\xi^*)^2 \nabla (G^2 \nabla \Phi) \right) = 0,$$

При $T \approx T_c$ $\Phi \approx \Delta$, $G \approx 1 - |\Delta|^2 / 2\omega^2$.

Наконец, для анализа поведения сверхпроводников при температурах, близких к критической, используют уравнения Гинзбурга-Ландау, выводящиеся из упоминавшегося в задаче 6.8 «феноменологического» функционала. Отталкиваясь от обсуждавшегося выше физического смысла потенциала спаривания, запишем их в виде:

$$\xi^2(T)\nabla^2\Delta + \Delta(1 - |\Delta|^2/\Delta_0^2) = 0,$$

$$j = j_0 \operatorname{Im}(\Delta^*\nabla\Delta); \quad j_0 = (\pi\Delta_0)/(4e\rho T_c\xi(T));$$

$$\xi(T) = \xi_2^* \left(\pi T_c / 2\sqrt{(T_c - T)} \right), \quad \Delta_0^2 = \frac{8\pi^2}{7\xi(3)} T_c (T_c - T).$$

Сравнение областей применимости упомянутых выше уравнений – цепочки уравнений Горькова, уравнения Эйленбергера, уравнения Узаделя, а также «феноменологического» уравнения Гинзбурга-Ландау, выводимого из теории фазовых переходов второго рода – представлено на рисунке ниже.

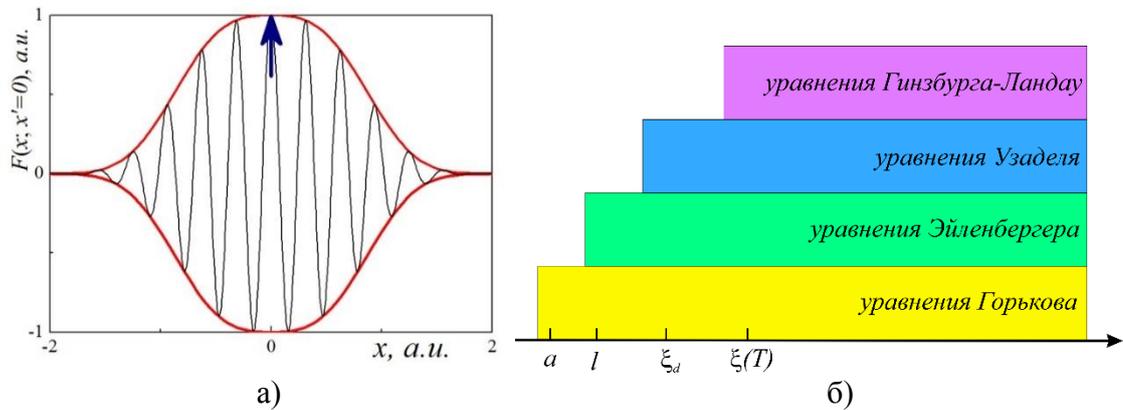


Рисунок 22 — (а) Аномальная функция Грина и «огibaющая» для однородного сверхпроводника для $x'=0$.

(б) Схематические изображения областей применимости уравнений. На оси абсцисс последовательно (слева направо) указаны постоянная решетки, длина свободного пробега электрона, характерный размер куперовской пары без учета температурных эффектов и при конечной температуре T .

Подробно проблемы этой главы разобраны в работах: *Ван Дузер, Зайцев (1965 и 2004), Горелкин, Кулик, Куприянов, Лихарев, Мельников, Минеев, Свидзинский, Тинкхам, Фадеев, Корпін.*

Глава 7. Электрический ток, проводники и изоляторы. Простейшие гетероструктуры

Начнем раздел с констатации: плотность потока вероятности в квантовой механике для частицы с массой m есть:

$$j = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

В частности, для состояния, являющегося суперпозицией двух плоских волн вида $\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$ плотность потока вероятности пропорциональна $|A|^2 - |B|^2$, возможные результаты измерения импульса есть $\pm \hbar k$, причем при выполнении условия нормировки $|A|^2 + |B|^2 = 1$ вероятность получить определенное значение есть $|A|^2$ и $|B|^2$ соответственно. Умножая вектор плотности вероятности на величину электрического заряда микрочастицы, получим переносимый электрический ток.

В системе большого числа классических частиц электрический ток представляют часто через произведение их зарядов на концентрацию и характерную скорость: $\vec{j} = en\vec{v}$. Для микрочастиц в представлении вторичного квантования это можно записать как:

$$\vec{j} = \frac{e}{m} \sum_{p, \text{спин}} \vec{p} \hat{a}_{p, \text{спин}}^+ \hat{a}_{p, \text{спин}}$$

Решения описанного в предыдущей главе уравнения Боголюбова – де Жена позволяют представить плотность тока в следующем виде:

$$j(r) = \frac{2e}{m} \text{Im} \left[\sum_k u_k(r) \nabla u_k^*(r) f\left(\frac{\epsilon_k}{k_B T}\right) + v_k^*(r) \nabla v_k(r) \left[1 - f\left(\frac{\epsilon_k}{k_B T}\right)\right] \right]$$

Задача 7.1 Определить проводимость металла σ в рамках модели электронного газа с рассеянием.

Пусть к идеальному газу электронов приложено постоянное электрическое поле напряженностью E (для простоты будем рассматривать одномерный случай). Тогда на отдельный носитель заряда действует сила $-eE$. Полагаем, что взаимодействие с другими электронами и ионами металла можно учесть, как череду неупругих столкновений, среднее время между которыми равно τ , называемое временем свободного пробега (это фундаментальная характеристика рассматриваемого вещества). Тогда характерная скорость электрона (скорость, которую он успевает набрать в электрическом поле между

столкновениями) есть $\bar{v} = \frac{e}{m} E\tau$. Как следствие, величину электрического тока в металле

можно оценить следующим образом: $j = en\bar{v} = n \frac{e^2}{m} E\tau$. По определению, следующему из

дифференциальной формы закона Ома $j = \sigma E$, проводимость σ есть:

$$\sigma = \frac{e^2}{m} n\tau. \quad (213)$$

Интересно отметить, что характерная длина свободного пробега $l = \bar{v}\tau$, легко выражаемая через такие характеристики металла, как концентрация носителей заряда и проводимость, оказывается на много порядков больше, чем характерное расстояние между атомами. Этот результат отлично соотносится с результатом **задачи 1.1 (теорема Блоха)**, согласно которому волновая функция электрона в металле есть волновая функция свободной частицы с модулированной амплитудой. То есть в соответствии с теоремой Блоха в идеально периодической структуре электрон должен распространяться свободно, без рассеяний. Все рассеяния, определяющие конечную величину удельной проводимости металла, происходят на дефектах, нарушающих структуру кристаллической решетки, а также на фононах.

Также обратим внимание на тот факт, что основным состоянием идеального электронного газа в электрическом поле с учетом рассеяний на неоднородностях решетки (при нулевой температуре) является в k -пространстве полностью заполненная сфера Ферми, сдвинутая относительно нуля на величину $eE\tau$.

Задача 7.2 Объяснить существование проводников и изоляторов с точки зрения зонной теории.

Обратимся к наиболее простому варианту зонной теории, возникшему при рассмотрении задачи о разрешенных значениях энергии для электрона в одномерной кристаллической решетке с периодом a в приближении «сильной связи» (**задача 1.4**). Пусть для металлов энергия Ферми приходится на разрешенную энергетическую зону. И тогда, учитывая принцип Паули, возможность возникновения упорядоченного движения электронов (протекания электрического тока) под действием электрического поля можно продемонстрировать всего одним рисунком:

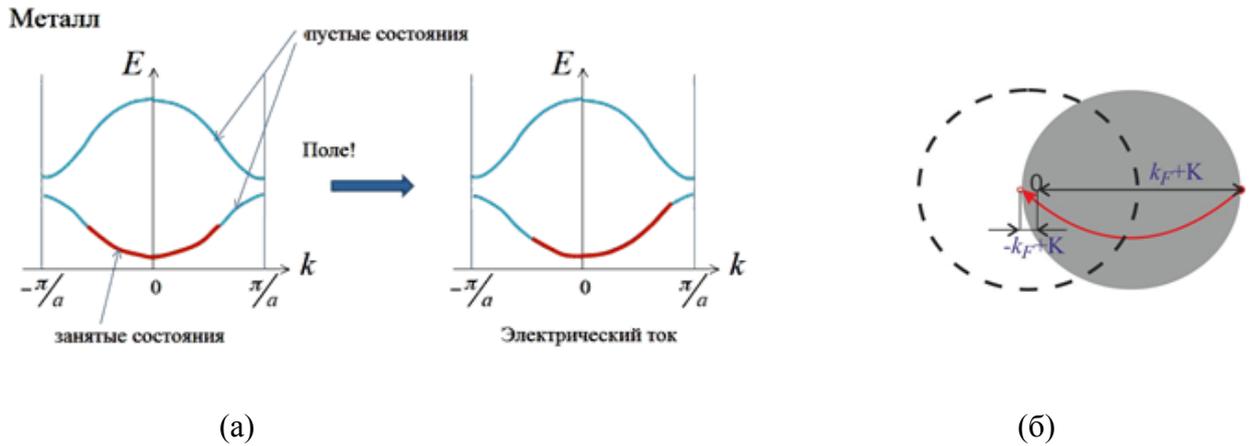


Рисунок 23 — К обсуждению способности некоторых материалов проводить электрический ток (**задача 7.2**) и возникновению незатухающего тока в сверхпроводниках (**задача 7.3**).

Нужно всего лишь вспомнить важный вывод **задачи 7.1**: основным состоянием идеального электронного газа в электрическом поле с учетом рассеяний (при нулевой температуре) является в k -пространстве полностью заполненная сфера Ферми, сдвинутая относительно нуля на величину eEt .

Далее остается предположить, что к изоляторам относятся вещества, у которых заполнена *вся* разрешенная зона, что запрещает протекание через них электрического тока в малых полях и при малых температурах.

Задача 7.3 Показать, что для коллектива электронов с притяжением в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера возможно существование незатухающего тока (сверхтока) благодаря существованию щели в спектре возбуждений такой системы. Оценить максимальную величину этого бездиссипативного тока.

Пусть к такому коллективу электронов с притяжением на малое время приложили электрическое поле напряженностью E (снова для простоты будем рассматривать одномерный случай). Тогда, как было показано в **задаче 7.1**, основным состоянием системы в k -пространстве станет полностью заполненная сфера Ферми, сдвинутая относительно нуля на величину eEt . После выключения электрического поля окажется, что неупругие столкновения с дефектами будут уменьшать кинетическую энергию такого «сдвинутого» состояния. Если не учитывать потенциальную энергию притяжения между парами электронов за счет электрон-фононного взаимодействия, то окажется, что за характерное время свободного пробега τ основным состоянием в k -пространстве снова окажется полностью заполненная сфера Ферми (так можно описать затухание тока в нормальном металле). Однако, в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера, упомянутые неупругие взаимодействия должны разрушать взаимодействующие пары электронов, создавая вместо каждой разрушенной пары по два квазичастичных возбуждения с энергией не меньше Δ .

И для малых смещений сферы Ферми относительно нуля – то есть для малых токов – существование незатухающего тока будет энергетически выгодно, если «проигрыш по кинетической энергии» для двух электронов при распаде куперовской пары будет меньше «выигрыша по потенциальной энергии» из-за рождения двух боголюбовских квазичастиц. Очень грубо необходимое для существования такого сверхтока энергетическое условие можно записать для смещенной на K в k -пространстве сферы Ферми (с учетом, естественно, принципа Паули для электронов, как показано на рисунке):

$$\frac{(p_F + \hbar K)^2}{2m} - \frac{(-p_F + \hbar K)^2}{2m} \leq 2\Delta. \quad (214)$$

Воспользуемся формулой для разности квадратов в левой части (214) и получим:

$$\hbar^2 k_F K / m \leq \Delta. \quad (215)$$

Можно ввести понятие критического импульса движущегося электрона, начиная с которого условие (215) не выполняется, и рассеяние на дефектах и фононах с потерей энергии начинает уменьшать энергию системы:

$$p_C \equiv \hbar K_C = m\Delta / \hbar k_F. \quad (216)$$

Следовательно, максимальная величина бездиссипативного тока:

$$j_C \equiv en_e v_c = en_e \Delta / \hbar k_F. \quad (217)$$

Перейдем к рассмотрению тока в простейших *гетероструктурах*, состоящих из различных по своей природе материалов. Здесь всегда следует помнить, что любая граница раздела в гетероструктурах может приводить к отражению электронов. В частности, вид плотности вероятности обнаружить электрон в окрестности некоторой точки одномерного пространства при падении на простейшую границу раздела двух сред (представляемую в виде полубесконечной потенциальной ступеньки известной высоты U) представлен на рисунке. Вероятность прохождения электрона через такую границу T (вероятность отражения от нее) есть отношение потока вероятности прошедшего (отраженного) к потоку вероятности падающему.

Если теперь «ограничить» ступеньку справа (в некоторой точке с безразмерной координатой $x=b$), то тогда прошедший поток не будет равен нулю, даже если энергия падающей частицы E меньше U (хотя с классической точкой зрения в этом случае вся подбарьерная область будет запрещенной). С практической точки зрения это означает, что электроны способны туннелировать через разрывы в проводнике, заполненные изолятором. Разберем простейшие примеры гетероструктур, эксплуатирующих такое явление *туннелирования*.

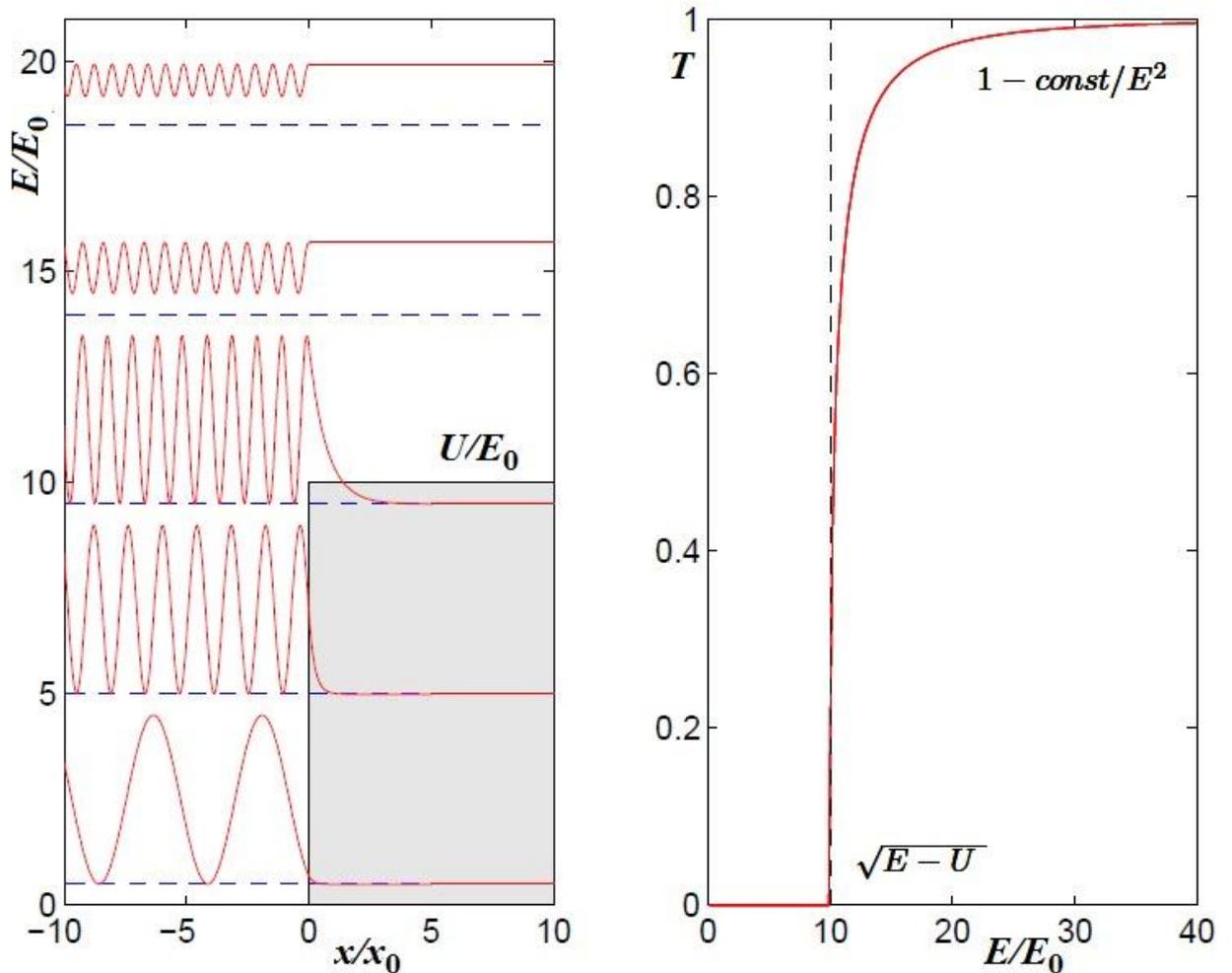


Рисунок 24 — Плотность вероятности обнаружить частицу, падающую на барьер, для разных значений энергии E (слева) и вероятность прохождения через барьер (справа). См: *Аладышкин*.

Задача 7.4 Найти вид вольт-амперной характеристики $I(V)$ для гетероструктуры металл-изолятор-нормальный металл (NIN).

Величину тока через туннельный барьер (туннельного тока) определяет в общем случае произведение вероятностей найти при определённой энергии E заряженное частице-подобное фермиевское возбуждение в электроде-источнике (пусть это будет, для определенности, левый электрод), и «вакантное место» для такого возбуждения в электроде-стоке. В общем случае выражение для тока через гетероструктуру определяется балансом между потоком части слева направо и справа налево:

$$I = I_{1 \rightarrow 2} - I_{2 \rightarrow 1} = \frac{2\pi}{\hbar} \int |T|^2 N_1(E) N_2(E + eV) (f_1(E) - f_2(E + eV)) dE. \quad (218)$$

Здесь величина $|T|^2$ определяет вероятность туннелирования электрона через потенциальный барьер, описывающий использованный изолятор, в одночастичном приближении; $f_{1,2}$ — функция, задающая вероятность обнаружить электрон на некотором уровне

(в частности, для случая фермиевского распределения $f_{1,2}(E) = 1/(1 + e^{\beta E})$, где β – обратная температура), которая для разобранного выше идеального электронного газа превращается при нулевой температуре в известную функцию Хевисайда Θ . $N_{1,2}(E)$ – плотности состояний в электродах. Т.е. можно сказать, что, например, величина $N_1(E)f_1(E)$ есть в нашем рассмотрении число электронов с энергией в « dE -окрестности» величины E в левом металле.

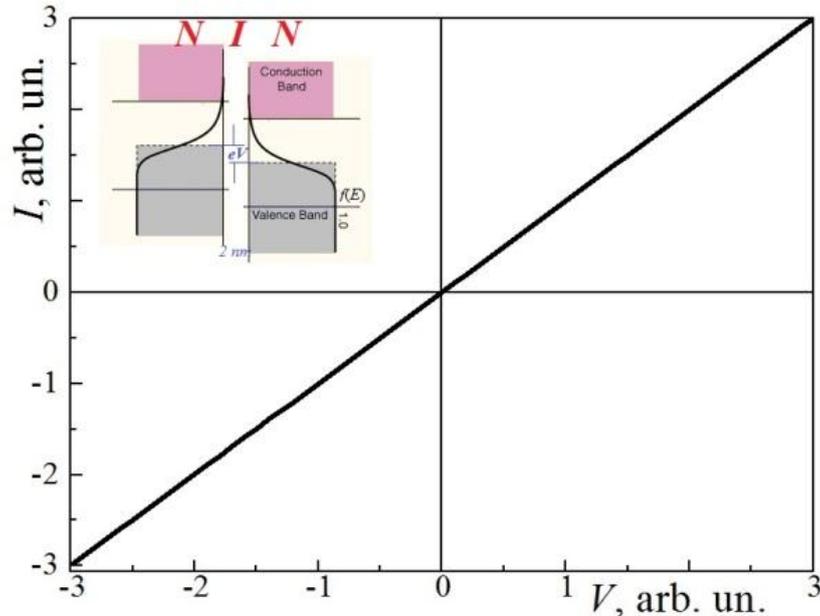


Рисунок 25 — Схематическое изображение NIN структуры и типичный вид вольт-амперной характеристики.

Обратите внимание на очевидный факт, для дополнительной наглядности проиллюстрированный на рисунке к данной задаче: если не приложено к гетероструктуре напряжение V , смещающее уровни Ферми в металлах относительно друг друга, электронный транспорт слева направо полностью компенсирует аналогичный транспорт справа налево даже и в присутствии возбуждений в системе. Если же мы нарушим за счет приложенного напряжения симметрию между электродами NIN контакта площадью A , то возникший электрический ток (пренебрегаем возмущениями!) равен:

$$I_{NIN}(T = 0) = \frac{2\pi eA}{\hbar} \int_0^{eV} dE |T|^2 N(E - eV)N(E) \approx \frac{2\pi eA}{\hbar} |T|^2 N^2(E_F) eV = \frac{V}{R_T}. \quad (219)$$

Как видим, для рассматриваемого NIN контакта характерна омическая вольт-амперная характеристика.

Задача 7.5 Найти вид вольт-амперной характеристики $I(V)$ (для квази-частичного тока) для гетероструктуры сверхпроводник-изолятор-нормальный металл (SIN) при нулевой

температуре. Под сверхпроводником понимать коллектив электронов с притяжением, описанный в рамках теории Бардина-Купера-Шриффера.

Очевидно, что и в этом случае ток через гетероструктуру определяется выражением (218) из предыдущей задачи. Однако, необходимо учесть, что для сверхпроводника (пусть это будет, для определенности, первый электрод) свой вид имеет и функция распределения электронов по энергиям, и плотность состояний.

Энергия одноэлектронного возбуждения в коллективе электронов с электрон-фононным притяжением $E_k = \varepsilon_k \equiv \sqrt{\Delta^2 + \xi_k^2}$ (закон дисперсии) уже была нами найдена при решении задачи 4.8. Тогда плотность числа состояний есть:

$$N_s(E) \equiv \frac{dv}{dE} = \frac{dv}{d\xi} \frac{d\xi}{dE} = \frac{dv}{d\xi} \frac{d(\sqrt{E^2 - \Delta^2})}{dE} = N(0) \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}}. \quad (220)$$

Здесь мы учли, что $\xi_k = \hbar^2 k^2 / 2m - E_F$ есть закон дисперсии для частиц в идеальном электронном газе, и плотность состояний для этой системы на уровне Ферми $\frac{dv}{d\xi} = N(0)$ известна.

В данной задаче мы рассматриваем только туннелирование из/в сверхпроводник электроноподобных возбуждений и тогда при заданном напряжении V на SIN-контакте выражение для тока принимает вид:

$$I_{SIN} = Const N_1(0) N_2(0) \int_{-\Delta}^{eV} \frac{|E + eV|}{\sqrt{(E + eV)^2 - \Delta^2}} dE \approx \frac{2\pi e^2 A N^2(0) |T|^2}{\hbar} \sqrt{(eV)^2 - \Delta^2}. \quad (221)$$

Из (i) закона сохранения энергии, проиллюстрированного на рисунке к данной задаче, и (ii) перехода ВАХ в типичную омическую прямую при больших напряжениях ($eV \gg \Delta$) следует, что:

$$I_{SIN} = \begin{cases} \pm \frac{\sqrt{(eV)^2 - \Delta^2}}{eR_T} & \text{при } eV \geq \Delta \text{ и } eV \leq -\Delta \\ 0 & \text{при } |eV| < \Delta \end{cases}. \quad (222)$$

Отметим, что конечная температура размывает разрывы на вольт-амперной характеристике. Можно сказать, что в этом случае в «сверхпроводнике» присутствуют над энергетической щелью электроноподобные возбуждения, а в нормальном металле такие возбуждения существуют над уровнем Ферми (равно как и дырочноподобные – под уровнем Ферми), а значит, электрический ток возникает при любой конечной разности потенциалов.

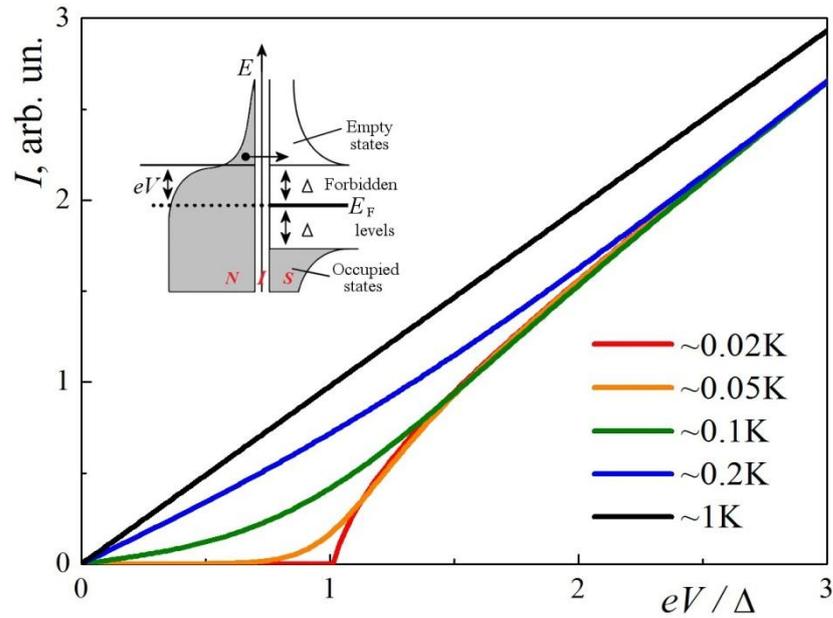


Рисунок 26 — Типичные вольт-амперные характеристики для SIN структуры при различных температурах.

Аналогичным образом можно рассмотреть туннелирование отдельных электроноподобных возбуждений через прослойку изолятора в контакте сверхпроводник-изолятор-сверхпроводник (SIS). Опять из закона сохранения энергии можно качественно понять рассчитанный численно вид модельной ВАХ с резким ростом тока при $|eV| > 2\Delta$: при выполнении такого условия становится выгодным превращение куперовский пар в квазичастицы с последующим туннелированием (CP→QP участок кривой на рисунке). Опять в пределе больших напряжений вольт-амперная характеристика имеет омический вид ($e-e$ область). Спецификой системы является так называемая бездиссипативная ветвь на ВАХ (CP→CP участок на кривой). Далее мы увидим, что туннелирование пар, т.е. одновременное прохождение электрона и дырки через I-слой, имеет второй порядок малости по прозрачности. Сверхток обусловлен андреевским отражением единичного туннелирующего электрона (дырки) через прослойку изолятора и имеет первый порядок по прозрачности (*эффект Джозефсона*). Кроме того, стоит отметить, что плотность состояний электроноподобных возбуждений в сверхпроводнике имеет особенность при $E=\Delta$. Вследствие этого для случая различных сверхпроводящих электродов при $V=(\Delta_1-\Delta_2)/e$ друг против друга окажутся области с бесконечной плотностью состояний и в S_1, S_2 , что приведет к возникновению соответствующей особенности на ВАХ (QP→QP участок на кривой). Более подробно бездиссипативный токовый транспорт мы рассмотрим ниже.

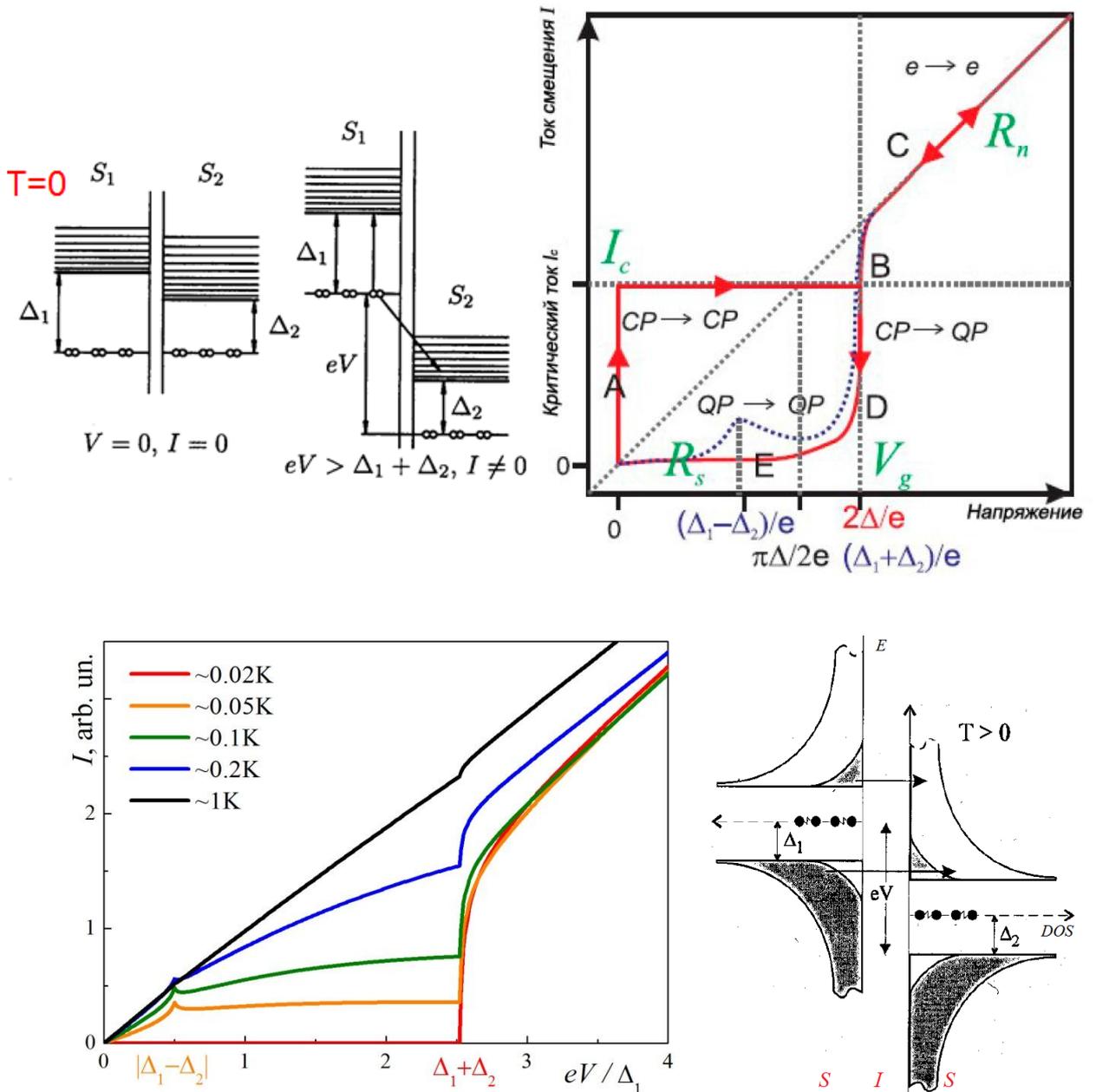


Рисунок 27 — Типичные спектры SIS структуры при нулевой температуре и вид вольт-амперной характеристики (справа). См.: *Столяров В.С.* Исследование сверхпроводящих джозефсоновских контактов с туннельным и ферромагнитным слоями (Диссертация на соискание ученой степени кандидата наук).

Упражнение 7.1 Рассмотреть процесс переноса заряда через границу нормального металла (N) и сверхпроводника (S).

Пусть электрон с энергией E из нормального металла налетает на границу со сверхпроводником, двигаясь вдоль оси Ox . В рамках системы уравнений Боголюбова – Де Жена, когда оператор Гамильтона не является диагональной матрицей в «электрон-дырочном» базисе, состояние произвольного возбуждения описывается через спинор вида

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{Bmatrix} u_k \\ v_k \end{Bmatrix} \exp\{i\vec{k}\vec{r}\}, \quad \hbar^2 k^2 = 2mE_F \pm \sqrt{\varepsilon_k^2 - |\Delta|^2}.$$

Тогда электрон в нормальном металле можно описать через спинор $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp(ik_F x)$. Для того, чтобы попасть в сверхпроводник, то есть перейти в состояние, задаваемое спинором вида $b \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \exp(ik_F x)$, частице нужно преодолеть потенциальный барьер, образованный потенциалом спаривания. Причем если её энергия меньше величины энергетической щели, то она должна отразиться в металл. Но из-за специфической структуры состояний сверхпроводника возможен и третий вариант – электрон может «выбрать» из электронного коллектива «напарника», образовав с ним куперовскую пару. Если же следить только за возбуждениями, заряд которых, как мы помним, существенно зависит от их эффективного квазиимпульса, определяемого разностью между кинетической энергией и величиной Δ , то мы увидим следующую картину: электрон достигает барьера, переходит в основное состояние сверхпроводника, а обратно летит только что образовавшаяся дырка, состояние которой описывается спинором $a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \exp(ik_F x)$.

Такой процесс носит название *андреевского отражения*.

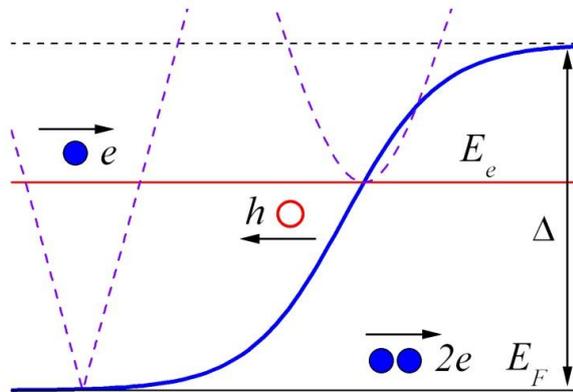


Рисунок 28 — Схематическая иллюстрация к явлению андреевского отражения на NS-границе.

Синяя линия демонстрирует рост энергетической щели в приграничной области, красная - энергию возбуждения, штриховые линии показывают примерный вид дисперсионного соотношения $k(E)$ при разных амплитудах щели.

Отметим, что в силу условия нормировки $|a|^2 + |b|^2 = 1$, а в силу условия непрерывности для «электронной» и «дырочной» части спиноров $1 = 0 + b^2 u^2$; $0 = a^2 + b^2 v^2$ (для краткости

индексы опущены), что дает, например, для «вероятности андреевского отражения» величину

$$|a|^2 \approx \left| \frac{v}{u} \right|^2 = \begin{cases} 0, & E \geq \Delta \\ 1, & E < \Delta \end{cases}.$$

Уравнения Боголюбова – Де Жена в нашем случае можно записать в следующем компактном виде (см. обсуждение в работе *Janson et al.*):

$$i \left(\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \Gamma \Theta(x) \right) \sigma_z \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \mu(x) + V(x) \right) \sigma_z \psi + \Delta(x) \sigma_x \psi. \quad (223)$$

Здесь опять $\vec{\sigma}$ – матрицы Паули, Θ – функция Хевисайда, μ – химический потенциал. Параметр Γ здесь определяет скорость, с которой квазичастицы в сверхпроводнике «релаксируют» в основное состояние, определяемое из теории Бардина-Купера-Шриффера.

Рассмотрим простейший случай, когда материалы и слева, и справа от границы однородны, $V(x) = h\delta(x)$, h – безразмерный параметр, определяющий высоту тонкого барьера, сопоставленного границе между S - и N -областями. Тогда решения для такого «модифицированного уравнения Шредингера» разумно искать в виде падающей (*initial*), отраженной (*reflected*) и прошедшей (*transmitted*) волн с введением различных волновых чисел k^\pm, q^\pm в S - и N -слоях:

$$\psi_i = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{iq^+x} e^{-iEt/\hbar} \quad (224)$$

$$\psi_r = \left[a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{iq^-x} + b \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-iq^+x} \right] e^{-iEt/\hbar} \quad (225)$$

$$\psi_t = \left[c \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} e^{ik^+x} + d \begin{pmatrix} v_0 \\ u_0 \end{pmatrix} e^{-ik^-x} \right] e^{-i(E+i\Gamma)t/\hbar} \quad (226)$$

На NS-границе мы полагаем, что

$$\psi_N(0) = \psi_S(0), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\psi_S(0)}{dx} - \frac{d\psi_N(0)}{dx} \right) + h\psi_S(0) = 0.$$

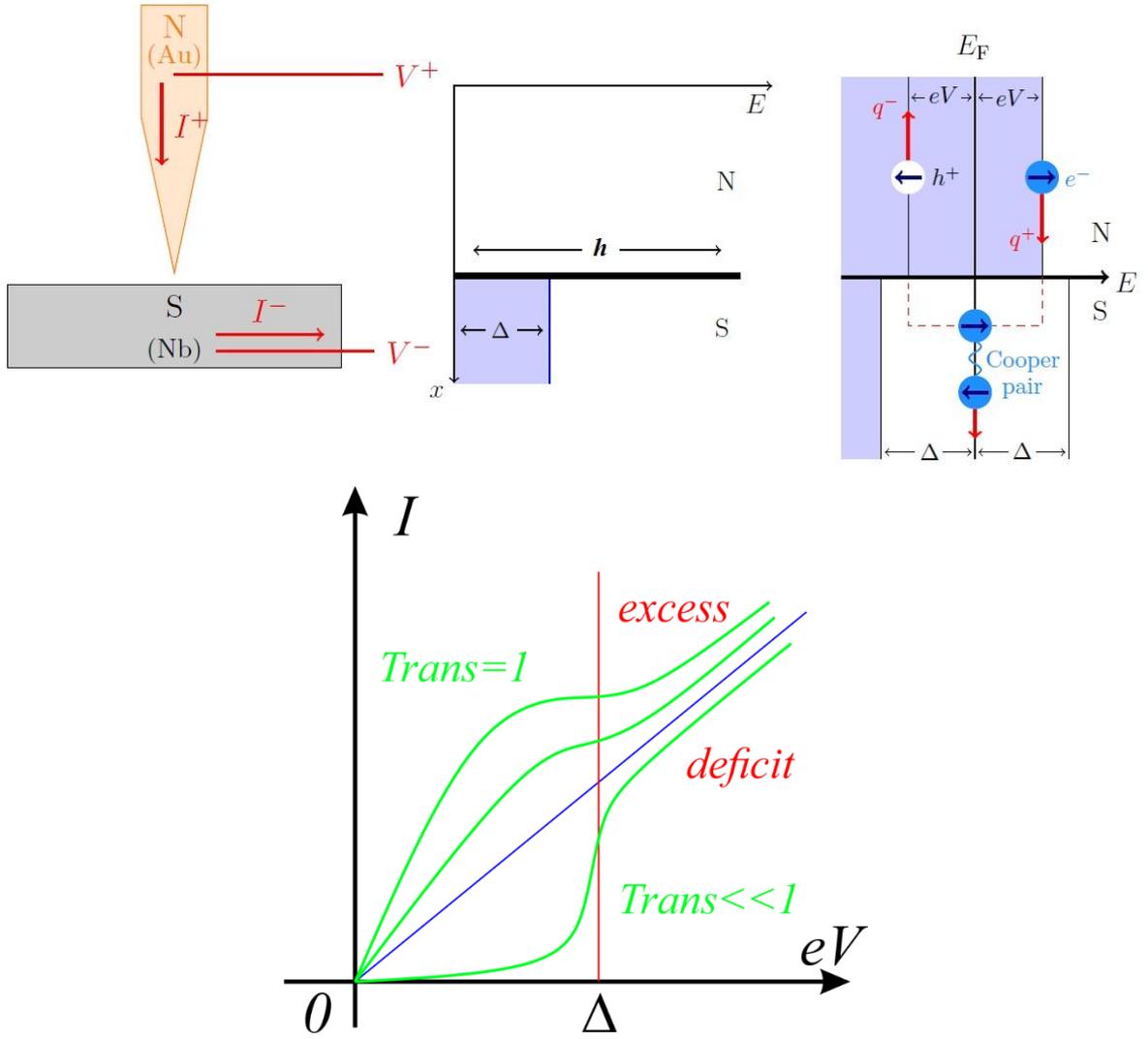


Рисунок 29 — Иллюстрации к рассмотрению переноса заряда через NS-границу, включая и вид вольт-амперной характеристики, полученной с учетом как обычных, так и андреевских отражений от области раздела.

Это предположение дает следующие «законы дисперсии» и выражения для элементов спинов:

$$\hbar q^{\pm} = \sqrt{2m(\mu \pm E)}, \quad (227)$$

$$\hbar k^{\pm} = \sqrt{2m\left(\mu \pm \sqrt{(E + i\Gamma)^2 - \Delta^2}\right)}, \quad (228)$$

$$1 - v_0^2 = u_0^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{\frac{(E + i\Gamma)^2 - \Delta^2}{(E + i\Gamma)^2}} \right). \quad (229)$$

Будем считать, что $q^+ = q^- = k^+ = k^- = k_F$ (что эквивалентно заведомо выполняемому в нашем случае условию $\mu \gg E, \Delta, \Gamma$):

$$a = \frac{u_0 v_0}{\gamma}, \quad b = -\frac{(u_0^2 - v_0^2)(Z^2 + iZ)}{\gamma},$$

$$\gamma = u_0^2 + (u_0^2 - v_0^2)Z^2 \left(Z \equiv \frac{\hbar}{\hbar v_{F_S}} \right).$$

Рассчитанные на основе такого подхода вольт-амперные характеристики NS-границы (концепция их исследования в эксперименте представлена на рисунке 29) демонстрируют наличие избытка/недостатка квазичастичного тока в зависимости от параметра прозрачности границы, $Trans$, изменяющегося от 1 до 0. Величина такого избыточного/недостающего тока при относительно больших значениях напряжения дает информацию о величине щели в спектре возбуждения используемого сверхпроводящего материала.

Андреевская модель слабой сверхпроводимости прекрасно описывается с помощью уравнений Боголюбова – де Жена. Такой метод отлично подходит для описания чистых структур, размер которых гораздо меньше длины свободного пробега $l_e \gg L$. В грязном случае ($l_e \ll L$) для корректного описания необходимо вставить в потенциал большое количество барьеров, моделирующих центры рассеяния, что делает точное решение почти невозможным.

Перенос заряда через структуры в грязном пределе гораздо проще описывается при помощи уравнением Узаделя. Так как в рамках этого представления мы перешли от расчета траекторий квазичастиц к полевым уравнениям, теория андреевских отражений перерастает в так называемый *эффект близости*: сверхпроводящий конденсат может проникать вглубь нормального металла. Размеры области пространства, где проявляется такой эффект, разумно характеризовать *эффективной длиной когерентности* (длиной на которой модуль «наведенного» параметра порядка электронов в сверхпроводящем состоянии уменьшается в нормальном металле в e раз) равной $\xi_{NC}^* = \frac{\hbar v_F}{2\pi k_B T_C}$, если в N -металле выполнены условия

«чистого» предела (длина свободного пробега электронов существенно больше других характерных размеров в задаче). Длину когерентности полагают равной $\xi_{ND}^* = \sqrt{\frac{\hbar D}{2\pi k_B T_C}}$ в противоположном («грязном») пределе. Здесь, как обычно, v_F и $D = v_F \ell / 3$ – ферми-скорость и коэффициент диффузии для нормального металла. Нетрудно увидеть, что длина когерентности тем больше, чем больше скорость электронов на поверхности Ферми, т.е. чем выше проводимость этого материала.

Важно подчеркнуть, что решение микроскопических уравнений сверхпроводимости позволяет оценить не только критические токи и вольт-амперные характеристики, но и другие экспериментально измеримые характеристики электронной системы гибридных структур. Так с

помощью туннельного микроскопа возможно экспериментальное измерение плотности состояний в зависимости от энергии электронов на поверхности структуры (см. рисунок 29). Эту же зависимость можно получить и теоретически.

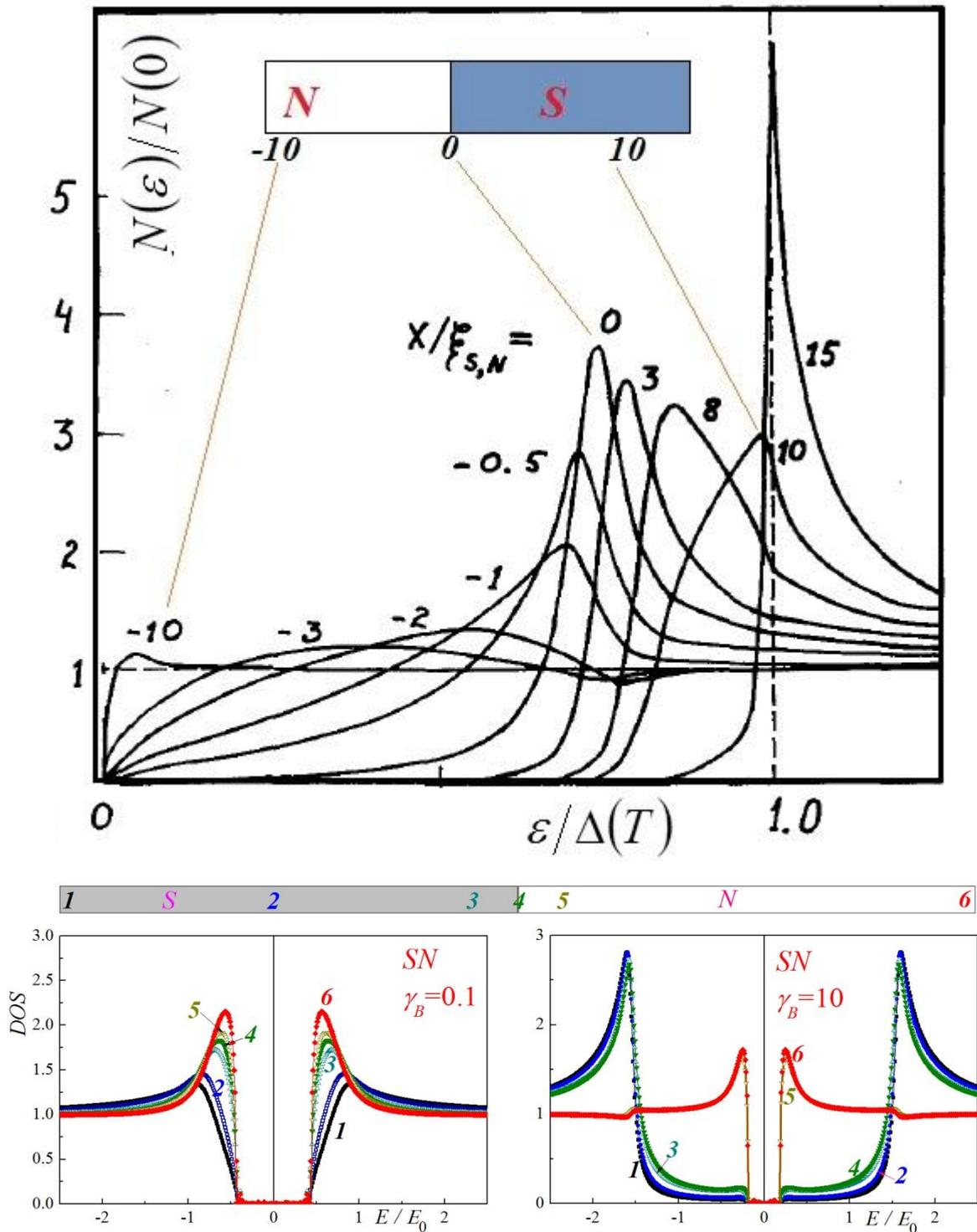


Рисунок 30 — Рассчитанные из уравнений Узалея нормированные плотности состояний (DOS) для квазичастиц в сверхпроводнике и нормальном металле в окрестности NS -границы как для случая «полубесконечных» слоев нормального металла и сверхпроводника (вверху, см. *Golubov A., Kupriyanov M. 1989*), так и для случая, когда эти слои сравнимы с эффективной длиной когерентности в используемых материалах, $\xi_{S,N}$.

Для этого необходимо сначала решить систему уравнений Узаделя, дополненных уравнением самосогласования, для поиска сверхпроводящего потенциала спаривания Δ (обычно это делается в представлении мацубаровских частот). После этого нужно перейти в представление действительных энергий с помощью замены $\omega = -i E$, и, снова решив уравнение Узаделя, найти для каждой энергии значение гриновских функций. При этом действительная компонента нормальной функции Грина $\text{Re}(G)$ будет отвечать плотности состояний (DOS).

В объемном однородном сверхпроводнике такая зависимость характеризуется провалом плотности состояний в окрестности нулевой энергии (иными словами энергии Ферми). Данная область отсутствия нормальных состояний называется энергетической щелью и ограничена по энергии значением потенциала спаривания.

В структурах типа SN плотность состояний имеет более сложную зависимость. Проникновение куперовских пар в область нормального металла за счет эффекта близости приводит к формированию там так называемой мини-щели: более узкой области с нулевой плотностью состояний. При этом размер мини-щели определяется толщинами S и N слоев структуры, а также параметрами границы, и постоянен во всем N-слое, не завися от координаты x . Стоит отметить, что в случае бесконечно широкого N-слоя, мини-щель полностью вырождается, достигая нулевого значения. При этом плотность состояний в области проводимости значительно зависит от координаты, имея щелеподобный профиль около границы и выходя на постоянную величину на большом удалении от нее.

Для оценок применимости приближений «чистого» и «грязного» случаев можно указать, что длина свободного пробега в меди составляет порядка 15 нм, а для железа этот параметр оказывается существенно меньше 1 нм. При этом даже в рекордных экспериментах характерные размеры изготавливаемых структур достигают порядка 10 нм. В массовых технологиях с высокой повторяемостью размер оказывается не меньше 100 нм, так что там заведомо выполняются условия грязного предела.

Вопрос о построении при произвольных температурах теоретико-полевого описания (в частности – на основе уравнения Узаделя) эффекта близости в рассматриваемой системе долгое время был затруднен отсутствием необходимых граничных условий к квазиклассическим уравнениям сверхпроводимости. Для нахождения искомых граничных условий необходимо в непосредственной близости от границы, т.е. на расстояниях порядка *длины свободного пробега электронов в рассматриваемых материалах*, решить систему уравнений Эйленберга, пренебрегая слагаемыми, пропорциональными ω и $\Delta_{1,2}$. Вдали от границы решения системы должны выходить на изотропные функции Узаделя.

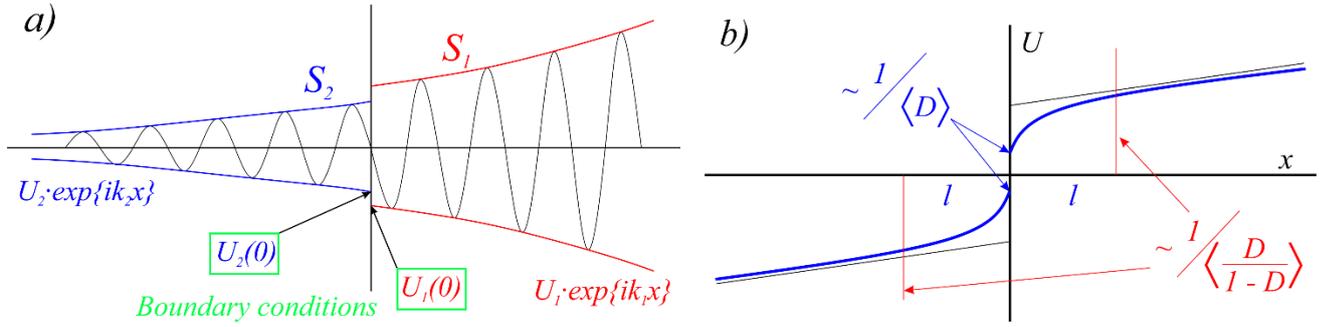


Рисунок 31 — Иллюстрация к описанию поведения «волновой функции для сверхпроводящих электронов» в рамках микроскопического (*a*, черные «осциллирующие» кривые) и квазиклассического (синие/красные огибающие, часть *b*) описания на границе между двумя сверхпроводниками.

Поведение системы в приграничном слое в предположении об изотропности свойств всех материалов (проиллюстрированное на рисунке 31), описывается условиями Куприянова-Лукичева, физический смысл которых заключается в сравнении величины тока по разные стороны от границы:

$$p_{F1}^2 l_{e1} \hat{G}_1 \frac{d}{dx}(\hat{G}_1) = p_{F2}^2 l_{e2} \hat{G}_2 \frac{d}{dx}(\hat{G}_2), \quad 2\gamma_{B1} \xi_1 \hat{G}_1 \frac{d}{dx}(\hat{G}_1) = [\hat{G}_1; \hat{G}_2],$$

$$p_{F1}^2 l_{e1} \hat{G}_1 \frac{d}{dx}(\hat{G}_1) = p_{F2}^2 l_{e2} \hat{G}_2 \frac{d}{dx}(\hat{G}_2)$$

где $\gamma_{Bi} = \frac{RA}{\rho_i \xi_i}$ – безразмерный параметр, характеризующий прозрачность границы, R – сопротивление контакта, A – его площадь. Качественное описание поведения огибающих $U(x)$ для гриновских функций также изображено на иллюстрации в окрестности планарной границы: как видим, можно выделить область, определяемую длиной свободного пробега электронов, на которой происходит резкое изменение этой функции. Строго говоря эти условия справедливы для границ с малой прозрачностью и полностью прозрачных границ (см., например, Amundsen M. and Linder J. The quasiclassical theory for interfaces with spin-orbit coupling, arXiv.1904.11986v 26 April 2019). Однако на практике они наиболее часто используются для описания переноса заряда в многослойных структурах, содержащих большое количество границ.

Соседство нормального металла с высокой удельной проводимостью (Au, Cu, Al) со сверхпроводником, который обычно в нормальном состоянии обладает высоким удельным сопротивлением (примером тому «высокоомный» ниобий Nb), должна приводить к большим значениям параметра подавления $\gamma \geq 1$, $\gamma = \frac{\rho_S \xi_{SD}^*}{\rho_N \xi_{ND}^*}$, где $\rho_{S,N}$ и $\xi_{SD,ND}^*$ – нормальные удельные сопротивления и длины когерентности находящихся в контакте сверхпроводящего и нормального материалов. Этот параметр пропорционален отношению числа нормальных электронов, способных за единицу времени диффундировать из N в S материал, к количеству

коррелированных электронов, способных за то же время продиффундировать в обратном направлении. Можно сказать, что SN -граница характеризуется двумя константами подавления: γ_B для прямого эффекта близости в нормальном металле и γ для обратного эффекта близости в сверхпроводнике.

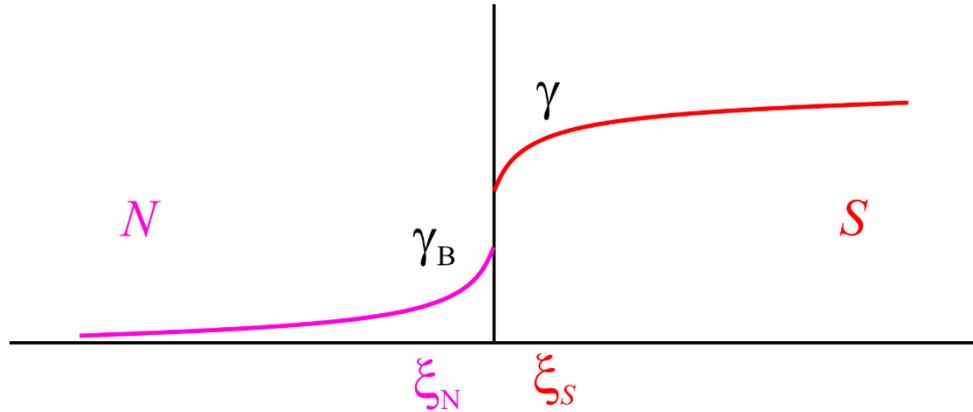


Рисунок 32 — Иллюстрация к определению длин когерентности и параметров подавления на SN – границе.

Качественно ясно, что в случае больших значений γ в сверхпроводящей части SN -интерфейса окажется избыток нормальных электронов, что приведет к существенному подавлению сверхпроводимости вблизи SN границы (см. Рисунок 32) и деградации параметров SNS перехода. В пределе малых γ реализуются так называемые «жесткие граничные условия»: подавление сверхпроводимости в S электроде практически отсутствует.

Задача 7.7 Оценить энергию джозефсоновского сверхтока для симметричной туннельной структуры сверхпроводник-изолятор-сверхпроводник, связанного с коррелированным туннелированием электронов куперовской пары.

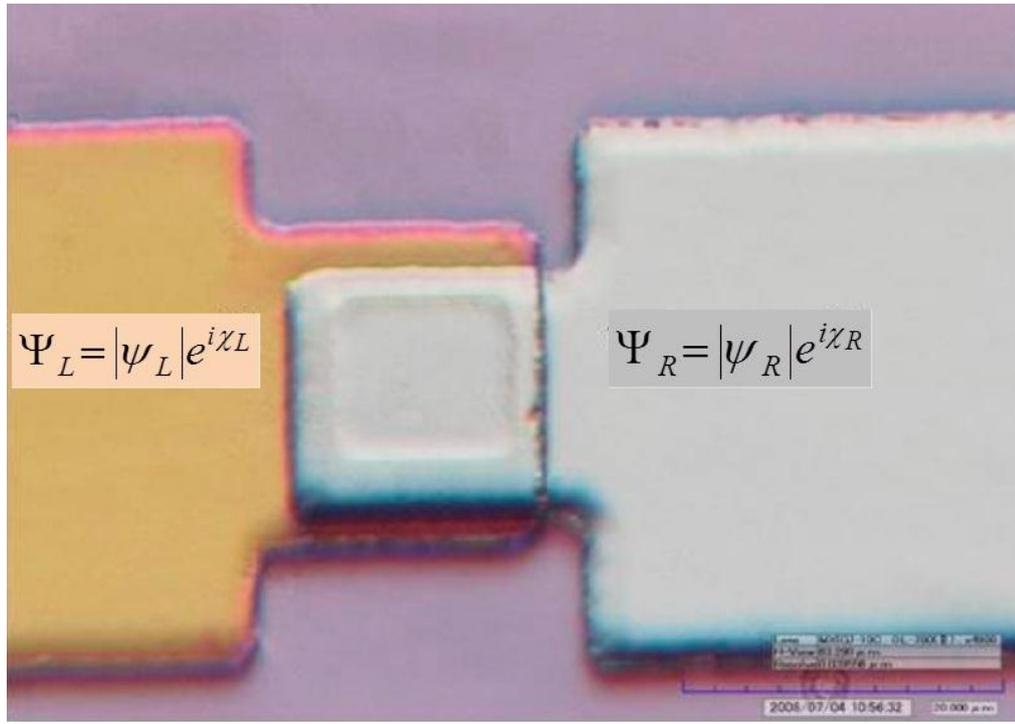


Рисунок 33 — Микрофотография джозефсоновского контакта и двух подводящих сверхпроводящих электродов (из работы: J. A. Blackburn, M. Cirillo, N. Grnbech-Jensen. A survey of classical and quantum interpretations of experiments on Josephson junctions at very low temperatures).

В процессе переноса электрона через барьер (например, слева направо) с левой стороны от этого барьера образуется дырочное состояние, а с правой – электронное. Для такого процесса может быть записан туннельный гамильтониан:

$$\begin{aligned} \hat{H}_T &= \bar{H}_{T_+} + \bar{H}_{T_-} + \bar{H}_{T_+} + \bar{H}_{T_-} = \\ &= \sum_{L,R} (t_{LR} \hat{a}_L \hat{a}_R^+ + t_{-L-R} \hat{a}_{-L} \hat{a}_{-R}^+ + t_{LR}^* \hat{a}_L^+ \hat{a}_R + t_{-L-R}^* \hat{a}_{-L}^+ \hat{a}_{-R}), \end{aligned} \quad (230)$$

где t_{LR} – туннельный матричный элемент, а индексы L и R относятся к состояниям с импульсом \mathbf{k} с левой и правой стороны сверхпроводника соответственно. Первые два слагаемых гамильтониана \bar{H}_{T_+} и \bar{H}_{T_-} отвечают за туннелирования одного электрона слева направо со взаимно противоположными импульсами, а оставшиеся два слагаемых \bar{H}_{T_+} и \bar{H}_{T_-} – за туннелирование справа налево.

Электронные операторы рождения/уничтожения должны быть выражены через операторы рождения/уничтожения боголюбовских квазичастиц по рецептам, разобранным при решении задач предыдущего раздела. Принципиально важной особенностью рассматриваемой задачи будет учет комплексного характера весовых коэффициентов в прямых и обратных преобразованиях Боголюбова, что мы попытаемся отразить при помощи введения новых обозначений:

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ &= u_k \hat{a}_k^+ - v_k e^{-i\chi} \hat{a}_{-k}, \quad \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ = u_k \hat{a}_{-k}^+ + v_k e^{-i\chi} \hat{a}_k, \\ \hat{a}_k &= u_k \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ + v_k e^{i\varphi} \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+, \quad \hat{a}_{-k} = u_k \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ - v_k e^{i\varphi} \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+, \\ \hat{a}_k^+ &= u_k \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+ + v_k e^{-i\varphi} \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+, \quad \hat{a}_{-k}^+ = u_k \hat{\alpha}_{k\uparrow}^+ + v_k e^{-i\varphi} \hat{\alpha}_{k\downarrow}^+.\end{aligned}$$

Подставляя обратные преобразования Боголюбова в гамильтониан (230) видим, что все четыре его слагаемых содержат квазичастичные операторы рождения. Поскольку только операторы $\hat{\alpha}^+$, действуя на основное состояние, не дают ноль, то результатом учета туннельного взаимодействия между сверхпроводящими частями системы является создание конечных состояний $\Psi_f^{L,R}$, суммарная энергия которых определяется разностью потенциалов между сверхпроводящими электродами структуры $E_R + E_L = eV$.

Суммарный ток из левого электрода в правый подсчитаем как сумму по всем возможным конечным квазичастичным состояниям, при выполнении указанного условия на суммарную энергию квазичастиц конечного состояния:

$$\begin{aligned}\vec{I}_{qp} &= e \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{L,R}^{E_R+E_L=eV} \left| \langle \Psi_f^L | \langle \Psi_f^R | \vec{H}_{T+} + \vec{H}_{T-} | \Psi_f^R \rangle | \Psi_f^L \rangle \right|^2 = \\ &= \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{L,R}^{E_R+E_L=eV} \left[|t_{LR}|^2 + |t_{-L-R}|^2 \right] \cdot (u_R v_L)^2 = \\ &= \frac{4\pi e}{\hbar} |t|^2 N_{0R} N_{0L} \int_{-\infty}^{\infty} v_L^2 d\xi_L \int_{-\infty}^{\infty} u_R^2 d\xi_R \delta(eV - E_L - E_R)\end{aligned}$$

где в последнем равенстве мы воспользовались выражением энергии через дираковскую δ -функцию и положили матричные элементы $|t|^2$ равными константе. Учитывая, что $E(\xi_k) = E(-\xi_k)$ и $u_k(\xi_k) = v_k(-\xi_k)$, получим:

$$\begin{aligned}\vec{I}_{qp} &= \frac{4\pi e}{\hbar} |t|^2 N_{0R} N_{0L} \int_0^{\infty} (v_L^2 + u_L^2) d\xi_L \int_0^{\infty} (u_R^2 + v_R^2) d\xi_R \delta(eV - E_L - E_R) = \\ &= \frac{4\pi e}{\hbar} |t|^2 N_{0R} N_{0L} \int_0^{\infty} d\xi_L \int_0^{\infty} d\xi_R \delta(eV - E_L - E_R)\end{aligned}$$

Этот результат схож с обычным результатом для приведенной выше «полупроводниковой модели» квазичастичного тока, которая говорит о том, что при $V < 2\Delta/e$ тока нет, при $V = 2\Delta/e$ наблюдается резкий скачок, а при $V \gg 2\Delta/e$ мы видим омическую зависимость.

Второй порядок теории возмущений в этой задаче дает, строго говоря, неверные результаты. Однако математическое упражнение на эту тему позволит нам ввести ряд важных понятий. Пусть:

$$\hat{H}_T^{(2)} = \sum_i \hat{H}_T \frac{1}{\varepsilon_i} \hat{H}_T,$$

где ε_i – энергия промежуточного i -го состояния. Для переноса электронов слева направо:

$$\begin{aligned} \langle \vec{H}_T^{(2)} \rangle &= -\sum_{L,R} \langle \Psi_-^R | \langle \Psi_-^L | (v_R e^{-i\chi_R} u_L) \frac{\hat{\alpha}_{R\downarrow} \hat{\alpha}_{L\uparrow} \hat{\alpha}_{R\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{L\uparrow}^+ t_{LR} t_{-L-R} + \hat{\alpha}_{R\uparrow} \hat{\alpha}_{L\downarrow} \hat{\alpha}_{R\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{L\downarrow}^+ t_{-L-R} t_{LR}}{E_R + E_L} \times \\ &\quad \times (u_R v_L e^{i\chi_L} | \Psi_-^L \rangle | \Psi_-^R \rangle = -2 |t|^2 e^{i(\chi_L - \chi_R)} \sum_{L,R} (v_R u_R) (u_L v_L) \frac{1}{E_R + E_L} = \\ &= -2 |t|^2 e^{i\phi} N_{0R} N_{0L} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_R \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_L \frac{\Delta}{E_R} \frac{\Delta}{E_L} \frac{1}{E_R + E_L} = \\ &= -\frac{\hbar\Delta}{2\pi e^2 R_N} e^{i\phi} \int_{-\infty}^{\infty} d\theta_R \int_{-\infty}^{\infty} d\theta_L \frac{1}{\text{cth}\theta_R + \text{cth}\theta_L} = -\frac{\hbar\Delta}{2\pi e^2 R_N} e^{i\phi} \left(\frac{\pi}{2}\right)^2, \quad \phi \equiv \chi_L - \chi_R \end{aligned} \quad (231)$$

Здесь мы воспользовались тем фактом, что $t_{LR}^* = t_{-L-R}$, положили для обоих сверхпроводников энергетическую щель равной Δ , использовали замену переменных $\xi_{R,L} = \Delta \text{sh}\theta_{R,L}$ и «расширили» пределы интегрирования на всю числовую ось от $-\infty$ до $+\infty$ (что допустимо в силу быстрой сходимости рассматриваемых интегралов). Аналогичные вычисления для переноса электронов справа налево дают выражение, сопряженное (231). Сумма этих двух выражений есть джозефсоновская энергия E_J , величина которой, как мы видим, зависит от введенного микроскопического параметра ϕ , называемого джозефсоновской фазой.

Для того, чтобы взглянуть под неожиданным углом на физическую суть полученных результатов, попробуем в нулевом приближении найти решение для SIS'-структуры как функцию числа куперовских пар в одном из электродов (например, левом): $H_{SS'} \psi_v = E_v \psi_v$; $\psi_v = \phi_{2(N-v)}^{(S')} \phi_{2v}^{(S)}$. Пусть для простоты $E_v = E$. Тогда задача сводится к уже разобранному случаю об электроне в периодическом потенциале в приближении сильной связи:

$$\begin{aligned} H \psi_v &= E \psi_v + J_0 (\psi_{v+1} + \psi_{v-1}), \quad J_0 = -4 |T|^2 \sum_{L,R} \frac{v_R u_R u_L v_L}{\varepsilon_R + \varepsilon_L}, \\ E(k) &= E_a + 2J_0 \cos(k), \quad |\psi(k)\rangle = \sum_v e^{ikv} |v\rangle. \end{aligned}$$

Наконец, для определения тока воспользуемся следующими соображениями:

$$\frac{d\langle v \rangle}{dt} \propto \frac{\partial E}{\partial k} \propto -2J_0 \sin k.$$

Отметим, что если на слое изолятора I возникло каким-то образом падение напряжения V , то тогда мы имеем дело с аналогом задачи об электроне в периодическом потенциале в присутствии постоянного электрического поля:

$$E_{\nu+1} - E_{\nu} = 2eV, \frac{d\langle \hbar k \rangle}{dt} \propto 2eV.$$

Забегая вперед, отметим, что, рассматривая джозефсоновский контакт как нелинейную индуктивность, а джозефсоновскую фазу ϕ – как нормированный магнитный поток, мы можем представить выражение для джозефсоновского тока в виде:

$$I_J(\phi) = \frac{2\pi}{\Phi_0} \frac{\partial E_J(\phi)}{\partial \phi}$$

Тогда джозефсоновский ток и джозефсоновская энергия имеют следующий вид:

$$I_J(\phi) = \frac{\pi}{2} \frac{\Delta}{eR_n} \sin \phi, \quad (232)$$

$$E_J(\phi) = -\frac{1}{8} \frac{R_K}{R_n} \Delta \cos \phi.$$

где $R_K = h/e^2$ – квантовое сопротивление. Выражение (232) принято называть формулой Амбегаокара-Баратова для джозефсоновского тока при нулевой температуре. Часто его записывают в следующем виде:

$$I_J(\phi) = I_C \sin \phi, \quad (233)$$

где $I_C = \frac{\pi}{2} \frac{\Delta}{eR_n}$ – критический ток джозефсоновского перехода, R_n – его нормальное сопротивление.

Отметим (без вывода), что для S_LIS_R гетероструктуры при ненулевой температуре выражение для критического тока имеет вид

$$I_C(T) = \frac{2\Delta_L(T)\Delta_R(T)}{\pi k_B T e R_N} \sum_{l=0,1,2} \left\{ \left[(2l+1)^2 + \left(\frac{\Delta_L(T)}{\pi k_B T} \right)^2 \right] \left[(2l+1)^2 + \left(\frac{\Delta_R(T)}{\pi k_B T} \right)^2 \right] \right\}^{-\frac{1}{2}},$$

а характерное напряжение $V_C \equiv I_C R_n$ можно оценить как $(\pi/4)V_G$, $V_G = 2\Delta/e$.

Задача 7.8 Получить связь джозефсоновского сверхтока с микроскопическими характеристиками для симметричной туннельной структуры сверхпроводник-изолятор-сверхпроводник в рамках модели квантовой двухуровневой системы.

Пусть к рассматриваемой симметричной гетероструктуре приложено постоянное напряжение V . Тогда разница химических потенциалов в сверхпроводниках равна $2eV$, и нулевой энергетический уровень можно выбрать так, что энергия основного состояния в правом сверхпроводнике оказалась равна $E_R = -eV$, а в левом $-E_L = +eV$. Тогда введем по аналогии с рассмотрением системы с двухямной потенциальной энергией в первой главе кет-векторы

основных состояний бозе-конденсатов левого и правого сверхпроводника $|\psi_L\rangle, |\psi_R\rangle$. Будем считать, что система в целом описывается вектором $|\psi\rangle = C_1|\psi_L\rangle + C_2|\psi_R\rangle$. Пусть, кроме того, матричный элемент, определяющий вероятность перехода между уровнями, равен K . Согласно основному уравнению квантовой механики:

$$i\hbar \frac{dC_{1,2}}{dt} = \pm eVC_{1,2}(t) + KC_{2,1}(t) \quad (234)$$

Считаем, для простоты, что амплитуды $C_{1,2}$ волновых функций для бозе-конденсатов куперовских пар в состояниях 1 и 2 нормированы одинаково: $|C_1|^2 = |C_2|^2 = n_S$ (величина n_S по своему смыслу здесь задает концентрацию носителей заряда) и тогда

$$C_{1,2}(t) = \sqrt{n_S} \exp(i\chi_{L,R}). \quad (235)$$

Подставляя эти выражения в основное уравнение, и разделяя действительные и мнимые части, получим:

$$\begin{aligned} \frac{dn_S}{dt} &= \frac{2Kn_S}{\hbar} \sin \varphi, \\ \frac{d\chi_L}{dt} &= -\frac{K}{\hbar} \cos \varphi - \frac{eV}{\hbar}, \\ \frac{d\chi_R}{dt} &= -\frac{K}{\hbar} \cos \varphi + \frac{eV}{\hbar} \end{aligned} \quad (236)$$

Здесь снова была введена «джозефсоновская фаза» $\varphi = \chi_L - \chi_R$. Первое соотношение можно истолковать в этом случае как связь между изменением концентрации носителей заряда в одном из сверхпроводящих электродов (джозефсоновским током) и таким микроскопическим параметром системы как разность фаз функций, описывающих «левый» и «правый» сверхпроводящие конденсаты (**Первый закон Джозефсона**). Второе и третье уравнения в системе (236) вместе можно понимать как связь приложенного к системе напряжения со скоростью изменения разности фаз (**Второй закон Джозефсона**):

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{2eV}{\hbar}. \quad (237)$$

Задача 7.9 Оценить энергию *джозефсоновского сверхтока* для симметричной туннельной структуры сверхпроводник-нормальный металл-сверхпроводник (SNS): джозефсоновского контакта с непосредственной проводимостью области слабой связи между сверхпроводящими материалами.

В джозефсоновских структурах с непосредственной проводимостью области слабой связи возникают и становятся приоритетными несколько другие механизмы переноса заряда, связанные с явлением *андреевского отражения*.

Учитывая закон сохранения импульса, получаем, что отраженная дырка будет лететь «навстречу» к падающему электрону; а из-за серии андреевских отражений от границ нормального металла со сверхпроводниками переносящая заряд частица оказывается локализована по всем пространственным координатам в узкой области внутри нормальной прослойки, что приводит к формированию системы дискретных (андреевских) энергетических уровней. За счет разных фаз у потенциала спаривания (сверхпроводящей щели) в разных S-электродах амплитуды андреевских процессов на разных берегах оказываются разными, а значит, такой механизм позволяет проводить сверхток. Величину переносимого через андреевские уровни сверхтока можно представить в «спектральной» форме (обозначения аналогичны использованным ранее):

$$I_S(\varphi) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} dE [1 - 2f(E)] \text{Im}\{I_E(\varphi)\}$$

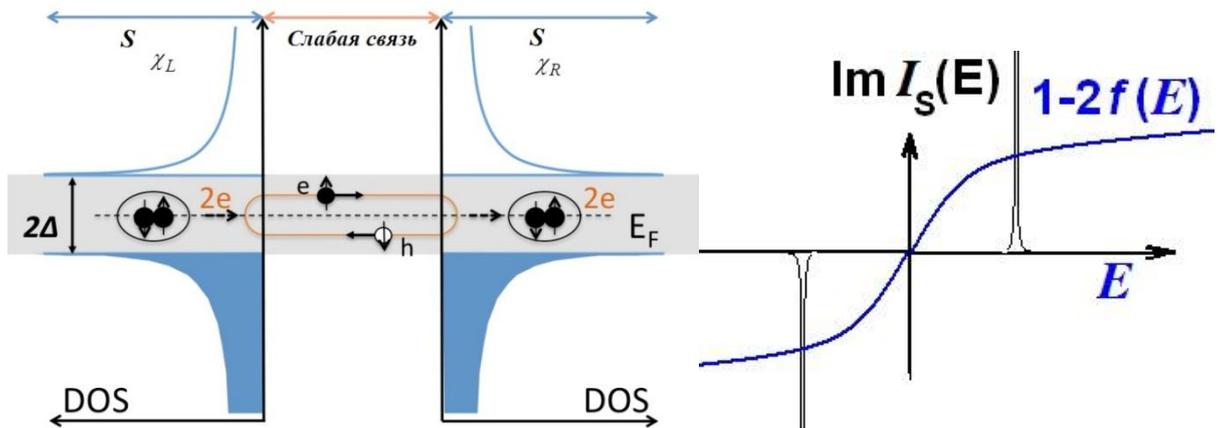


Рисунок 34 — Иллюстрация к формированию джозефсоновского тока куперовских пар через SNS структуру посредством андреевского отражения.

Отметим, что в реальности «точечные» джозефсоновские контакты (ScS типа) с предельно малыми размерами слабой связи неоднократно изготавливались, однако воспроизводимость их характеристик оставляет желать лучшего. При этом транспорт тока через «слабое место» можно в целом ряде случаев (в том числе и не имеющих отношения к использованию эффекта сверхпроводимости) описать как сумму вкладов от независимых «квазиточечных каналов», каждый из которых характеризуется своей проводимостью τ_i . В частности, для описания реальной туннельной джозефсоновской структуры, слой изолятора в которой содержит множество проводящих «включений», общий ток есть $I_J = \sum_i I_J(\tau_i)$.

Стоит повторить, что эффект близости и андреевское отражение – это две стороны одного и того же явления в полевом и корпускулярном представлении соответственно. И уравнения Боголюбова – де Жена, и уравнения Эйленбергера должны давать одинаковые результаты, как в чистом, так и в грязном пределах.

Методику анализа процессов переноса заряда рассмотрим на примере SNS-контакта с прослойкой толщиной d , соединяющей пару сверхпроводников. Будем считать, что металл чистый, а сверхпроводники эквивалентны. Используем для описания поведения квазичастиц систему уравнений Боголюбова – де Жена:

$$\begin{pmatrix} H_0(\vec{r}) & \Delta(\vec{r}) \\ \Delta^*(\vec{r}) & -H_0(\vec{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(\vec{r}) \\ v(\vec{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u(\vec{r}) \\ v(\vec{r}) \end{pmatrix},$$

где $H_0(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + W(\vec{r}) + U(\vec{r}) - \mu$, $U(\vec{r})$ и μ – электростатический и химический потенциалы соответственно. Потенциал взаимодействия моделируется с помощью уже использованного выше простого выражения: $W(\vec{r}) = W(\delta(z) + \delta(z-d))$, где ось z перпендикулярна поперечному сечению слоя, E – энергия квазичастицы относительно μ .

В приближении самосогласованного потенциала сверхпроводящих пар $\Delta(\vec{r}) = \Delta(e^{i\chi_L}\theta(-z) + e^{i\chi_R}\theta(z-d))$, где Δ – величина сверхпроводящей щели, $\varphi = \chi_R - \chi_L$ – макроскопическая разность фаз, вносимая контактом. Температурная зависимость Δ даётся формулой $\Delta(T) = \Delta(0)\tanh\left(1.74\sqrt{T_c/T} - 1\right)$, где согласно разобранный выше модели Бардина-Купера-Шриффера, $\Delta(0) = 1.76$. $E_F^{(s)} = \mu - U(\vec{r})$ – энергия Ферми для сверхпроводника. $k_F^{(s)} = \sqrt{2mE_F^{(s)} / \hbar^2}$ – модуль волнового вектора Ферми.

Параллельная компонента волнового вектора \vec{k}_{\parallel} сохраняется, и волновая функция $\begin{pmatrix} u(\vec{r}) \\ v(\vec{r}) \end{pmatrix} = \exp(i\vec{k}_{\parallel}\vec{r})\psi(z)$ удовлетворяет следующим граничным условиям:

$$\psi(z)\Big|_{z=0} = \psi(z)\Big|_{z=+0}, \quad \frac{d\psi(z)}{dz}\Big|_{z=+0} - \frac{d\psi(z)}{dz}\Big|_{z=0} = \frac{2mW}{\hbar^2}\psi(0),$$

$$\psi(z)\Big|_{z=d-0} = \psi(z)\Big|_{z=d+0}, \quad \frac{d\psi(z)}{dz}\Big|_{z=d+0} - \frac{d\psi(z)}{dz}\Big|_{z=d-0} = \frac{2mW}{\hbar^2}\psi(d).$$

Четыре независимых решения уравнения Боголюбова-де Жена соответствуют четырём типам процессов падения квазичастиц: электроноподобная квазичастица или дырочноподобная квазичастица, падающая из левого или из правого сверхпроводника.

Для падения электроно-подобного возбуждения из левого сверхпроводника с энергией $E > \Delta$ и углом падения θ (измеренным от оси z) $\psi(z)$ имеет следующий вид:

$$\psi_1(z) = \begin{cases} \left(e^{ik^+z} + b_1 e^{-ik^+z} \right) \begin{pmatrix} \bar{u} e^{i\chi_L/2} \\ \bar{v} e^{-i\chi_L/2} \end{pmatrix} + a_1 e^{ik^-z} \begin{pmatrix} \bar{v} e^{i\chi_L/2} \\ \bar{u} e^{-i\chi_L/2} \end{pmatrix}, z < 0 \\ \left(C_1 e^{iq^+z} + C_2 e^{-iq^+z} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \left(C_3 e^{iq^-z} + C_4 e^{-iq^-z} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, 0 < z < d. \\ c_1 e^{ik^+z} \begin{pmatrix} \bar{u} e^{i\chi_R/2} \\ \bar{v} e^{-i\chi_R/2} \end{pmatrix} + d_1 e^{-ik^-z} \begin{pmatrix} \bar{v} e^{i\chi_R/2} \\ \bar{u} e^{-i\chi_R/2} \end{pmatrix}, z > d \end{cases}$$

Здесь $\bar{u} = \sqrt{(1 + \Omega/E)/2}$ и $\bar{v} = \sqrt{(1 - \Omega/E)/2}$ – амплитуды БКШ, где $\Omega = \sqrt{E^2 - \Delta^2}$.

$k^\pm = \left(\left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) (E_F \pm \Omega) - k_\parallel^2 \right)^{1/2}$ и $q^\pm = \left(\left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) (E_F \pm E) - k_\parallel^2 \right)^{1/2}$ – перпендикулярные –

компоненты волновых векторов, $k_\parallel = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_F + \Omega)} \cdot \sin \theta$ – сохраняющаяся параллельная

компонента. Коэффициенты a_1, b_1, c_1 и d_1 – соответственно амплитуды вероятностей обобщённого андреевского отражения как дырочно-подобной, нормального отражения как электроно-подобной, пропускания в правый электрод как электроно-подобной и пропускания в правый электрод как дырочно-подобной квазичастицы.

Для падения дырочно-подобной квазичастицы из левого сверхпроводника с энергией $E > \Delta$ и углом падения θ функция $\psi(z)$ имеет следующий вид:

$$\psi_2(z) = \begin{cases} \left(e^{-ik^-z} + b_2 e^{ik^-z} \right) \begin{pmatrix} \bar{v} e^{i\chi_L/2} \\ \bar{u} e^{-i\chi_L/2} \end{pmatrix} + a_2 e^{-ik^+z} \begin{pmatrix} \bar{u} e^{i\chi_L/2} \\ \bar{v} e^{-i\chi_L/2} \end{pmatrix}, z < 0 \\ \left(C'_1 e^{iq^+z} + C'_2 e^{-iq^+z} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \left(C'_3 e^{iq^-z} + C'_4 e^{-iq^-z} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, 0 < z < d. \\ c_2 e^{-ik^-z} \begin{pmatrix} \bar{v} e^{i\chi_R/2} \\ \bar{u} e^{-i\chi_R/2} \end{pmatrix} + d_2 e^{ik^+z} \begin{pmatrix} \bar{u} e^{i\chi_R/2} \\ \bar{v} e^{-i\chi_R/2} \end{pmatrix}, z > d \end{cases}$$

Здесь перпендикулярные компоненты волновых векторов имеют тот же вид, но

$k_\parallel = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_F - \Omega)} \cdot \sin \theta$. Аналогично можно записать выражения ψ_3 и ψ_4 для падения

электроно-подобных и дырочно-подобных возбуждений из правого сверхпроводника соответственно.

Разобранная постановка задачи даёт следующие результаты для анализа токового транспорта. Сначала рассмотрим случай $|E| < \Delta$ – квазичастица «поймана» в потенциальной яме. Функция $\psi(z)$ будет иметь следующий вид:

$$\psi_2(z) = \begin{cases} be^{-ik^+z} \begin{pmatrix} \bar{u} \\ \bar{v} \end{pmatrix} + ae^{ik^-z} \begin{pmatrix} \bar{v} \\ \bar{u} \end{pmatrix}, z < 0 \\ (C_1 e^{iq^+z} + C_2 e^{-iq^+z}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + (C_3 e^{iq^-z} + C_4 e^{-iq^-z}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, 0 < z < d, \\ ce^{ik^+z} \begin{pmatrix} \bar{u} e^{i\varphi/2} \\ \bar{v} e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix} + de^{-ik^-z} \begin{pmatrix} \bar{v} e^{i\varphi/2} \\ \bar{u} e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix}, z > d \end{cases}$$

где $\varphi = \chi_R - \chi_L$ – разность фаз контакта.

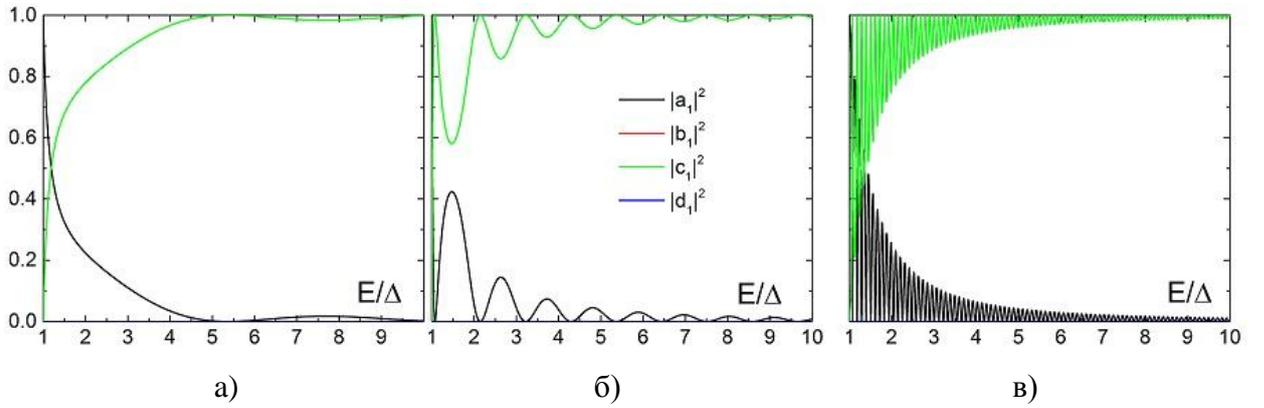


Рисунок 35 — Зависимость квадратов модулей коэффициентов от энергии падающей квазичастицы при $W = 0$ и $\varphi = 0$. (а) $d = 10$; (б) $d = 50$; (в) $d = 500$. W и d нормированы на $\sqrt{2m / \hbar^2}$.

Подставляя этот вид $\psi(z)$ в граничные условия, приведённые выше, получаем однородную систему уравнений относительно коэффициентов $a, b, c, d, C_1, C_2, C_3, C_4$ с параметром E , численно решая которую, находим все возможные E , при которых система разрешима, соответствующие разрешенным уровням энергии квазичастицы в потенциальной яме. Энергия E в данном случае может принимать только подбарьерные значения, то есть $|E| < \Delta(T)$, причём случай $E > 0$ будет описывать электроподобные квазичастицы, а $E < 0$ – дырочноподобные.

Подбарьерный ток может быть рассчитан по следующей формуле, учитывающей распределение квазичастиц по энергиям:

$$I(\varphi) = -\frac{2e}{\hbar} \sum_p \tanh(E_p(\varphi) / 2k_B T) \frac{dE_p(\varphi)}{d\varphi}.$$

Полный джозефсоновский ток при заданной температуре может быть рассчитан с помощью формулы Фурусак-Цукада в терминах амплитуд андреевского отражения с использованием формализма функций Грина:

$$I = \frac{e\Delta}{2\hbar} k_B T \sum_{\omega_n} \frac{1}{2\Omega_n} (k_n^+ + k_n^-) \left(\frac{a_{n1}}{k_n^+} - \frac{a_{n1}}{k_n^-} \right).$$

где $k_n^+, k_n^-, a_{n1}, a_{n2}$ получены соответственно из k^+, k^-, a_1, a_2 путём аналитического продолжения $E \rightarrow i\omega_n$, где $\omega_n = \pi k_B T (2n + 1)$ – мацубаровские частоты, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, и $\Omega_n = \sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}$.

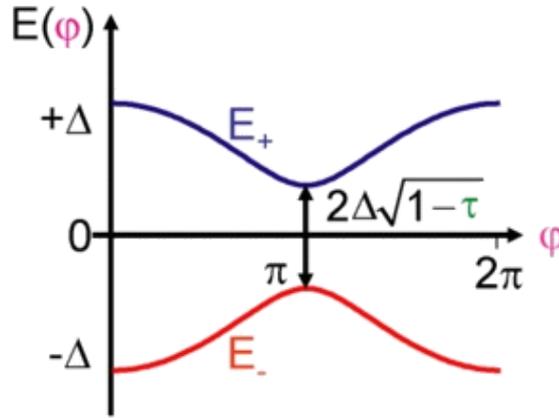


Рисунок 36 — Схематический вид зависимости энергии андреевских уровней от джозефсоновской фазы для проводимости «нормального канала» τ .

$$E_J = \pm \Delta \sqrt{1 - \tau \sin^2(\varphi / 2)}.$$

Так как электрон-дырочное связанное состояние, совершающее ограниченное движение в «потенциальном ящике» области слабой связи, и обеспечивает протекание джозефсоновского тока, полученное выражение можно трактовать как искомую грубую оценку для энергии последнего.

Зависимость энергии квазичастичного связанного состояния от различных значений проводимости «нормального канала» τ показана на рисунке 36, весьма похожем на аналогичный схематический рисунок для системы с двухъямной потенциальной энергией, приведенный в **главе 1**. Соответствие энергии E_J джозефсоновской энергии может быть проверено также при устремлении величины τ к нулю:

$$E_{J-} \approx -\Delta + \frac{\Delta\tau}{4} - \frac{\Delta\tau}{4} \cos(\varphi).$$

Ток через джозефсоновский контакт можно оценить из соображений размерности, взяв производную по φ от полученной энергии (отталкиваясь также и от разобранных в предыдущей главе особенностей макроскопической квантовой интерференции в сверхпроводящих цепях):

$$I_J = \frac{2\pi}{\Phi_0} \frac{\partial E_J}{\partial \varphi} \approx -\frac{\hbar}{2e} \frac{\Delta \tau}{4} \sin(\varphi) \equiv I_C \sin(\varphi).$$

Упражнение 7.2 Рассмотреть эффект близости в «сэндвиче» из сверхпроводника (S) нормального металла (N) и сверхпроводника (S) в «грязном» пределе.

Необходимые результаты можно получить из уравнений Узаделя:

$$\omega F_\omega + \frac{1}{2} D (F_\omega \nabla^2 G_\omega - G_\omega \nabla^2 F_\omega) = \Delta^* G_\omega, \quad G_\omega^2 + F_\omega F_\omega^* = 1,$$

где $\omega = \pi T (2n + 1)$ мацубаровская частота, F_ω и G_ω - аномальная и нормальная функции Грина, D - коэффициент диффузии материала, Δ - параметр порядка.

Далее будем по умолчанию считать, что для образующих структуру материалов выполнены условия «грязного» предела, толщина сверхпроводящих электродов d_S достаточно велика для того, чтобы изменение критической температуры сверхпроводника вследствие его близости с материалом прослойки было пренебрежимо мало. Также предположим, что сам переход квазиодномерен, то есть его размер W в направлении, перпендикулярном сверхтоку, относительно мал.

При переходе к Φ -параметризации запишем граничные условия в следующем виде:

$$\Phi(\pm\infty) = \Delta \quad (238)$$

$$\xi_2 G_2^2 \partial_x \Phi_2 = \gamma \xi_1 G_1^2 \partial_x \Phi_1 \quad (239)$$

$$\xi_2 \gamma_B G_2 \partial_x \Phi_2 = G_1 (\Phi_1 - \Phi_2) \quad (240)$$

где γ_B, γ - описанные выше безразмерные параметры, характеризующие границы раздела двух

материалов, $\gamma_B = \frac{RS}{\rho_1 \xi_1}$, $\gamma = \frac{\rho_2 \xi_2}{\rho_1 \xi_1}$, $\gamma = \gamma_S = \frac{1}{\gamma_N}$, R - электрическое сопротивление границы, S -

площадь границы, $\rho_1, \rho_2, \xi_1, \xi_2$ - удельное сопротивление материала и длина когерентности для первого и второго слоя гетероструктуры соответственно.

Для того, чтобы решить уравнение Узаделя аналитически, будем считать, что температура материала T близка к критической температуре T_C . Тогда аномальная функция Грина G мала и можно положить:

$$G = \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2}} = \text{sign}(\omega), \quad F = \frac{\Phi}{\sqrt{\omega^2 + \Phi \Phi^*}} = \frac{G \Phi}{\omega}.$$

Уравнение самосогласования имеет вид:

$$\Delta \ln \frac{T_C}{T} = \pi T \sum_{\infty} \frac{\Delta - \Phi G}{\omega}.$$

Для первого («левого») S -слоя ($\Delta^* = \Delta$) имеем:

$$\Phi_{S_1} - \frac{\text{sign}(\omega) D_S}{2\omega} \frac{\partial^2 \Phi_{S_1}}{\partial x^2} = \Delta$$

или

$$\frac{\partial^2 \Phi_{S_1}}{\partial x^2} - \frac{2\omega}{\text{sign}(\omega) D_S} \Phi_{S_1} + \frac{2\Delta\omega}{\text{sign}(\omega) D_S} = 0.$$

Последнее уравнение – дифференциальное уравнение второго порядка с характеристическим уравнением

$$k^2 - \frac{2\omega}{\text{sign}(\omega) D_S} = 0, \quad k_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{2\omega}{\text{sign}(\omega) D_S}}.$$

В общем виде решение функций Грина в Φ -параметризации выглядит следующим образом:

$$\Phi_{S_1}(x) = A_1 e^{\sqrt{\frac{2\omega}{D_S \text{sign}(\omega)}} \cdot x} + A_2 e^{-\sqrt{\frac{2\omega}{D_S \text{sign}(\omega)}} \cdot x} + \Delta.$$

С учетом граничных условий получаем, что при $x \rightarrow -\infty$ функция $\Phi_{S_1}(x)$ должна стремиться к

Δ . А это значит, что слагаемое $A_2 e^{-\sqrt{\frac{2\omega}{D_S \text{sign}(\omega)}} \cdot x}$ равно нулю.

Следовательно, искомое решение принимает окончательный вид

$$\Phi_{S_1}(x) = A_1 e^{\sqrt{\frac{2\omega}{D_S \text{sign}(\omega)}} \cdot x} + \Delta.$$

Для слоя нормального металла ($\Delta^* = 0$) мы получаем похожее дифференциальное уравнение второго порядка

$$\Phi_{S_1} - \frac{\text{sign}(\omega) D_N}{2\omega} \frac{\partial^2 \Phi_N}{\partial x^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 \Phi_N}{\partial x^2} - \frac{2\omega}{\text{sign}(\omega) D_N} \Phi_N = 0,$$

с аналогичным характеристическим уравнением и решением в виде двух (затухающей и растущей) действительных экспонент. Наконец, третий («правый») S -слой для функции Грина в Φ -параметризации дает:

$$\Phi_{S_2}(x) = C_2 e^{-\sqrt{\frac{2\omega}{D_S \text{sign}(\omega)}} \cdot x} + \Delta$$

Из граничных условий для первой границы S_1 / N ($x = -\frac{d}{2}$) имеем:

$$\xi_F G_F^2 \partial_x \Phi_F = \gamma_S^2 G_{S_1}^2 \partial_x \Phi_{S_1}, \quad \xi_F \gamma_B G_F \partial_x \Phi_F = G_{S_1} (\Phi_{S_1} - \Phi_F).$$

Для второй границы N/S_2 $\left(x = +\frac{d}{2}\right)$:

$$\gamma \xi_S G_{S_2}^2 \partial_x \Phi_{S_2} = \xi_F G_F^2 \partial_x \Phi_F, \quad \xi_S \gamma_B G_{S_2} \partial_x \Phi_{S_2} = G_F (\Phi_F - \Phi_{S_2}).$$

Поведение гриновских функций представлено схематично ниже на Рисунке 37.

В частности, для относительно длинного SNS-контакта решение уравнения Узаделя в N -области приводит к синусоидальной ток-фазовой зависимости $I_S(\varphi)$ и экспоненциальной зависимости критического тока I_C от размера области слабой связи, нормированного на длину когерентности ξ :

$$I_c R_n = V_0 \frac{d}{\xi} \exp\left\{-\frac{d}{\xi}\right\}, \quad d \gg \xi.$$

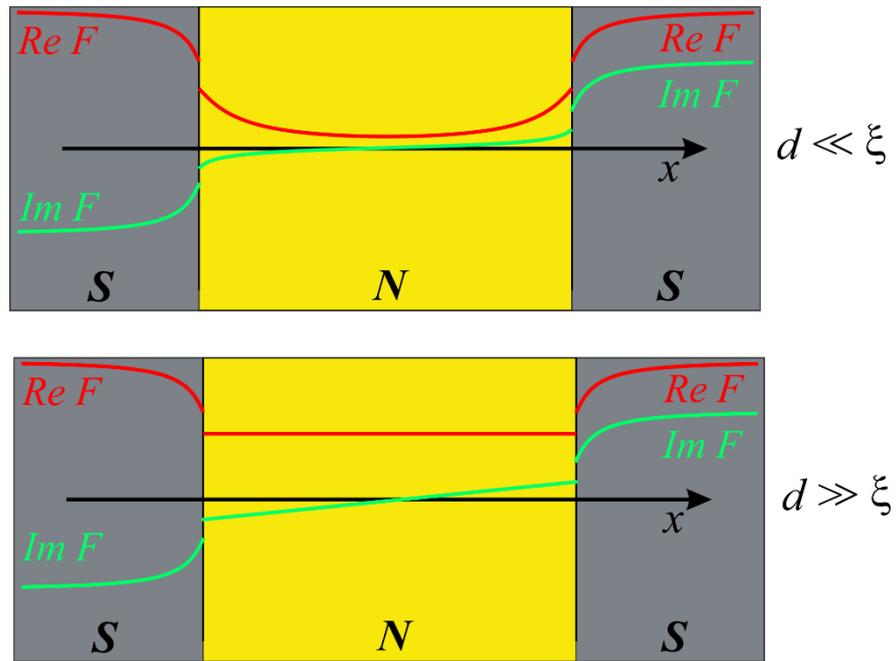


Рисунок 37 — Иллюстрация к описанию поведения «волновой функции для сверхпроводящих электронов» для длинной (верхний рисунок) и короткой (нижний рисунок) SNS структур.

Подробно проблемы этой главы разобраны в работах: *Асламазов, Зайцев (2004), Кулик, Лихарев, Минеев, Свидзинский, Солимар, Фейнман, Фоминов, Щелкачев, Корпін, Likharev, Zaitsev.*

Глава 8. Джозефсоновские контакты, сверхпроводящие квантовые интерферометры. Перспективные применения

Анализ возможностей практического использования макроскопических квантовых эффектов в структурах с джозефсоновскими контактами – гетероструктурами вида сверхпроводник–«слабая связь»–сверхпроводник, где в качестве слабой связи могут выступать тонкая (толщиной в десятки ангстрем) туннельная прослойка, слой нормального металла (толщиной в сотни ангстрем) и т.д. – необходимо начать с систематизации результатов предыдущей главы.

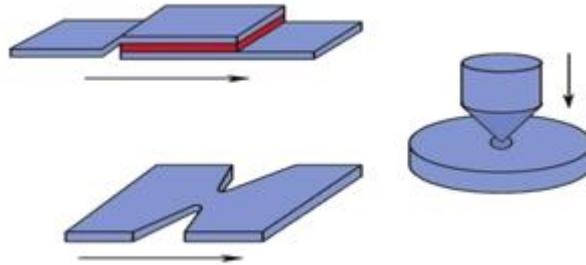


Рисунок 38 — Схематические изображения слабых связей трех типов: сверхпроводник-изолятор-сверхпроводник («сэндвич»); сверхпроводник-сужение-сверхпроводник вида «мостик переменной толщины»; точечный контакт.

Носителями сверхтока в сверхпроводниках при $T = 0$ К являются все электроны проводимости. При повышении температуры появляются элементарные возбуждения («нормальные» электроны), так что концентрация сверхпроводящих электронов при температуре T

$$n_s(T) = n(0) - n_n(T),$$

где $n(0)$ - концентрация электронов проводимости, $n_n(T)$ – концентрация «нормальных» электронов при температуре T . В теории БКШ при $T \rightarrow T_C$

$$n_s(T) \sim \Delta^2(T),$$

где $\Delta(T)$ – ширина энергетической щели в спектре возбуждений в сверхпроводнике.

Все сверхпроводящие электроны образуют связанные скоррелированные состояния – куперовские пары, которые объединяют электроны с противоположными спинами и импульсами и, следовательно, имеют нулевой суммарный спин. В отличие от нормальных электронов, имеющих спин $1/2$ и поэтому подчиняющихся статистике Ферми-Дирака, куперовские пары подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна и «конденсируются» на одном энергетическом уровне. Характерной особенностью куперовских пар является их относительно

большой эффективный размер (порядка 1 мкм), намного превышающий среднее расстояние между парами (порядка межатомных расстояний). Выше мы предположили, что вся совокупность («конденсат») куперовских пар является когерентной, т. е. описывается единой «волновой функцией» (параметром порядка) вида $\Psi = \Delta \cdot e^{iz}$. Для сравнения укажем, что для нормальных электронов в силу принципа Паули энергии никогда не равны друг другу точно. Как следствие – скорости изменения фаз $-\hbar \frac{\partial \chi_k}{\partial t} = E_k$ одночастичных волновых функций нормальных электронов различаются, а сами фазы χ_k оказываются равномерно распределенными по тригонометрической окружности, и при выражении макроскопических переменных через волновые функции зависимость от фаз исчезает. В сверхпроводниках квантовая когерентность бозе-конденсата куперовских пар в макроскопическом масштабе проявляет себя через:

- 1) сам факт наличия бездиссипативного сверхтока,
- 2) эффект Джозефсона, т.е. через существование бездиссипативного тока и через разделяющую сверхпроводники область «слабой связи» с тем или иным образом «подавленной» концентрацией куперовских пар,
- 3) эффект квантования магнитного потока и явление макроскопической квантовой интерференции.

Стационарный эффект Джозефсона

При протекании через джозефсоновский контакт постоянного тока, не превышающего определенную величину, называемую критическим током ($I < I_C$), напряжение на контакте равно нулю. Величина постоянного сверхтока является периодической нечетной функцией разности фаз параметров порядка в сверхпроводящих электродах $\varphi = \chi_L - \chi_R$, называемой джозефсоновской фазой. В ряде важных случаев эта ток-фазовая зависимость представима в виде

$$I_J = I_C \sin \varphi. \quad (\text{ГФЗ})$$

В отсутствие тока через джозефсоновский элемент $\varphi = 0$ (с точностью до $2\pi n$, где n – целое число), а при протекании максимального сверхтока, равного I_C , джозефсоновская фаза $\varphi = \pi/2$. Джозефсоновский переход обладает уникальными нелинейными свойствами, в частности, нелинейной дифференциальной индуктивностью

$$L_d = \frac{\hbar}{2eI_C \cos \varphi} \equiv L_c / \cos \varphi,$$

которая может принимать даже отрицательные значения.

Нестационарный эффект Джозефсона ($d\varphi/dt \neq 0$)

Пусть, для примера, через джозефсоновский элемент пропускается ток I больше критического I_C . В этом случае в переносе тока I через джозефсоновский переход кроме сверхтока I_S будет участвовать также нормальная компонента I_n , которая представляет собой ток «нормальных» электронов $n_n(T)$. Таким образом, $I = I_S + I_n$. Протекание нормальной и, следовательно, диссипативной, компоненты тока обуславливает появление на джозефсоновском переходе падения напряжения

$$V = I_n R_n,$$

где R_n – так называемое нормальное сопротивление перехода.

Основное соотношение Джозефсона связывает величину этого падения напряжения со скоростью изменения джозефсоновской фазы

$$d\varphi/dt = (2e/\hbar) \cdot V. \tag{241}$$

Как следствие, при протекании через джозефсоновский контакт постоянного тока $I > I_C$ будет иметь место неограниченное нарастание (или убывание, если $V < 0$) джозефсоновской фазы φ и, следовательно, периодическое изменение во времени сверхтока I_S . Таким образом, при пропускании через джозефсоновский элемент *постоянного* тока $|I| > I_C$ этот ток будет переноситься двумя компонентами тока I_S и I_n , которые согласно (241) *осциллируют* (в противофазе) во времени с частотой, пропорциональной постоянной составляющей \bar{V} падения напряжения на джозефсоновском переходе:

$$\omega_j = (2e/\hbar) \cdot \bar{V}.$$

Напряжение на джозефсоновском элементе $V(t) = I_n(t)R_n$ будет также осциллировать во времени, и этот процесс носит название *джозефсоновской генерации*. Такое состояние джозефсоновского перехода называется *резистивным*. Следует подчеркнуть, что, несмотря на наличие падения напряжения на джозефсоновском переходе, *сверхпроводимость электродов*, образующих джозефсоновский элемент, в резистивном состоянии *сохраняется*.

Отметим, также, что комбинация мировых констант, входящих в джозефсоновское соотношение и связывающих напряжение с частотой генерации, равна $2e/\hbar = 483,6$ МГц/мкВ; по размерности эта величина является «обратной» к магнитному потоку, что позволяет ввести понятие кванта магнитного потока также и как $\frac{\Phi_0}{2\pi} = \frac{\hbar}{2e}$.

Если джозефсоновский элемент обладает заметной собственной емкостью C (например, туннельный джозефсоновский контакт-«сэндвич»), то в резистивном состоянии ток через него будет представлять собой сумму трех компонент I_S , I_n и емкостной компоненты тока

$$I_D = C \cdot dV / dt .$$

Наиболее простым способом описания джозефсоновских элементов, хорошо описывающим многие джозефсоновские переходы нетуннельного типа, а также широко используемые туннельные контакты с резистивным шунтированием, является резистивная модель, в которой нормальное сопротивление R_n является постоянной величиной, не зависящей от напряжения V .

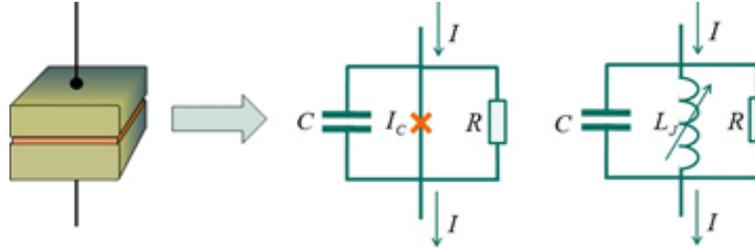


Рисунок 39 — Иллюстрация к записи основного уравнения резистивной модели джозефсоновского контакта.

$$I = I_c \cdot \sin \varphi + V/R_n + C \frac{dV}{dt} + I_F \quad (\text{RSJ})$$

Последнее слагаемое в этом выражении соответствует току, возникающему, например, из-за флуктуаций напряжений на резисторе в эквивалентной схеме элемента.

Отметим, что значение плотности критического тока джозефсоновской гетероструктуры намного (на несколько порядков) меньше плотности критического тока электродов $j_c \approx 10^8 \text{ А/см}^2$. Для туннельных структур типа «сэндвич» плотность критического тока джозефсоновских переходов обычно лежит в диапазоне $j_c \approx 10^1 \dots 10^5 \text{ А/см}^2$, а их площадь A в рамках современной технологии может быть сделана от нескольких сотен до десятых долей квадратного микрона. Поэтому критический ток таких джозефсоновских элементов $I_c = j_c \cdot A$ может лежать в диапазоне от нескольких миллиампер до нескольких микроампер.

Упражнение 8.1 Выделить ключевые для анализа динамических процессов параметры джозефсоновских гетероструктур и проанализировать их типичные значения для

Выражение для тока через джозефсоновскую гетероструктуру в общем случае представимо в виде:

$$I(t) = \text{Im} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon' \left[W(\varepsilon)W(\varepsilon')J_p(\varepsilon' + \omega_0)e^{i(\varepsilon+2\omega_0\varepsilon')t} + W(\varepsilon)W^*(\varepsilon')J_p(\varepsilon' + \omega_0)e^{i(\varepsilon-2\omega_0\varepsilon')t} \right] \right\},$$

где функция $W(\varepsilon)$ определяется законом изменения во времени разности фаз на переходе $\varphi(t)$:

$$e^{i\frac{\varphi(t)}{2}} = e^{ie \int V(t') dt'} = \int W(\varepsilon) e^{i(\omega+\varepsilon)t} d\varepsilon .$$

В записанных выражениях $\omega_0 = e\bar{V}/2$, \bar{V} – постоянная

составляющая напряжения. Функции $J_{p,q}(\varepsilon)$ определяются свойствами сверхпроводящих

электродов и в случае, когда модуль параметра порядка для сверхпроводников $\Delta(T)$ не зависит от пространственных координат, определяются выражениями:

$$\operatorname{Re} J_p(V) = \frac{\sigma_n}{2e} \int d\varepsilon \left[\operatorname{Im} F_1^R(\varepsilon) \operatorname{Re} F_2^R(\varepsilon + eV) + \operatorname{Im} F_2^R(\varepsilon) \operatorname{Re} F_1^R(\varepsilon + eV) \right] \operatorname{th} \left[\frac{\varepsilon}{2T} \right]$$

$$\operatorname{Im} J_p(V) = \frac{\sigma_n}{2e} \int d\varepsilon \left[\operatorname{Im} F_1^R(\varepsilon + eV) \operatorname{Im} F_2^R(\varepsilon) \right] \left[\operatorname{th} \left[\frac{\varepsilon + eV}{2T} \right] - \operatorname{th} \left[\frac{\varepsilon}{2T} \right] \right],$$

$$\operatorname{Re} J_q(V) = \frac{\sigma_n}{2e} \int d\varepsilon \left[\operatorname{Im} G_1^R(\varepsilon) \operatorname{Re} G_2^R(\varepsilon + eV) + \operatorname{Im} G_2^R(\varepsilon) \operatorname{Re} G_1^R(\varepsilon + eV) \right] \operatorname{th} \left[\frac{\varepsilon}{2T} \right]$$

$$\operatorname{Im} J_q(V) = \frac{\sigma_n}{2e} \int d\varepsilon \left[\operatorname{Im} G_1^R(\varepsilon + eV) \operatorname{Im} G_2^R(\varepsilon) \right] \left[\operatorname{th} \left[\frac{\varepsilon + eV}{2T} \right] - \operatorname{th} \left[\frac{\varepsilon}{2T} \right] \right].$$

Здесь с учетом традиции индексы 1, 2 относятся к левому и правому электродам соответственно, σ_n – проводимость единицы площади перехода в нормальном состоянии $F_{1,2}^R(\varepsilon), G_{1,2}^R(\varepsilon)$ – запаздывающие функции Грина, которые в случае пространственно-однородных электродов в рамках теории БКШ представимы в виде

$$F^R(\varepsilon) = \frac{\Delta(T)}{\sqrt{\Delta^2(T) - (\varepsilon + i0)^2}}, \quad G^R(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{\Delta^2(T) - (\varepsilon + i0)^2}}.$$

Основными параметрами, характеризующими свойства джозефсоновских структур в такой модели, являются:

- нормальное сопротивление R_n , определяемое геометрическими размерами структуры, прозрачностью ее границ и электрическими свойствами материала слабой связи;
- характерное напряжение $V_C = I_C R_n$ – наиболее стабильный параметр, определяющий высокочастотные свойства переходов, в частности, характерная частота протекающих в них процессов $\omega_C = \frac{2e}{h} V_C$;
- собственная емкость перехода C , степень влияния которой на процессы в джозефсоновских структурах определяется параметром $\beta_C = \sqrt{R_n \cdot \omega_C \cdot C}$.

Опыт показывает, что нестационарные процессы в переходах, обладающих одинаковыми значениями β_C, R_n, V_C , протекают практически одинаково. Поэтому, несмотря на то, что почти во всех применениях эффекта Джозефсона в контактах протекают нестационарные процессы, оказывается возможным определить их основные свойства исходя из стационарной теории.

В частности, из описанной выше туннельной модели вытекает, что при больших значениях безразмерной емкости, $\beta_C \gg 1$, напряжение на переходе практически постоянно и выражения для тока существенно упрощаются:

$$I(t) = \text{Re} J_p(V) \sin \varphi + \text{Im} J_p(V) \cos \varphi + \text{Im} J_q(V), \quad \varphi = 2eVt + \varphi_0.$$

Величина $\text{Re} J_p(V)$ есть амплитуда обычного джозефсоновского сверхтока, $\text{Im} J_p(V)$ – амплитуда диссипативной компоненты этого тока, обусловленной интерференцией пар и квазичастиц, $\text{Im} J_q(V)$ определяет квазичастичный ток.

Зависимости $J_{p,q}(V)$ при различных температурах были определены численными методами как в случае одинаковых сверхпроводящих электродов, $\Delta_1(T) = \Delta_2(T)$, так и при $\Delta_1 \neq \Delta_2$. Для дальнейшего изложения важно подчеркнуть, что при $eV \approx \Delta_1 + \Delta_2$ на зависимостях $J_{p,q}(V)$ имеются логарифмические особенности:

$$\text{Re} J_p(V) = \text{Re} J_q(V) + \text{const} = \frac{J_C}{\pi} \ln \left[\frac{eV - \Delta_1 - \Delta_2}{8(\Delta_1 + \Delta_2)} \right],$$

которые связаны соотношениями Крамерса-Кронига с конечными скачками величины мнимой диссипативной компоненты тока:

$$\begin{aligned} \text{Im} J_p(\Delta_1 + \Delta_2 + 0) - \text{Im} J_p(\Delta_1 + \Delta_2 - 0) = \\ = \text{Im} J_q(\Delta_1 + \Delta_2 + 0) - \text{Im} J_q(\Delta_1 + \Delta_2 - 0) = 0. \end{aligned}$$

Здесь J_C – критическая плотность тока:

$$J_C = \frac{O_n \pi \sqrt{\Delta_1 \Delta_2}}{4e} \cdot \left[\text{th} \frac{\Delta_1}{2T} + \text{th} \frac{\Delta_2}{2T} \right]$$

При $eV = (\Delta_1 - \Delta_2) > 0$ имеют место дополнительные особенности, выглядящие как скачки действительных частей функций $J_{p,q}(V)$:

$$\text{Im} J_p(\delta + 0) - \text{Im} J_p(\delta - 0) = \text{Im} J_q(\delta + 0) - \text{Im} J_q(\delta - 0) = J_C, \quad \delta = \Delta_1 + \Delta_2.$$

Также здесь наблюдаются логарифмические сингулярности в мнимых частях функции:

$$\text{Im} J_p(\Delta) = \text{Im} J_q(\Delta) = -\frac{\sigma_n \sqrt{\Delta_1 \Delta_2}}{4e} \left[\text{th} \frac{\Delta_1}{2T} + \text{th} \frac{\Delta_2}{2T} \right] \propto \ln \left[\frac{eV - (\Delta_1 - \Delta_2)}{8(\Delta_1 + \Delta_2)} \right]$$

В области малых напряжений действительные части $J_{p,q}(V)$ имеют конечные значения

$$\text{Re} J_p(0) = \text{Re} J_q(\infty) - \text{Re} J_q(0) = J_C,$$

а мнимые компоненты пропорциональны eV , так что конечные значения имеют проводимости

$$\frac{\sigma_p}{\sigma_n} = \frac{2}{T} \int_{\Delta_1}^{\infty} \frac{\Delta_1 \Delta_2 \exp(\varepsilon/T)}{\sqrt{(\varepsilon^2 - \Delta_1^2)(\varepsilon^2 - \Delta_2^2)} (\exp(\varepsilon/T) + 1)^2} d\varepsilon,$$

$$\frac{\sigma_q}{\sigma_n} = \frac{2}{T} \int_{\Delta_1}^{\infty} \frac{\Delta_1 \Delta_2 \exp(\varepsilon/T)}{\sqrt{(\varepsilon^2 - \Delta_1^2)(\varepsilon^2 - \Delta_2^2)} (\exp(\varepsilon/T) + 1)^2} d\varepsilon.$$

В случае $\Delta_1(T) = \Delta_2(T)$ проводимости $\sigma_{p,q}$ при $eV \ll 2\Delta$ имеют логарифмические особенности

$$\frac{\sigma_{p,q}}{\sigma_n} = \frac{\Delta}{T} \frac{\exp(\Delta/T)}{(\exp(\Delta/T) + 1)^2} \ln \frac{T}{eV} + F_{p,q}(T).$$

В отсутствие напряжения на переходе сверхтоки синусоидально зависят от джозефсоновской разности фаз φ (стационарный эффект Джозефсона с «тривиальной» ТФЗ), а характерное напряжение определяется выражением:

$$V_c = \frac{O_n \pi \sqrt{\Delta_1 \Delta_2}}{4e} \left[th \frac{\Delta_1}{2T} + th \frac{\Delta_2}{2T} \right]. \quad (242)$$

В частности, при $T \ll T_c$ из (242) имеем:

$$V_c = \begin{cases} (\pi \Delta(0)/2e), & \Delta_1 = \Delta_2 \\ (\Delta_2(0)/e) \ln(4\Delta_1(0)/\Delta_2(0)), & \Delta_1 \gg \Delta_2 \end{cases}. \quad (243)$$

При температурах, близких к критической, из (242) при $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta(T)$ следует, что

$$V_c = \frac{\pi \Delta^2(T)}{4eT}.$$

Задача 8.1 Найти явный вид джозефсоновской генерации на контакте с пренебрежимо малой емкостью в рамках резистивной модели.

Считая, что емкость перехода пренебрежимо мала, а флуктуаций нет, запишем выражение (RSJ) в виде:

$$\frac{\hbar}{2e \cdot R_n} \frac{d\varphi}{dt} = I - I_c \sin \varphi. \quad (244)$$

Это дифференциальное уравнение относительно функции $\varphi(t)$ нужно проинтегрировать, а его результат подставить в выражение (241). Нам потребуется (для применения метода разделения переменных) вычислить интеграл вида

$$\int \frac{dx}{a - b \cdot \sin x}.$$

Сделаем замену переменных $p = \tan x/2$, $dp = \frac{dx}{2 \cdot \cos^2 x/2}$ и, используя некоторые тригонометрические навыки, приводим наш интеграл к форме:

$$\int \frac{dx}{a-b \cdot \sin x} = \int \frac{1}{1+t^2} \cdot \frac{2dt}{a-b \cdot \frac{2t}{1+t^2}} = \int \frac{2dt}{a+at^2-2bt}.$$

Теперь в знаменателе выделяем полный квадрат:

$$\begin{aligned} \int \frac{2dt}{a+at^2-2bt} &= \int \frac{2dt}{(\sqrt{at}-b/\sqrt{a})^2 + a-b^2/a} = \left| s = \sqrt{at}-b/\sqrt{a} \right| = \\ &= \frac{1}{\sqrt{a}} \int \frac{2ds}{s^2 + (a-b^2/a)} = \frac{2}{\sqrt{a^2-b^2}} \cdot \arctan \left(\frac{\sqrt{a}s}{\sqrt{a^2-b^2}} \right) = \\ &= \frac{2}{\sqrt{a^2-b^2}} \cdot \arctan \left(\frac{ap-b}{\sqrt{a^2-b^2}} \right) = \frac{2}{\sqrt{a^2-b^2}} \cdot \arctan \left(\frac{a \cdot \tan(x/2)-b}{\sqrt{a^2-b^2}} \right). \end{aligned}$$

Подставляем сюда параметры нашей задачи:

$$t = \frac{\hbar}{2eR_n} \cdot \frac{2}{\sqrt{I^2-I_C^2}} \cdot \arctan \left(\frac{I \cdot \tan(\varphi/2) - I_C}{\sqrt{I^2-I_C^2}} \right),$$

и получаем уже явную зависимость $\varphi(t)$:

$$\varphi = 2 \cdot \arctan \left(\frac{1}{I} \cdot \left[\sqrt{I^2-I_C^2} \cdot \tan \left\{ \frac{\omega t}{2} \right\} + I_C \right] \right), \quad \omega = \frac{2e}{\hbar} R_n \sqrt{I^2-I_C^2}. \quad (245)$$

Интересующую нас скорость изменения фазы можно определить как

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi}{dt} &= 2 \cdot \frac{1}{1 + \frac{1}{I} \cdot \left[\sqrt{I^2-I_C^2} \cdot \tan \left\{ \frac{\omega t}{2} \right\} + I_C \right]^2} \cdot \frac{\sqrt{I^2-I_C^2}}{I} \cdot \frac{\omega/2}{\cos^2 \left\{ \frac{\omega t}{2} \right\}} = \\ &= \frac{\omega \cdot \sqrt{I^2-I_C^2}}{1 + \frac{1}{I} \cdot \left[I_C^2 + 2I_C \cdot \sqrt{I^2-I_C^2} \cdot \tan \left\{ \frac{\omega t}{2} \right\} + (I^2-I_C^2) \cdot \tan^2 \left\{ \frac{\omega t}{2} \right\} \right]} \cdot \frac{1}{I \cdot \cos^2 \left\{ \frac{\omega t}{2} \right\}} = \\ &= \frac{\omega \cdot \sqrt{I^2-I_C^2}}{I + \frac{I_C^2}{I} \cdot \left\{ \cos^2 \left\{ \frac{\omega t}{2} \right\} - \sin^2 \left\{ \frac{\omega t}{2} \right\} \right\} + \frac{I_C}{I} \sqrt{I^2-I_C^2} \sin \omega t} = \\ &= \frac{\omega \cdot \sqrt{I^2-I_C^2}}{I + \frac{I_C^2}{I} \cdot \cos \omega t + \frac{I_C}{I} \sqrt{I^2-I_C^2} \sin \omega t} = \\ &= \frac{\omega \cdot \sqrt{I^2-I_C^2}}{I + I_C \cos(\omega t - \mathcal{G})} = \frac{2e}{\hbar} R_n \cdot \frac{I^2 - I_C^2}{I + I_C \cdot \cos(\omega t - \mathcal{G})}, \end{aligned}$$

где $\mathcal{G} = \arctan \left\{ \frac{\sqrt{I^2-I_C^2}}{I_C} \right\}$.

Напомним, что мы рассматриваем нестационарный эффект Джозефсона, поэтому вопрос о положительности величины выражения $I-I_C$ здесь не возникает. Подставляем получившееся выражение в основное джозефсоновское соотношение (241) и получаем:

$$V(t) = R_n \frac{I^2 - I_C^2}{I + I_C \cos(\omega t - \varphi)}, \quad \omega = \frac{2e}{\hbar} R_n \sqrt{I^2 - I_C^2}. \quad (246)$$

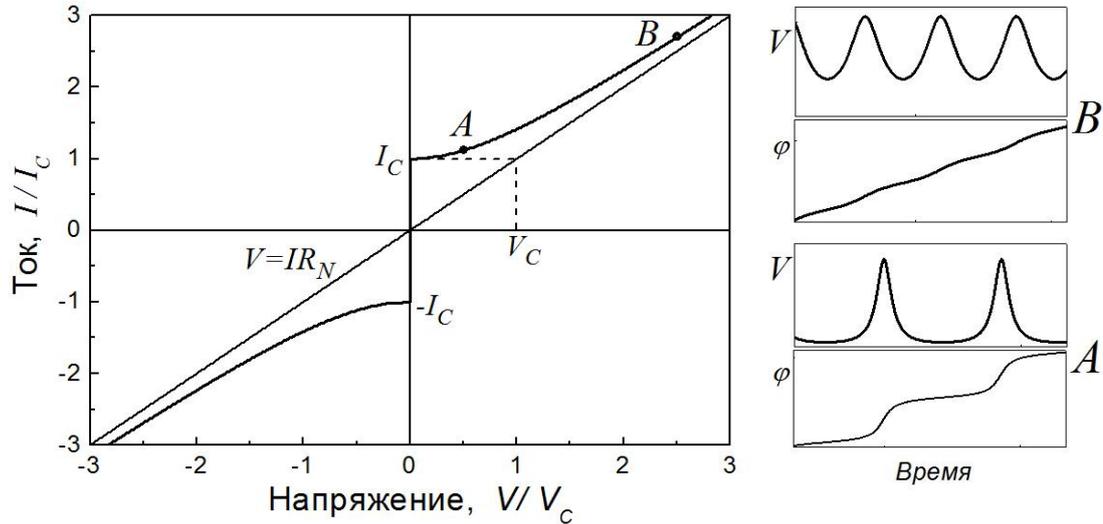


Рисунок 40 — Вольт-амперная характеристика (ВАХ) джозефсоновского перехода с малой емкостью в рамках резистивной модели (RSJ) и схема изменения фазы и напряжения в различных точках этой характеристики

Задача 8.2 Найти вид вольт-амперной характеристики джозефсоновского контакта в рамках резистивной модели.

Чрезвычайно важной (и вместе с тем наиболее легко измеряемой) характеристикой джозефсоновского элемента является его вольт-амперная характеристика (ВАХ) – зависимость среднего напряжения на джозефсоновском элементе \bar{V} от задаваемого через него тока I . Эта характеристика отражает внутреннюю динамику джозефсоновского перехода, непосредственное наблюдение которой крайне затруднено из-за очень высокой частоты джозефсоновской генерации: характерная джозефсоновская частота, соответствующая постоянной составляющей напряжения на джозефсоновском элементе, равной характерному напряжению $V_C \equiv I_C R_n$ (характерная частота здесь и далее есть $\omega_C = \frac{2e}{\hbar} V_C$), находится в диапазоне десятков и сотен гигагерц. ВАХ джозефсоновского элемента состоит из «сверхпроводящей» или «S – ветви», для которой $\bar{V} = 0$, и двух «резистивных» или «R – ветвей», где $\bar{V} \neq 0$. В отсутствие емкости из выражения (246) в задаче 8.1 сразу следует, что R-ветви представляют собой в резистивной модели ветви гиперболы:

$$\bar{V} / V_C = \text{sign}(I) \cdot \sqrt{(I / I_C)^2 - 1}, \quad |I| > I_C.$$

При $\bar{V} \rightarrow 0$ характер осцилляций напряжения имеет ярко выраженный импульсный вид, а по мере увеличения частоты джозефсоновской генерации ее форма приближается к синусоидальной при неизменной амплитуде осцилляций.

Учет конечной емкости джозефсоновского перехода, относительное влияние которой характеризуется параметром Стьюарта – МакКамбера $\beta = (2e / \hbar) I_C R_n^2 C$, приводит к неоднозначной, гистерезисной, ВАХ, что проиллюстрировано на приведенных на рисунке результатах численного моделирования. По мере увеличения β увеличивается диапазон токов $I < I_C$, в котором возможны два устойчивых состояния: сверхпроводящее и резистивное. Кроме того, шунтирующее действие емкости обуславливает монотонное уменьшение амплитуды осцилляций напряжения по мере увеличения частоты джозефсоновской генерации.

В случае туннельного джозефсоновского перехода его ВАХ, подробно разобранный в рамках решения задач 7.6 и 7.7, характеризуется двумя основными особенностями: (1) «глубоким» гистерезисом вследствие больших значений емкости C и (2) специфической формой резистивной ветви, вследствие особенностей в условиях туннелирования квазичастиц (нормальных электронов) в такой структуре из-за специфики энергетического спектра сверхпроводников.

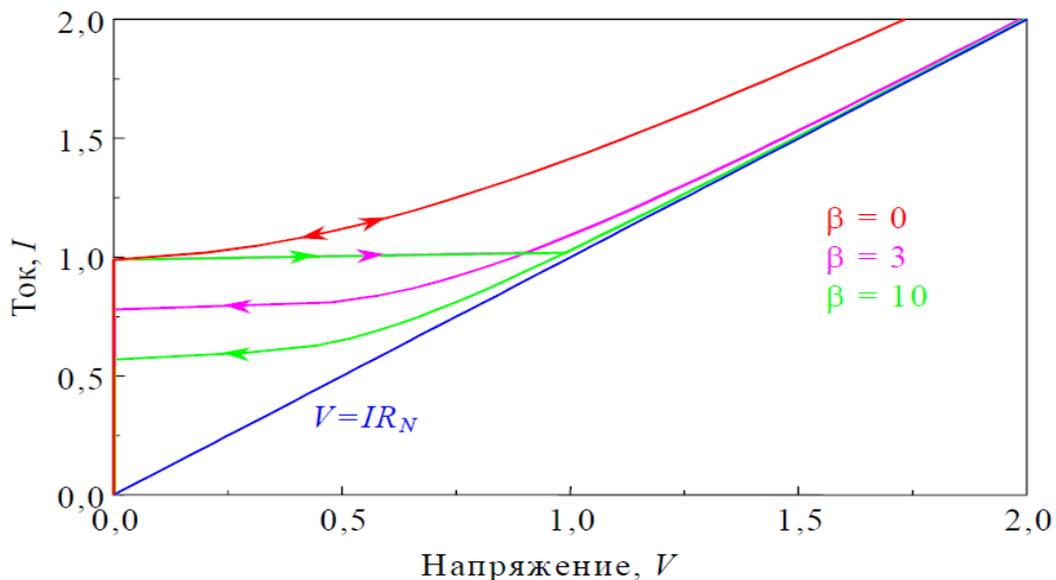


Рисунок 41 — Семейство ВАХ джозефсоновских переходов в рамках резистивной модели с емкостью (RCSJ) для различных значениях параметра Стьюарта-МакКамбера β . По осям отложены нормированные на характерные величины значения тока и напряжения (см. Корнев, Шмидт).

Задача 8.3 Найти механический аналог джозефсоновского контакта, токовый транспорт через который описывается резистивной моделью, и проанализировать динамику такой системы.

«Потенциальной энергией» рассматриваемой системы можно считать джозефсоновскую энергию контакта, которую определяют как энергию, запасаемую в переходе при увеличении тока через слабую связь от нуля до величины I_C за время t :

$$E_J = \int_0^t I_S V dt. \quad (247)$$

В этой формуле V – напряжение, возникающее на переходе в процессе нарастания тока согласно общему уравнению для нестационарного эффекта Джозефсона. Подставляя сюда также выражение для I_S в виде $I_S = I_C \sin \varphi$ и переходя от интегрирования по времени к интегрированию по фазе, получим (см. также верхнюю кривую на прилагаемом рисунке):

$$E_J = E_C(1 - \cos \varphi), \quad (248)$$

где E_C – характерная джозефсоновская энергия перехода, определяемая следующим образом:

$$E_C = \hbar I_C / 2e. \quad (249)$$

Отметим крайне важное для нас совпадение с точностью до обозначений этого выражения для джозефсоновской энергии с результатами, полученными в рамках решения **задач 7.7 и 7.9**.

Уравнением движения для рассматриваемой системы будет выступать уравнение (RSJ) при замене в полном соответствии с соотношениями (241) нормированного напряжения на берегах контакта на первую производную джозефсоновской фазы:

$$\frac{\hbar C}{2e} \ddot{\varphi} + \frac{\hbar R}{2e} \dot{\varphi} + I_C \sin \varphi = I \quad (250)$$

Обе части последнего уравнения можно разделить на величину критического тока, и, после введения нормированного на характерную частоту ω_C времени, получим наиболее удобную для численного анализа запись «уравнения движения» для джозефсоновского контакта, через который задан безразмерный ток i :

$$\beta \ddot{\varphi} + \dot{\varphi} + \sin \varphi = i$$

Для анализа поведения системы часто удобнее перейти к «энергетическому описанию» её динамики:

$$0 = M \ddot{\varphi} + r \dot{\varphi} + E_C \left(\sin \varphi - \frac{I}{I_C} \right), \quad (251)$$

где $M = \left(\frac{\hbar}{2e} \right)^2 C = \frac{\hbar^2}{2E_C} = \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \right)^2 C$ и $r = \left(\frac{\hbar}{2e} \right)^2 \frac{1}{R_n}$. Уравнение (251) с математической точки

зрения выглядит как хорошо известное уравнение колебаний для физического маятника с

учетом трения, причем джозефсоновская фаза, φ , соответствует углу отклонения маятника от положения устойчивого равновесия. Наличие емкости, обеспечивающей запас электрической энергии, пропорциональный квадрату скорости изменения джозефсоновской фазы, обуславливает «инерционное» поведение системы. Эффективный коэффициент затухания $r(R)$ зависит от температуры, напряжения на контакте и типа слабой связи.

Полученное выражение можно интерпретировать, как уравнение для изменения «координаты» частицы массы M , движущейся в потенциале $U(\varphi)$:

$$U(\varphi) = E_J \left[(1 - \cos \varphi) - \frac{I}{I_C} \varphi \right]. \quad (252)$$

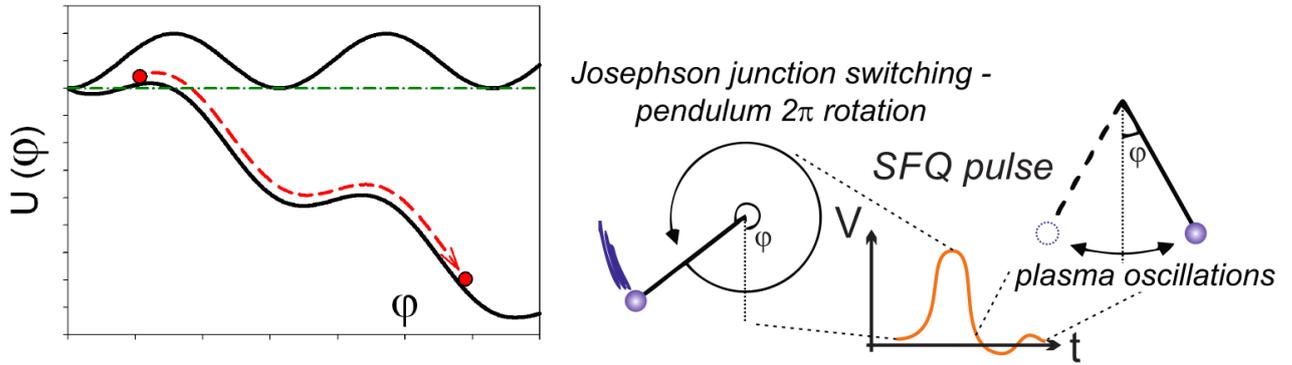


Рисунок 42 — Эффективная потенциальная энергия джозефсоновского контакта и его механический аналог.

Когда мы пропускаем через джозефсоновский контакт ток, величина которого меньше критической, эволюцию джозефсоновской фазы φ можно описать как затухающие колебания вблизи одного из локальных минимумов потенциальной энергии. Для появления напряжения на джозефсоновском контакте (перехода в так называемое «резистивное состояние») необходимо, чтобы суммарный ток (вынуждающий крутящий момент в механической аналогии) превышал значение критического тока $I > I_C$. Если величина вынуждающего момента велика, то есть выполняется условие $I \gg I_C$, поведение джозефсоновской фазы φ легко может быть получено из уравнения (251), так как в этом случае можно пренебречь осциллирующим слагаемым. Если в начальный момент времени $\varphi(0) = 0$, $\dot{\varphi}(0) = 0$, то

$$\varphi(t) \approx \omega \left[t + \frac{M}{r} \left(e^{-rt/M} - 1 \right) \right], \quad (253)$$

где $\omega = \frac{E_C I}{r I_C}$. По истечении длительного времени $\varphi(t)$ меняется по закону

$$\varphi(t) \approx \omega \left[t - \frac{M}{r} \right]. \quad (254)$$

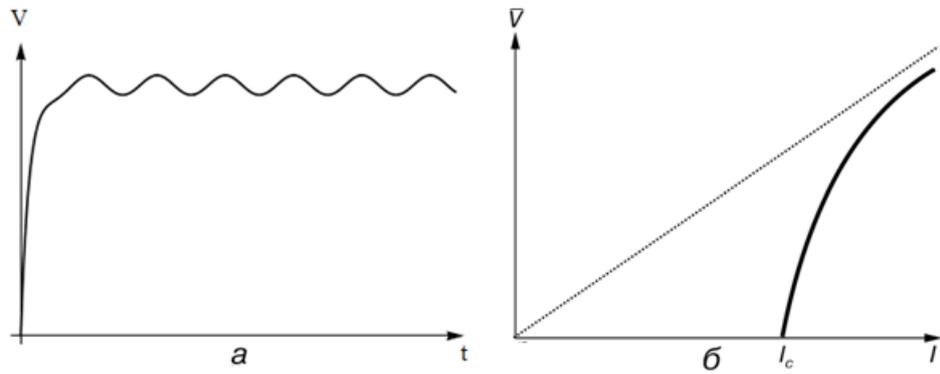


Рисунок 43 — Зависимость $V(t)$ для автономного джозефсоновского контакта при $I \gg I_c$ (слева) и среднее значение напряжения $\bar{V}(I)$ при различных значениях тока I (справа).

Для нахождения более точного решения подставим выражение (254) в (251) в качестве аргумента осциллирующего слагаемого:

$$M\ddot{\varphi} + r\dot{\varphi} + E_C \left(\sin \left(\omega t - \frac{\omega M}{r} \right) - \frac{I}{I_c} \right) = 0 \quad (255)$$

Тогда, используя прежние начальные условия, джозефсоновское соотношение и (254), для напряжения V на контакте находим:

$$V(t) \approx \frac{\hbar\omega}{2e} \left(1 - e^{-r/M} \right) + \frac{\hbar}{2e} \frac{E_C\omega}{(M\omega)^2 + r^2} \left[M \cos \left(\omega t - \frac{M\omega}{r} \right) - \frac{r}{\omega} \sin \left(\omega t - \frac{M\omega}{r} \right) \right] \quad (256)$$

На больших временах t :

$$V(t) \approx \frac{\hbar\omega}{2e} + \frac{\hbar}{2e} \frac{E_C\omega}{(M\omega)^2 + r^2} \left[M \cos \left(\omega t - \frac{M\omega}{r} \right) - \frac{r}{\omega} \sin \left(\omega t - \frac{M\omega}{r} \right) \right] \quad (257)$$

что позволяет при усреднении относительно легко получить выражение для R-ветви вольт-амперной характеристики.

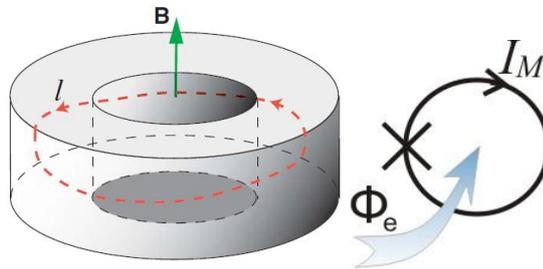


Рисунок 44 — Сверхпроводящее кольцо и дноконтактный квантовый интерферометр в магнитном поле.

Задача 8.4 Как зависит фаза джозефсоновского контакта, включенного в сверхпроводящее кольцо от величины приложенного к такой системе внешнего магнитного потока?

Для начала отметим, что выражение для плотности потока вероятности для произвольного состояния частицы $\Psi = |\Psi| \cdot e^{i\chi}$, приведенное в начале **Главы 7**, в присутствии ненулевого вектор-потенциала не является градиентно инвариантным. Устранить указанную проблему можно, если переопределить плотности потока вероятности (а также и тока, переносимого квантовой частицей с эффективным зарядом \tilde{e}) следующим образом:

$$\vec{J}_e = \frac{\hbar e}{m} |\Psi|^2 \left(\vec{\nabla} \chi - \left(\frac{\tilde{e}}{\hbar c} \right) \vec{A} \right).$$

При анализе сверхпроводящего кольца необходимо учитывать, что для любого замкнутого контура внутри него, лежащего в области, где нет токов и полей, должно выполняться следующее условие: $\oint_C \vec{\nabla} \chi d\vec{l} = \frac{\tilde{e}}{c\hbar} \oint_C \vec{A} d\vec{l}$. В силу однозначности волной функции, приращение ее фазы на таком пути равно $2\pi n$, что, среди прочего, ведет к эффекту квантования магнитного потока, заключенного «внутри» рассматриваемого неодносвязного сверхпроводника:

$$\Phi_n = n \frac{2\pi\hbar}{\tilde{e}} \text{ (в системе СИ).}$$

Экспериментальные исследования этого явления позволили измерить величину «кванта магнитного потока» и определить величину эффективного заряда носителей сверхтока.

Принципиально новые эффекты возникают, когда мы замыкаем электроды джозефсоновского перехода сверхпроводящей цепью (или же разрываем сверхпроводящее кольцо слабой связью). Простейшей системой такого рода и является описанный в задаче *одноконтактный сверхпроводящий квантовый интерферометр*.

Учтем, что напряжение на джозефсоновском переходе в одноконтактном интерферометре может появиться только в результате изменения во времени потока Φ магнитного поля через кольцо:

$$V = d\Phi / dt. \tag{258}$$

Подставляя теперь V из этой формулы в джозефсоновское соотношение (241) и интегрируя затем его по времени, получим фундаментальное соотношение, справедливое для любого сверхпроводящего кольца:

$$\varphi = 2\pi\Phi / \Phi_0, \tag{259}$$

где $\Phi_0 = h/2e \approx 2,07 \cdot 10^{-15}$ Вб – квант магнитного потока.

Таким образом, джозефсоновская фаза φ оказывается жестко связанной с потоком магнитного поля через сверхпроводящее кольцо. Это замечательное явление является частным случаем проявления *макроскопической квантовой интерференции в сверхпроводниках*. Видно,

что при этом сверхток $I_C \sin \varphi$ становится периодической функцией потока магнитного поля Φ с периодом Φ_0 , что допускает удобный способ наблюдения макроскопической интерференции.

Далее необходимо учесть, что в поток Φ дает вклад не только поле внешних источников (Φ_e), но и ток I через кольцо. Пусть L – индуктивность кольца, тогда, учитывая правило Ленца для направления тока, поток Φ через интерферометр равен

$$\Phi = \Phi_e - LI. \quad (260)$$

Это уравнение, с учетом формулы (259), удобно переписать в виде

$$\varphi = \varphi_e - il, \quad (261)$$

где $i = I / I_C$, $\varphi_e \equiv 2\pi \cdot \Phi_e / \Phi_0$ – формально введенная «внешняя фаза», $l \equiv 2\pi LI_c / \Phi_0 = L / L_c$ – основной «геометрический» параметр интерферометра, который называют *безразмерной индуктивностью*, $L_c = \frac{\Phi_0}{2\pi I_C}$ – так называемая характерная индуктивность джозефсоновского перехода.

В стационарном состоянии, когда ток через джозефсоновский элемент дается выражением (ТФЗ), получаем следующее уравнение интерферометра

$$\varphi + l \cdot \sin \varphi = \varphi_e, \quad (262)$$

которое определяет связь между полным и внешним потоками магнитного поля через кольцо интерферометра. При $l \ll 1$ зависимость $\varphi(\varphi_e)$ почти линейна: $\varphi \approx \varphi_e$. При увеличении параметра l связь φ и φ_e все более отклоняется от линейной, и при $l > 1$ становится неоднозначной. Наконец, при $l \gg 1$ система имеет примерно $N \approx l / \pi$ устойчивых стационарных состояний, в которых значения потока близки к $n\Phi_0$. Мы пришли, таким образом, к эффекту квантования магнитного потока. Если бы сверхпроводящее кольцо было сплошным, то фаза φ должна была бы точно равняться нулю или $2\pi n$ (так как φ есть разность фаз сверхпроводящего конденсата в практически совпадающих точках), и тогда следовало бы точное равенство магнитного потока Φ целому числу квантов. В случае кольца с джозефсоновским переходом значения φ могут быть отличными от нуля или $2\pi n$, и поэтому квантование потока только приближенное.

В силу так называемого *эффекта Мейсснера* стенки сверхпроводящего кольца не могут пропускать через себя силовые линии магнитного поля. Поэтому число квантов потока n в сплошном кольце остается «замороженным». Если теперь изменить внешнее поле, то это возбудит незатухающий ток в кольце $\Delta I = \Delta \Phi_e / L$, как раз такой, чтобы полный поток оставался равным целому числу квантов. Если же в кольцо включен джозефсоновский переход

с конечным критическим током, то при $|I| > I_C$ джозефсоновский элемент переходит в резистивное состояние, и в кольцо через него врывается один или несколько квантов Φ_0 . Разница между Φ и Φ_e при этом снижается, значение тока падает ниже критического значения, и джозефсоновский элемент возвращается в сверхпроводящее состояние, что приводит к замораживанию нового целого числа квантов потока. Проникновение в интерферометр кванта магнитного потока через джозефсоновский переход сопровождается генерацией на нем короткого одноквантового импульса напряжения с «площадью»

$$\int V dt = \Phi_0. \quad (263)$$

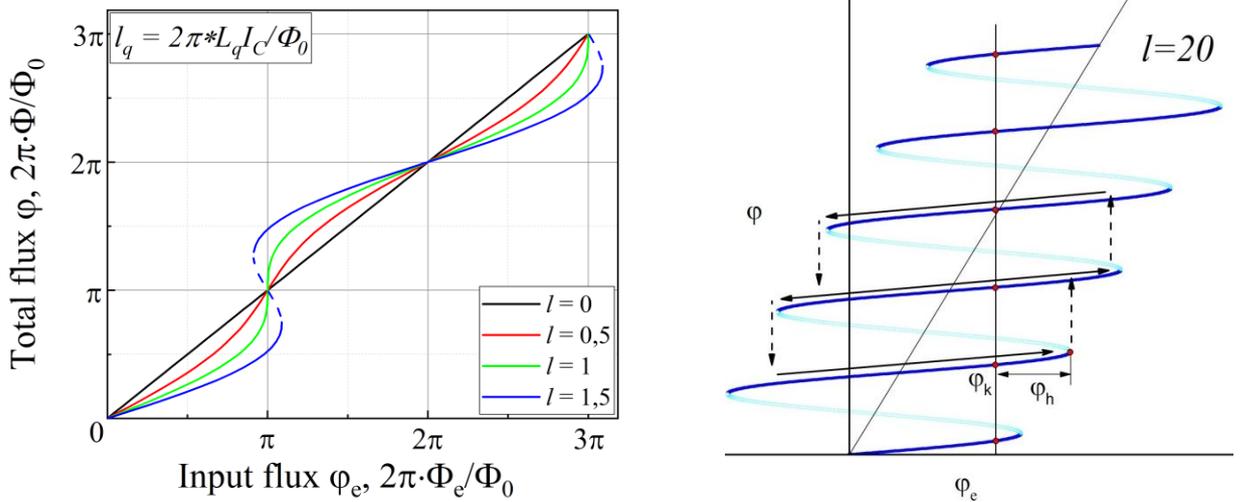


Рисунок 45 — Зависимость полного магнитного потока от потока внешнего магнитного поля в одноконтактном интерферометре $\varphi(\varphi_e)$ для различных значений индуктивности. Штриховыми линиями показаны неустойчивые ветви диаграммы. Расчеты выполнены в рамках резистивной модели джозефсоновских контактов при помощи программного комплекса PSCAN.

Устойчивые ветви неоднозначной зависимости (262) можно определить из анализа общей энергии одноконтактного интерферометра, которая складывается из джозефсоновской части и индуктивной $U(\varphi) = E_J + T$. Энергия, запасенная в джозефсоновском контакте, была вычислена при решении задачи 8.3. Индуктивное слагаемое имеет вид:

$$T = LI^2 / 2 = LI_C^2 / 2 \cdot \frac{(\varphi - \varphi_e)^2}{l^2} = E_C \frac{(\varphi - \varphi_e)^2}{2l}.$$

При $l < 1$ зависимость $U(\varphi)$ имеет один минимум (убедитесь в этом сами), соответствующий единственному устойчивому состоянию, определяемому из решения уравнения (262). Для индуктивности большей единицы функция $U(\varphi)$ может иметь несколько локальных минимумов и максимумов, причем условие для определения минимума имеет вид:

$$k = d^2 U / d\varphi^2 = E_0 (\cos \varphi + 1/l) > 0.$$

Задача 8.5 На основании резистивной модели и правила Кирхгофа вывести уравнения движения для джозефсоновских фаз двух контактов, включенных в сверхпроводящее кольцо.

Будем рассматривать *симметричный двухконтактный сверхпроводящий квантовый интерферометр*: джозефсоновские переходы J_1 и J_2 одинаковы, т.е. имеют одинаковый критический ток I_C , а также все прочие характеристики; также будем для простоты считать, что емкости контактов пренебрежимо малы (параметр Стюарта-МакКамбера $\beta = (2e/\hbar)I_C R_n^2 C \ll 1$), в нормированных величинах произведение $I_C R_n$ равны единице (R_n – нормальное сопротивление контактов).

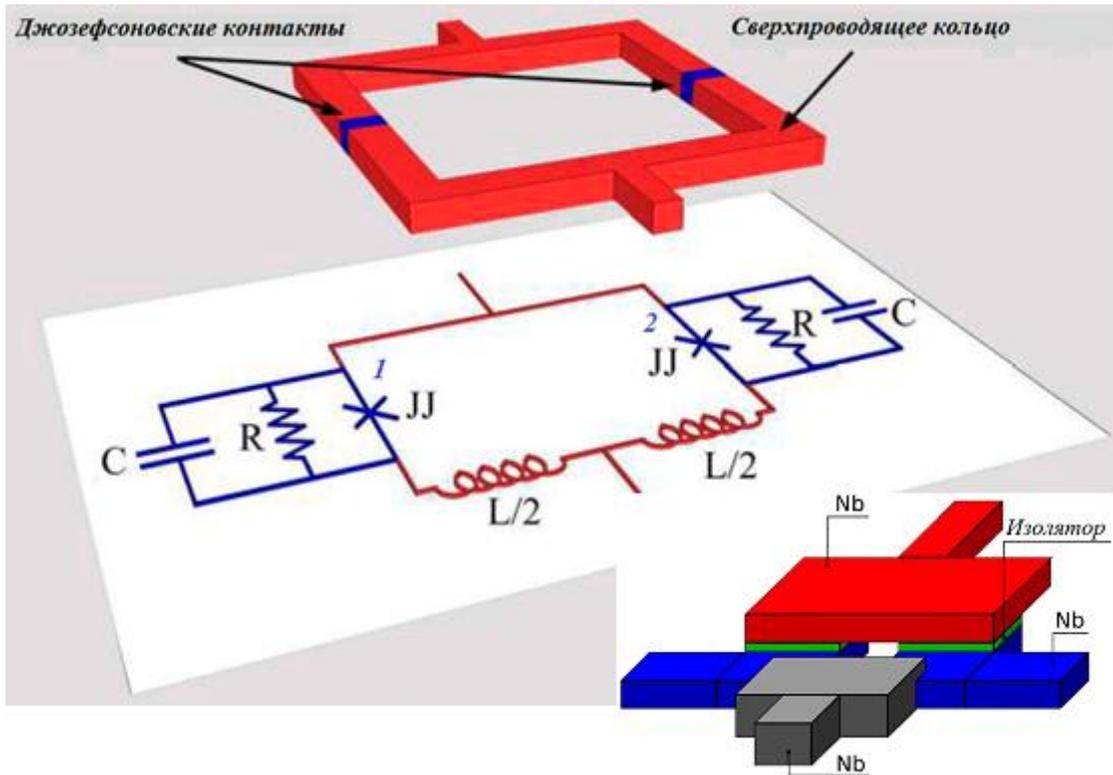


Рисунок 46 — Схема двухконтактного сверхпроводящего квантового интерферометра с указанием всех ключевых элементов и этапов изготовления.

Запишем правило Кирхгофа для токов, нормированных на величину I_C , следующим образом, учитывая среди прочих и «втекающий» в систему ток питания I_B :

$$\begin{cases} i_B = i_1 + i_2 \\ i_1 = \dot{\varphi}_1 + \sin \varphi_1 \\ i_2 = \dot{\varphi}_2 + \sin \varphi_2 \end{cases},$$

где второе и третье уравнения системы – токи через джозефсоновские контакты, записанные в рамках резистивной модели и нормированные на величину критического тока.

Явление макроскопической квантовой интерференции для двухконтактного интерферометра дает выражение вида:

$$\varphi_1 - \varphi_2 = 2\pi\Phi/\Phi_0, \tag{264}$$

где φ_1 и φ_2 – джозефсоновские фазы переходов интерферометра. Мы считаем, что фазы переходов имеют одинаковый знак, если токи через джозефсоновские переходы имеют одинаковое направление. Для получения замкнутой системы уравнений интерферометра нужно учесть, что полный поток Φ складывается в общем случае из внешнего потока Φ_e и потока самоиндукции. Однонаправленные токи через джозефсоновские переходы I_1, I_2 дают вклады в этот поток самоиндукции с разными знаками, поэтому выражение для нормированного на Φ_0 полного потока через интерферометр имеет вид:

$$\varphi = \varphi_1 - \varphi_2 = \varphi_e - l_1 i_1 + l_2 i_2, \quad (265)$$

где $\varphi_e = 2\pi \frac{\Phi_e}{\Phi_0}$ – нормированный внешний магнитный поток через интерферометр, $i_{1,2} = I_{1,2} / I_C$,

а $l_{1,2}$ – нормированные индуктивности плеч интерферометра $L_{1,2}$, вычисляемые по формуле:

$$l_{1,2} = 2\pi \frac{L_{1,2} I_0}{\Phi_0}.$$

Далее удобно ввести суммарную и разностную фазы θ и ψ :

$$\begin{aligned} i_B &= i_1 + i_2 = \dot{\varphi}_1 + \dot{\varphi}_2 + \sin \varphi_1 + \sin \varphi_2, \\ \frac{(\dot{\varphi}_1 + \dot{\varphi}_2)}{2} &= \frac{i_B}{2} - \sin \left(\frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2} \right) \cos \left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2} \right), \\ \dot{\theta} &= i_B / 2 - \sin \theta \cos \psi. \end{aligned}$$

Теперь запишем еще одно соотношение, учитывая, как и в задаче 8.4, существование внешнего магнитного потока и макроскопической квантовой интерференции:

$$\varphi_1 - \varphi_2 + \frac{l}{2}(i_1 - i_2) = -2\varphi_e,$$

(если брать аналогию с электричеством, то мы записываем баланс напряжений в контуре, роль которых в данном случае играют фазы параметра порядка) отсюда

$$\begin{aligned} i_1 - i_2 &= \frac{2}{l} [-2\varphi_e - (\varphi_1 - \varphi_2)] = \dot{\varphi}_1 - \dot{\varphi}_2 + \sin \varphi_1 - \sin \varphi_2 = \\ &= 2\dot{\psi} + 2 \sin \psi \cos \theta = -\frac{2}{l} (\varphi_e + \psi) \cdot 2. \end{aligned}$$

Откуда получаем второе уравнение для двухконтактного интерферометра

$$\dot{\psi} = -\frac{2}{l} (u + \psi) - \sin \psi \cos \theta.$$

Задача 8.6 Определить величину максимального бездиссипативного тока через двухконтактный сверхпроводящий квантовый интерферометр как функцию внешнего магнитного потока.

Внешнее воздействие на рассматриваемую систему характеризуется двумя параметрами: внешним потоком Φ_e и током питания интерферометра I_B (также называемым и транспортным током), причем при сделанном в предыдущей задаче выборе положительных направлений токов через переходы:

$$I_B = I_1 + I_2 = I_{C1} \sin \varphi_1 + I_{C2} \sin \varphi_2 = 0, \quad (266)$$

где $I_{C1,2}$ – критические токи переходов. Изменение этих параметров может привести как к переходам между двумя стационарными состояниями интерферометра ($\dot{\varphi}_1 = \dot{\varphi}_2 = 0$, $V_{1,2} = 0$), так и к выходу джозефсоновской системы в резистивное состояние и появлению на джозефсоновских контактах отличного от нуля напряжения.

Поэтому, рассматривая I_B как главную переменную, а Φ_e как параметр, можно поставить задачу о нахождении эффективного *максимального (критического) транспортного тока интерферометра* $I_{max}(\Phi_e)$, соответствующего переключению интерферометра в резистивное состояние. Для прояснения физической картины отметим, что во внешнем магнитном поле по кольцу интерферометра будет протекать круговой экранирующий ток, который в одном из джозефсоновских переходов будет складываться с транспортным током, «помогая» возникновению в системе резистивного состояния. Величина I_{max} является Φ_0 -периодичной функцией внешнего потока Φ_e (или же 2π -периодичной функцией нормированного внешнего потока Φ_e). Это видно из того, что замена $\varphi_e \rightarrow \varphi_e + 2\pi$, $\varphi_1 \rightarrow \varphi_1 + 2\pi$ не меняет вид уравнений интерферометра. Этот факт и служит основанием того, что величину Φ_0 можно назвать *квантом магнитного потока*.

Если индуктивность интерферометра пренебрежимо мала ($l_{1,2} \ll 1$), то можно исключить из рассмотрения слагаемые, отвечающие за вклад самоиндукции в магнитный поток через интерферометр

Для симметричного интерферометра ($I_{C1} = I_{C2} = I_C$) можно, выразив, например, величину φ_1 через φ_2 и φ_e и подставив ее в формулу (266), с помощью тригонометрического соотношения

$$\sin \varphi_1 + \sin \varphi_2 = 2 \sin \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2} \cos \frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}$$

получить следующее выражение для транспортного тока через интерферометр:

$$I_B = 2I_C \sin \left(\frac{\varphi_e}{2} + \varphi_2 \right) \cos \left(\frac{\varphi_e}{2} \right). \quad (267)$$

При фиксированном внешнем магнитном потоке Φ_e единственным параметром, подстраиваемым под заданный транспортный ток I_b , является фаза φ_2 одного из переходов. Тогда максимальный бездиссипативный ток через интерферометр

$$I_{\max} = 2I_C |\cos(\pi\Phi_e / \Phi_0)|. \quad (268)$$

При большой величине индуктивности интерферометра ($l_{1,2} \gg 1$) зависимость $I_{\max}(\Phi_e)$ есть ломаная, близко прилегающая снизу к прямой $I_{\max} = I_1 + I_2$ и касающаяся ее на каждом Φ_0 -периоде. В области конечных значений индуктивности l при переходе от случая $l_{1,2} \ll 1$ к случаю $l_{1,2} \gg 1$ модуляция максимального транспортного тока внешним полем постепенно уменьшается. Максимальный бездиссипативный ток I_{\max} можно назвать критическим током интерферометра. ВАХ двухконтактного интерферометра по своему виду близка к ВАХ его джозефсоновских переходов, однако отличается наклоном асимптоты ($I = V/R$, где $R^{-1} = R_{n1}^{-1} + R_{n2}^{-1}$), а также тем, что критический ток интерферометра есть не постоянная величина, а периодическая функция внешнего магнитного потока Φ_e .

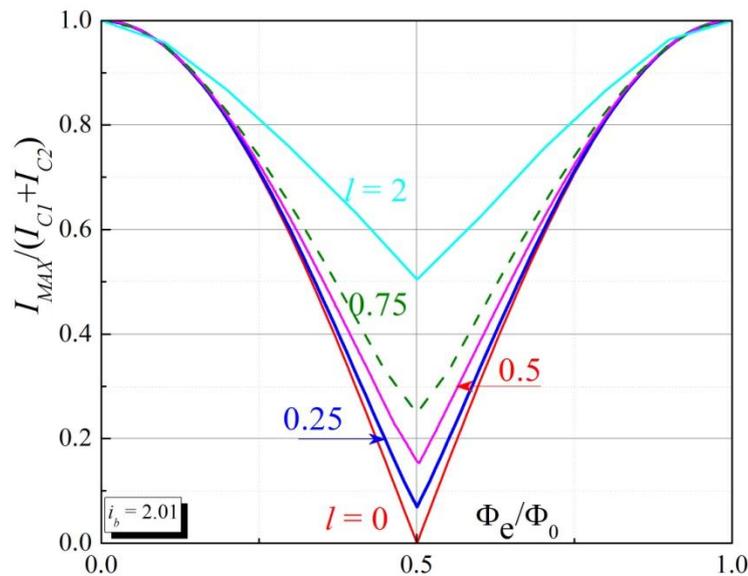


Рисунок 47 — Зависимость критического тока двухконтактного интерферометра от внешнего магнитного потока при разных значениях индуктивности. Нижняя кривая соответствует случаю $l_{1,2} \ll 1$. Остальные кривые иллюстрируют влияние конечных величин индуктивности на

зависимость $I_{\max}(\Phi_e)$.

Поэтому при изменении Φ_e имеет место также периодическая модуляция всей ВАХ. Если зафиксировать ток через двухконтактный интерферометр на значении, близком к критическому току интерферометра: $I_b \geq (I_C)_{\max}$, то среднее напряжение \bar{V} на интерферометре будет периодически изменяться по мере роста (убывания) внешнего магнитного потока, т.е. будет

иметь место преобразование магнитного потока в напряжение: $\Phi_e \rightarrow \bar{V}$. Именно на использовании этого преобразования основан принцип работы так называемого СКВИД-магнитометра постоянного тока (от английского SQUID: Superconducting Quantum Interference Device), принципиальная схема которого представлена на рисунке. Зависимость $\bar{V}(\Phi_e)$ называется сигнальной характеристикой двухконтактного интерферометра или откликом напряжения интерферометра на внешний магнитный поток. Размах и крутизна отклика определяют характеристики СКВИД-усилителя.

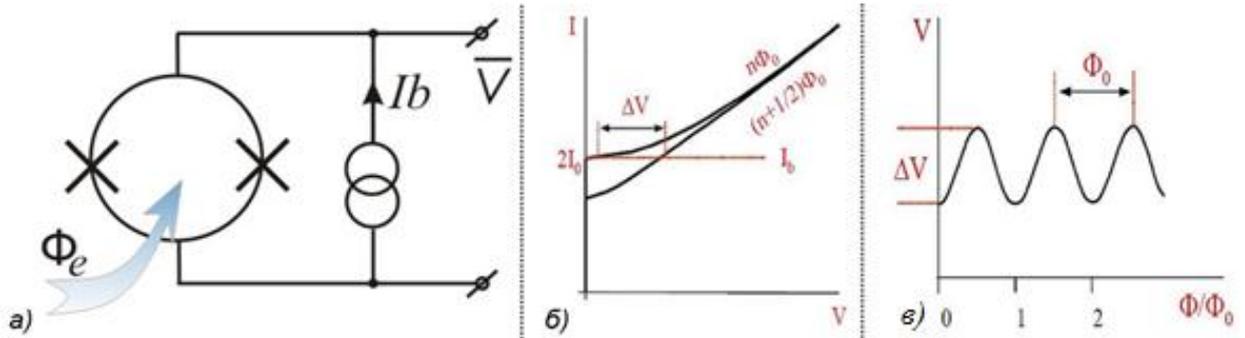


Рисунок 48 — Схема «снятия» отклика с двухконтактного интерферометра (а), изменение ВАХ при изменении внешнего магнитного потока (б) и вид типичной вольт-поточковой характеристики (в). По материалам: Clarke J., Braginski A. I., 2004.

Задача 8.7 Определить вид вольт- и ток-поточкового преобразования для сверхпроводящего квантового интерферометра в рамках RSJ-модели описания джозефсоновских контактов (их параметры считать известными).

Начнем с обсуждения отклика напряжения симметричного ПТ СКВИДа с нормированной индуктивностью $l \leq 1$. В рамках модели резистивно шунтированного перехода можно записать простые уравнения для токов, текущих через джозефсоновские контакты:

$$i_{1,2} = \sin \varphi_{1,2} + \dot{\varphi}_{1,2},$$

где токи нормированы на критический ток I_C , а точка сверху означает дифференцирование по

времени $\tau = \omega_c t$, $\omega_c = \frac{2\pi I_C R_n}{\Phi_0}$ – характерная частота, R_n – шунтирующее сопротивление

переходов. Применение правил Кирхгофа позволяют записать следующую систему дифференциальных уравнений:

$$\frac{l}{2} \dot{\psi} = -(\psi + \varphi_e) - \frac{l}{2} \sin \psi \cos \theta \tag{269}$$

$$\dot{\theta} = \frac{i_b}{2} - \cos \psi \sin \theta \tag{270}$$

где $\theta = \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}$ – суммарная фаза, $i_b = \frac{I_b}{I_c}$, $i_b \geq 0$ – ток питания СКВИДа.

Поскольку индуктивность присутствует только в уравнении (269), предполагается, что она в первую очередь влияет на разностную фазу. Разностная фаза здесь рассматривается как сумма медленно меняющейся ψ_- и быстроменяющейся ψ_{\sim} компонент. Последнюю компоненту можно положить малой ($\psi_{\sim} \ll 1$) в случае шунтированных переходов и значений нормированной индуктивности $l \leq 1$. Отклик напряжения СКВИДа $\bar{v} = \omega_J$ (где ω_J – частота джозефсоновских осцилляций), нормированный на произведение $I_c R_n$, может быть найден следующим образом. Первым шагом находится решение $\omega_{J-} = \bar{\theta}$ в приближении $\psi = \psi_-$. Затем из уравнения (269) находится ψ_{\sim} с использованием найденной на предыдущем шаге θ , что в свою очередь позволяет найти поправку $\omega_{J\sim}$ к джозефсоновской частоте, и определить среднее напряжение через сумму $\omega_J = \omega_{J-} + \omega_{J\sim}$.

Решение в приближении $\psi = \psi_-$: Разностная фаза сводится к своей медленно меняющейся компоненте в пределе исчезающе малой индуктивности $l \rightarrow 0$. Уравнение (269) в этом случае дает $\psi = \psi_- = -\varphi_e$, так что хорошо известное решение (270) может быть записано в виде:

$$\tan \frac{\theta}{2} = z + \sqrt{1-z^2} \tan \frac{i_b/2 \sqrt{1-z^2}}{2}, \quad (271)$$

где $z = \frac{2}{i_b} \cos \varphi_e$. Джозефсоновская частота непосредственно определяется выражением (272)

$$\omega_{J-} = \frac{i_b}{2} \sqrt{1-z^2} = \sqrt{\left(\frac{i_b}{2}\right)^2 - \cos^2 \varphi_e}. \quad (272)$$

Уместно отметить известное соответствие выражения (272) с джозефсоновской частотой одиночного контакта $\omega_{J-} = \sqrt{i_b^2 - i_c^2}$, благодаря которому можно рассматривать $\cos \varphi_e$ в выражении (272) как эффективный критический ток, а $\frac{i_b}{2}$ как ток питания ω_{J-} должно быть приравнено к нулю для значений $\frac{i_b}{2} < |\cos \varphi_e|$.

Решение в приближении $\psi = \psi_- + \psi_{\sim}$: Подстановка разностной фазы в виде суммы $\psi = \psi_- + \psi_{\sim}$ в (269) в пределе $\psi_{\sim} \ll 1$ преобразует это уравнение к виду

$$\frac{l}{2}\dot{\psi}_{\sim} = -\psi_{\sim} - \frac{l}{2}(\sin \psi_{\sim} + \psi_{\sim} \cos \psi_{\sim}) \cos \theta. \quad (273)$$

Решение уравнения (273) имеет вид

$$\psi_{\sim} = \frac{l \cdot \sin \psi_{\sim} \cdot \left[l \cdot \left(\cos \psi_{\sim} - \frac{i_b}{2} \sin \theta \right) - 2 \cos \theta \right]}{l^2 \omega_{J-}^2 + 4}. \quad (274)$$

Подстановка этого решения в (270) дает возможность найти поправку к джозефсоновской частоте

$$\omega_J = \frac{i_b}{2} - \cos \psi_{\sim} \overline{\sin \theta} + \sin \psi_{\sim} \overline{\psi_{\sim} \sin \theta}. \quad (275)$$

Явный вид ω_J может быть найден посредством усреднения

$$\omega_J = \omega_{J-} - \frac{l^2 \omega_{J-}^2}{l^2 \omega_{J-}^2 + 4} \left(\frac{i_b}{2} - \omega_{J-} \right) \tan^2 \psi_{\sim}. \quad (276)$$

Это выражение и описывает усредненный отклик напряжения ПТ СКВИДа для случая $l \leq 1$.

Первый множитель второго слагаемого выражения (276) дает основу полагать, что уменьшение напряжения следует из фильтрующих свойств СКВИДа. Качественно это может быть проиллюстрировано на примере синхронизации джозефсоновских контактов циркулирующим током в СКВИДе при приложенном магнитном потоке равным полукванту потока $\varphi_e = \pi/2$.

Циркулирующий ток определяется как $i_{cir} = \frac{i_1 - i_2}{2}$. В соответствие с (273) в резистивном состоянии $i_{cir} = -\frac{2\psi_{\sim}}{l}$, что в сочетании с выражением (274) дает

$$i_{cir} = -\frac{4\sqrt{1 + \frac{l^2 i_b^2}{16}}}{l^2 \omega_{J-}^2 + 4} \sin \psi_{\sim} \sin \left(\theta + a \tan \left[\frac{4}{li_b} \right] \right) - \frac{l \cdot \sin 2\psi_{\sim}}{l^2 \omega_{J-}^2 + 4}. \quad (277)$$

При рассматриваемом значении магнитного потока $\psi_{\sim} = -\varphi_e = -\pi/2$ суммарная фаза и джозефсоновская частота равны соответственно $\theta = \omega_{J-} \tau$ и $\omega_{J-} = \frac{i_b}{2}$, как это следует из выражений (271), (272). Полагая что $l \ll 1$, циркулирующий ток может быть представлен в виде $i_{cir} \approx -\cos \left(\frac{i_b \tau}{2} \right)$. Это означает, что ток через каждый джозефсоновский контакт равен

$$i_{1,2} = \frac{i_b}{2} \mp \cos \left(\frac{i_b}{2} \tau \right). \quad (278)$$

Осциллирующая часть этого тока приводит к появлению так называемых *ступеней Шапиро* на ВАХ контактов. Полная ширина первой ступени равна $2J_1\left(\frac{i_{cir}^a}{\omega_{J-}}\right)$ (где $i_{cir}^a = 1$ – амплитуда циркулирующего тока в пределе $l \rightarrow 0$). Поскольку середина ступени находится примерно на невозмущенной ВАХ одиночного контакта, эта ступень начинается со значения тока $\sqrt{\left(\frac{i_b}{2}\right)^2 + 1} - J_1\left(\frac{2}{i_b}\right) \approx \frac{i_b}{2}$, которое приблизительно соответствует постоянной составляющей тока, приложенного к каждому контакту.

Для рассмотрения случая ненулевой индуктивности можно воспользоваться тем обстоятельством, что при $\varphi_e = \pi/2$ переходы синхронизованы в противофазе. Поэтому СКВИД может быть рассмотрен как линейная цепь, представляющая собой последовательное соединение двух генераторов напряжения и двух резисторов, соответствующих двум джозефсоновским контактам, и связующей индуктивности. Из выражения (278) следует, что каждый генератор производит гармоническое напряжение с нормированной амплитудой равной единице. Амплитуда тока в такой цепи в точности равна амплитуде циркулирующего тока:

$$i_{cir}^a = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{l^2 \omega_{J-}^2}{4}}}. \quad (279)$$

Уменьшение амплитуды осциллирующего тока, текущего через джозефсоновские контакты, с увеличением индуктивности приводит к уменьшению ширины первой ступени Шапиро. При фиксированном токе питания это в свою очередь приводит к уменьшению частоты осцилляций и смещению ступени Шапиро, а, следовательно, и синхронизации переходов на более низкой частоте. Это означает, что уменьшение усредненного напряжения на СКВИДе связано с фильтрацией циркулирующего тока. Переключение джозефсоновских контактов соответственно происходит на частоте, ограниченной временем -релаксации.

Возвращаясь к выражению (276) можно заметить, что для $\varphi_e = \pi/2$, когда $\tan^2 \psi_-$ равен бесконечности, конечное значение ω_J может быть определено через предел для последних двух множителей второго слагаемого

$$\lim_{\varphi_e \rightarrow \pi/2} \left(\frac{i_b}{2} - \sqrt{\left(\frac{i_b}{2}\right)^2 - \cos^2 \varphi_e} \right) \tan^2 \varphi_e \rightarrow \frac{1}{i_b}. \quad (280)$$

Поскольку $\omega_J\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{i_b}{2}$, джозефсоновская частота в этой точке равна

$$\omega_J\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{i_b}{2} \left[1 - \frac{2l^2}{l^2 i_b^2 + 16} \right]. \quad (281)$$

Следовательно, размах отклика напряжения $v_{pp} = \omega_J\left(\frac{\pi}{2}\right) - \omega_J(0)$ равен

$$v_{pp} = \frac{i_b}{2} \left[1 - \frac{2l^2}{l^2 i_b^2 + 16} \right] - \sqrt{\left(\frac{i_b}{2}\right)^2 - 1}, \quad (282)$$

где последнее слагаемое должно быть приравнено к нулю для значений $\frac{i_b}{2} < 1$.

Видно, что при увеличении тока питания обе частоты $\omega_J\left(\frac{\pi}{2}\right), \omega_J(0)$ стремятся к $\frac{i_b}{2}$.

Поскольку отклик напряжения возникает благодаря возбуждению циркулирующего тока, в этом случае он уменьшается, так как часть циркулирующего тока в общем токе, текущем через переходы, становится мала. Ввиду того, что в этом пределе переходы смещены током, сильно превышающим их критический ток, усредненное напряжение на СКВИДе соответствует падению напряжения на шунтирующих сопротивлениях контактов, соединенных параллельно.

Для тока питания, равного критическому току $i_b = 2$, амплитуда размаха отклика напряжения уменьшается с индуктивностью по закону

$$v_{pp} = 1 - \frac{l^2}{2l^2 + 8} \quad (283)$$

С увеличением индуктивности эта амплитуда стремится к $v_{pp} \rightarrow 0.5$. В то же время, в соответствие с (279), амплитуда циркулирующего тока стремится к нулю при $l \rightarrow \infty$, так что $v_{pp} \rightarrow 0$. Таким образом, представленная зависимость (283) амплитуды размаха отклика от индуктивности $v_{pp}(l)$ справедлива лишь в рамках сделанного приближения $l \leq 1$.

На рисунке 49 показаны кривые полученные с помощью представленного аналитического подхода (выражения (276), (282) – сплошные линии) и с помощью численного расчета системы (269)-(270) (точки).

Рисунок 49а показывает отклики напряжения СКВИДа со значением индуктивности $l = 1$. Видно, что кривые полученные аналитически и численно совпадают в широком диапазоне токов питания $i_b = 1.5 \dots 2.5$ вблизи критического тока СКВИДа.

Выражение (274) показывает, что амплитуда осцилляций разностной фазы пропорциональна $\psi^A \sim -\sin \varphi_e$, и, следовательно, индуктивность в основном влияет на среднюю часть отклика напряжения (вблизи полукванта потока). Увеличение индуктивности приводит к

увеличению $\psi_{\sim}^A \sim -li_{cir}^a/2$ и нарушению приближения $\psi_{\sim} \ll 1$. Это проявляется в отклонении аналитических кривых от численных на рисунке 49б при $l > 1$.

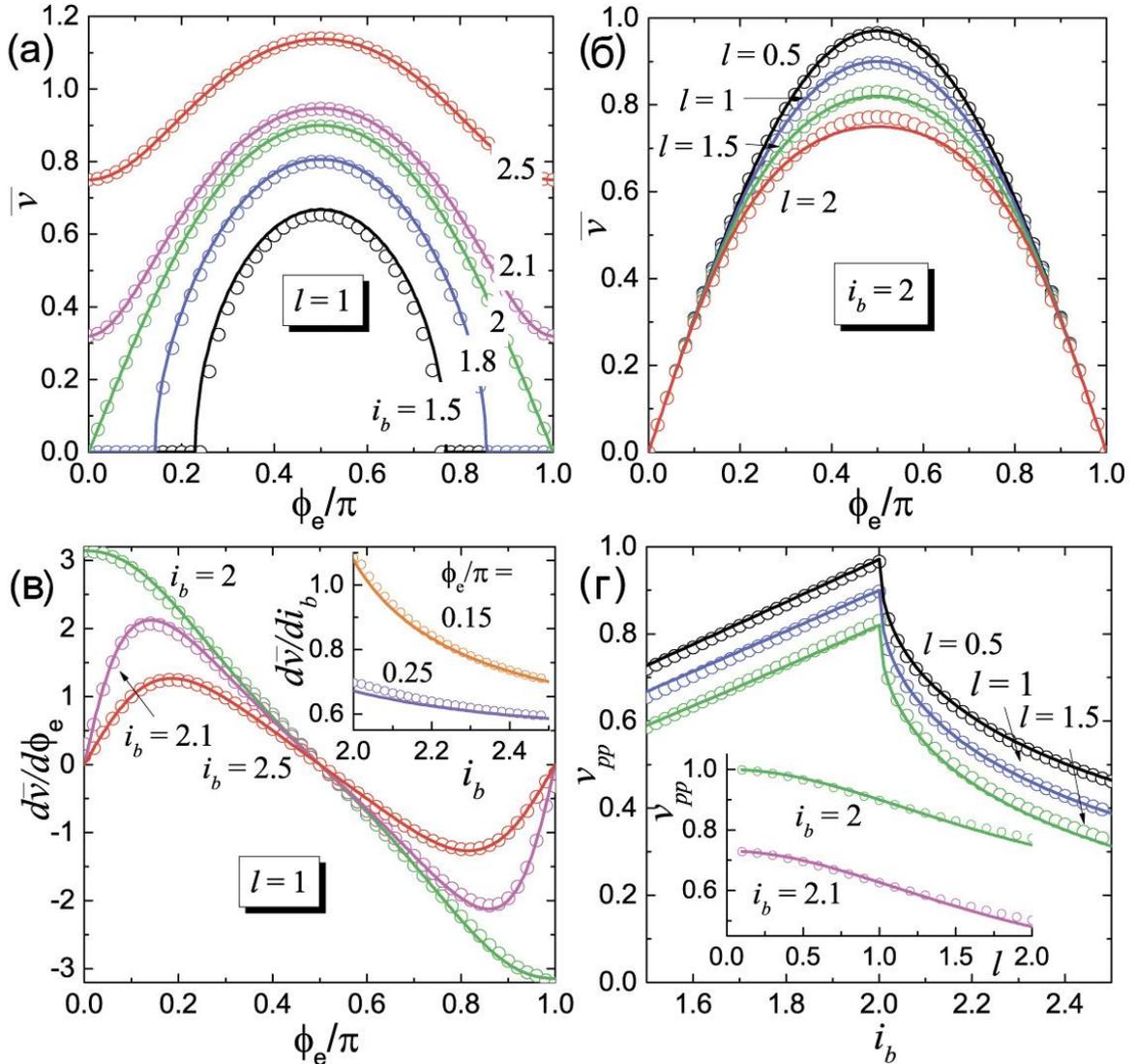


Рисунок 49 — Сравнение результатов, полученных с помощью аналитического подхода (сплошные линии) и численно (точки).

(а) Отклик напряжения СКВИДа $\bar{v}(\phi_e)$ при $l > 1$ для набора значений тока питания i_b .

(б) Отклик напряжения при $i_b = 2$ для набора значений нормированной индуктивности l .

(в) Передаточная функция СКВИДа $\frac{\partial \bar{v}}{\partial \phi_e}$ при значениях тока питания i_b ; на вставке показано

динамическое сопротивление $\frac{\partial \bar{v}}{\partial i_b}$ для значений внешнего магнитного потока ϕ_e ; $l = 1$.

(г) Амплитуда отклика напряжения v_{pp} в зависимости от тока питания при значениях индуктивности l ; на вставке показана зависимость амплитуды от индуктивности при значениях тока питания i_b .

Необходимо отметить, что выражение (276) для отклика напряжения позволяет рассчитывать производные от отклика зависимости, такие как передаточная функция $\frac{\partial \bar{v}}{\partial \varphi_e}$ или динамическое сопротивление $\frac{\partial \bar{v}}{\partial i_b}$, представленные на рисунке 49 и вставке к рисунку соответственно.

Также здесь показан размах амплитуды отклика напряжения в зависимости от тока питания и индуктивности. Из сравнения представленных данных можно сделать вывод о том, что усредненное напряжение на СКВИДе в зависимости от его параметров в рамках описанного алгоритма найдено достаточно хорошо.

В ряде случаев, например, при определении ток-фазового соотношения джозефсоновских контактов посредством асимметричного (критические токи контактов не равны друг другу!) СКВИДа, исследуемой характеристикой является максимальное значение сверхпроводящего тока, протекающего через СКВИД при определенном заданном магнитном потоке (критический ток СКВИДа). Для произвольной асимметрии критических токов джозефсоновских контактов эту зависимость можно получить следующим образом.

В сверхпроводящем состоянии производные суммарной и разностной фазы равны нулю, $\dot{\psi} = \dot{\theta} = 0$, так что система уравнений движения сводится к виду:

$$i_b = \Sigma i_c \sin \theta \cos \psi + \Delta i_c \sin \psi \cos \theta, \quad (284)$$

$$\varphi_e = \psi + \frac{l}{4} (\Sigma i_c \sin \psi \cos \theta + \Delta i_c \sin \theta \cos \psi). \quad (285)$$

Здесь $\Sigma i_c = i_{c1} + i_{c2}$, $\Delta i_c = i_{c1} - i_{c2}$.

В простейшем случае нулевой индуктивности, $l = 0$, разностная фаза равна приложенному потоку, $\psi = \varphi_e$, и уравнение (284) имеет вид:

$$i_b = \underbrace{\Sigma i_c \cos \varphi_e}_{=A} \sin \theta + \underbrace{\Delta i_c \sin \varphi_e}_{=B} \cos \theta,$$

так что с учетом введенных обозначений A, B , выражения для максимального сверхпроводящего тока, $i_{S, \max}$, и суммарной фазы при котором он достигается, $\theta_{0, \max}$, имеют простую форму:

$$i_{S, \max} = \sqrt{A^2 + B^2} = \sqrt{\Sigma i_c^2 \cos^2 \varphi_e + \Delta i_c^2 \sin^2 \varphi_e},$$

$$\theta_{0, \max} = \operatorname{sgn}(A) \cdot \left(\frac{\pi}{2} - \operatorname{sgn}(B) \cdot \left| \arctan \frac{B}{A} \right| \right).$$

Для случая малого, но конечного значения индуктивности, решение системы (284)-(285) удобно искать стандартным образом, представляя разностную фазу в виде суммы внешнего потока и малой поправки, $\psi = \varphi_e + x$, где $x \ll 1$. В этом случае уравнение (285) принимает форму:

$$0 = x + \frac{l}{4} \{ \Delta i_c \sin \theta \cos(\varphi_e + x) + \Sigma i_c \sin(\varphi_e + x) \cos \theta \},$$

так что с учетом малости x, l , выражение для поправки к разностной фазе может быть представлено в виде:

$$x \approx -\frac{l}{4} \{ \Delta i_c \sin \theta \cos \varphi_e + \Sigma i_c \sin \varphi_e \cos \theta \}.$$

Подставляя найденную разностную фазу, $\varphi_e + x$, в уравнение (284),

$$\begin{aligned} i_b \approx & \underbrace{\Sigma i_c \cos \varphi_e \cos(l \Delta i_c / 4)}_{=a} \sin \theta + \underbrace{\Delta i_c \sin \varphi_e \cos(l \Sigma i_c / 4)}_{=b} \cos \theta + \\ & + \frac{l}{8} \cdot \underbrace{(\Sigma i_c^2 \sin^2 \varphi_e - \Delta i_c^2 \cos^2 \varphi_e)}_{=c} \sin 2\theta - \frac{l}{8} \underbrace{\Sigma i_c \Delta i_c \sin 2\varphi_e \cos 2\theta}_{=d}, \end{aligned} \quad (286)$$

получим приближенное выражение для зависимости тока, протекающего через СКВИД, от суммарной фазы при выбранном потоке, $i_b(\theta; \varphi_e)$.

Максимальное значение сверхпроводящего тока, протекающего через СКВИД, будет достигаться, очевидно, между максимумами суммы первых двух слагаемых,

$$\theta_{a+b, \max} = \operatorname{sgn}(a) \cdot \left(\frac{\pi}{2} - \operatorname{sgn}(b) \cdot \left| \arctan \frac{b}{a} \right| \right), \quad (287)$$

и последних двух слагаемых,

$$\begin{aligned} \theta_{c+d, \max 1} &= \frac{1}{2} \operatorname{sgn}(c) \cdot \left(\frac{\pi}{2} - \operatorname{sgn}(d) \cdot \left| \arctan \frac{d}{c} \right| \right) \text{ или} \\ \theta_{c+d, \max 2} &= \theta_{c+d, \max 1} - \operatorname{sgn}(\theta_{c+d, \max 1}) \pi \end{aligned} \quad (288)$$

правой части (286), где в выражениях (288) необходимо выбрать максимум ближайший к $\theta_{a+b, \max}$,

$$\theta_{c+d, \max} = \begin{cases} \theta_{c+d, \max 1}, & \text{если } |\theta_{a+b, \max} - \theta_{c+d, \max 1}| < |\theta_{a+b, \max} - \theta_{c+d, \max 2}| \\ \theta_{c+d, \max 2}, & \text{в обратном случае} \end{cases}$$

(в выражении (287) мы использовали обозначения, a, b, c, d , введенные при записи выражения (286)). Максимум выражения (286) удобно искать, воспользовавшись его производной по суммарной фазе,

$$i_s'(\theta) = a \cos \theta - b \sin \theta + 2c \cos 2\theta - 2d \sin 2\theta .$$

Ноль производной соответствующий искомому максимуму можно найти посредством выражения

$$\theta_{l,\max} = \int_{z_{\min}}^{z_{\max}} H \left[\operatorname{sgn} \left(i_b' [z_{\min}] \right) i_b' (z) \right] dz + z_{\min} ,$$

где

$$[z_{\min}, z_{\max}] = \begin{cases} [\theta_{a+b,\max}, \theta_{c+d,\max}] , & \text{если } \theta_{a+b,\max} < \theta_{c+d,\max} \\ [\theta_{c+d,\max}, \theta_{a+b,\max}] & \text{в обратном случае} \end{cases} , H(z) - \text{функция Хевисайда.}$$

Подставляя найденное значение $\theta_{l,\max}$ в выражение (286) находим максимальный сверхпроводящий ток $i_{s,\max}$ для рассматриваемого случая ненулевой индуктивности.

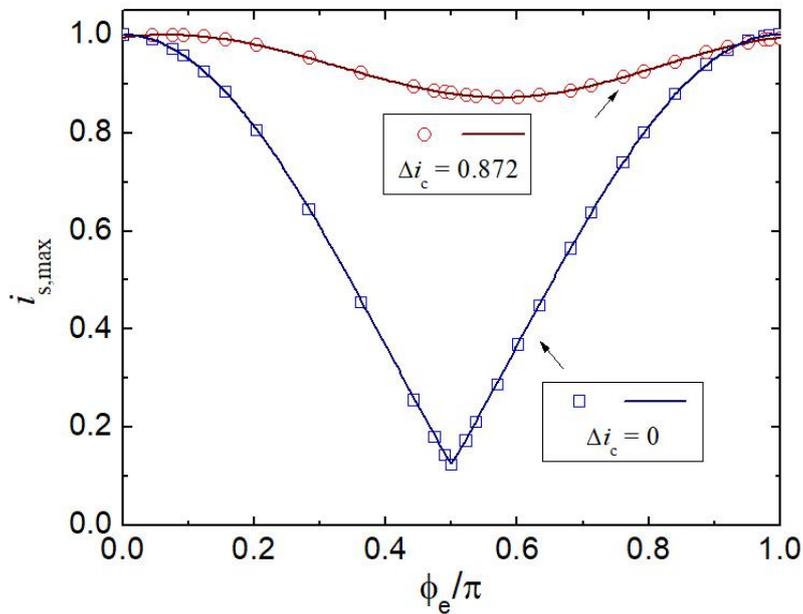


Рисунок 50 — Зависимость максимального тока от приложенного магнитного потока, рассчитанная для разных значений критических токов опорного и исследуемого контактов посредством численного моделирования системы (точки) и с помощью полученных аналитических выражений (сплошные линии).

Нормированная индуктивность СКВИДа, $l = 1$, $\Sigma i_c = 1$.

Сравнение зависимостей максимального сверхпроводящего тока, протекающего через СКВИД, от магнитного потока рассчитанных с помощью полученных выражений (сплошные линии) и путем численного моделирования поведения системы (точки) представлено на Рисунке 50. Хорошее совпадение результатов свидетельствует о возможности практического использования предложенный аналитический метод расчета, например, для определения значения индуктивности посредством подгонки экспериментальных кривых.

Устройство под названием СКВИД постоянного тока (ПТ СКВИД) включает обычно усилитель выходного сигнала, а также цепь следящей (интегрирующей) обратной связи. Последний элемент обеспечивает проникновение в кольцо интерферометра магнитного потока Φ_{FB} , компенсирующего изменение внешнего магнитного потока ($\Phi_e + \Phi_{FB} = const$). Это позволяет зафиксировать рабочую точку на участке вольт-поточковой характеристики с максимальной производной на функции преобразования магнитного сигнала в отклик напряжения $|\partial\bar{V} / \partial\Phi_e|$. На выход при работе с замкнутой обратной связью должен «подаваться» сигнал в последней, содержащий информацию об изменении внешнего потока Φ_e .

Магнитометры и градиентометры на основе свехпроводящих квантовых интерферометров в частотном диапазоне от долей герца до единиц мегагерц имеют энергетическое разрешение порядка $10^{-30} \dots 10^{-32}$ Дж/Гц, причем в отдельных экспериментах было получено разрешение $\delta E / \Delta f \sim 2h$, и чувствительность по магнитному потоку $\delta\Phi / (\Delta f)^{1/2}$ порядка $(10^{-5} \dots 10^{-6})\Phi_0$. Такие магнитометры нашли применение в магнитокардиографии, магнитоэнцефалографии, геофизике, в системах сверхнизкочастотной связи, устройствах неразрушающего контроля металлических конструкций; пикоамперметры на основе сквидов обладают рекордной чувствительностью при измерении постоянного тока.

СКВИДы позволяют также создавать сверхчувствительные *сепситометры* – приборы для измерения магнитной восприимчивости веществ (χ -метры). Разрешение таких сепситометров по магнитному моменту образца в полях до 100 Гс достигает значения $\delta p_m \approx 10^{-13} \text{ А} \cdot \text{м}^{-2} / \sqrt{\text{Гц}}$, что позволяет, в частности, следить за ходом уникальных химических реакций в малых объемах веществ, изучая изменения магнитной восприимчивости образцов.

В настоящее время широко используются различные измерительные комплексы на основе сканирующих микроскопов, например, сканирующего туннельного микроскопа или атомно-силового микроскопа. В последние годы к подобным измерительным системам добавился *сканирующий магнитный микроскоп на основе СКВИДа*. Такой микроскоп позволяет измерять пространственное распределение магнитного поля у поверхности образца, а затем восстанавливать по этим данным распределение плотности токов в исследуемом образце. Разрешение по магнитному моменту в таком микроскопе достигает значений $\delta p_m \approx 10^{-15} \dots 10^{-18} \text{ А} \cdot \text{м}^{-2} / \sqrt{\text{Гц}}$.

Подробно проблемы этой главы разобраны в работах: *Ван Дузер, Корнев, Лихарев (1980), Лихарев (1985), Фоминов, Шмидт, Clarke, Likharev.*

ЛИТЕРАТУРА

- Абрикосов А.А. Основы теории металлов, М.: Наука, 1987.
- Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике, М.: Изд-во добросвет, 1998.
- Аладышкин А.Ю. Туннельные явления в твердотельных наноструктурах. <http://www.pnn.unn.ru/UserFiles/lectures/Aladyshkin-LectureNotes2012.pdf>
- Асламазов Л. Г., Ларкин А. И. Эффект Джозефсона в точечных сверхпроводящих контактах // Письма в ЖЭТФ. — 1969. — Т. 9. — С. 150–154.
- Блатт Ф. Физика электронной проводимости в твердых телах, М.: Мир, 1971.
- Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики, М.: Высшая школа, 1961.
- Брандт Н.Б., Кульбачинский В.А. Квазичастицы в физике конденсированного состояния, М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005.
- Брандт Н.Б., Чудинов С.М. Электроны и фононы в металлах, М.: Изд-во Моск. ун-та, 1990.
- Ван Дuzер Т., Тернер Ч. У. Физические основы сверхпроводниковых устройств и цепей. М.: Радио и связь, 1984.
- Горелкин В.Н. Методы теоретической физики. Ч.2. Статистическая физика и физическая кинетика, М. МФТИ, 2010
- Де Жен П. Сверхпроводимость металлов и сплавов, М.: Мир, 1968.
- Дубровский В.Г. Введение в квантовую и статистическую физику, Новосибирск: Издательство НГТУ, 2005.
- Екимов А. И., Онущенко А. А. Квантовый размерный эффект в трехмерных микрокристаллах полупроводников // Письма в ЖЭТФ. — 1981. — Т. 34. — С. 363—366.
- Елютин П.В., Кривченко В.Д. Квантовая механика с задачами, М.: Физматлит, 2001.
- Займан Дж. Принципы теории твердого тела, М.: Мир, 1966.
- Зайцев Р.О. Статистическая физика, М.: Издательство МФТИ, 2004.
- Зайцев Р. О. О решении уравнений сверхпроводимости для системы сверхпроводящего и нормального металлов // ЖЭТФ. — 1965. — Т. 48. — С. 644–651.
- Зайцев Р. О. Граничные условия для уравнений сверхпроводимости при температурах, близких к критической // ЖЭТФ. — 1965. — Т. 48. — С. 1759–1771.
- Иванов М. Г. Как понимать квантовую механику. — М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2012.
- Киттель Ч. Введение в физику твердого тела, М.: Наука, 1978.

- Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел, М.: Наука, 1967.
- Корнев В. К. Эффект Джозефсона и его применение в сверхпроводниковой электронике // Соросовский образовательный журнал. — 2001. — Т. 7, № 8. — С. 1227–1230.
- Крекнелл А. Уонг К. Поверхность Ферми, М.: Атомиздат, 1978.
- Кулик И.О., Янсон И.К. Эффект Джозефсона в сверхпроводящих туннельных структурах, М. Наука, 1970.
- Куприянов М. Ю., Лукичѳв В. Ф. Влияние прозрачности границ на критический ток грязных SS'S структур // ЖЭТФ. — 1988. — Т. 94. — С. 139–149.
- Левитов Л.С., Шитов А.В. Функции Грина. Задачи и решения. М.: МЦНМО, 2016.
- Лихарев К.К. Введение в динамику джозефсоновских переходов. М.: Наука, 1985.
- Лихарев К.К., Ульрих Б.Т. Системы с джозефсоновскими контактами. М.: Московский университет, 1980.
- Максимов Е.Г., Саврасов Д.Ю., Саврасов С.Ю. Электрон-фононное взаимодействие и физические свойства металлов // УФН. — 1997. — Т. 167. — С.353–376.
- Матвеев А.Н. Электричество и магнетизм, М.: Высшая школа, 1987.
- Мельников А.С. Квазичастицы в сверхпроводниках: уравнения Боголюбова, http://nano.nnov.ru/seminars/2009_2010
- Минеев В.П., Самохин К.В. Введение в теорию необычной сверхпроводимости, М.: Изд-во МФТИ, 1998.
- Миронова Г.А. и др. Введение в квантовую физику в вопросах и задачах.— М.: Физ. ф-тет МГУ, 2012.
- Пайерлс Р. Электронная теория металлов, М.: ИЛ, 1947.
- Попов А. М. Тихонова О. В. Лекции по атомной физике, М.: Издательство Московского университета, 2007.
- Свидзинский А.В. Пространственно неоднородные задачи сверхпроводимости, М.: Наука, 1982.
- Слэтер Дж. Диэлектрики, полупроводники, металлы, М.: Мир, 1969.
- Солимар П. Туннельный эффект в сверхпроводниках и его применение, М.: Мир, 1974.
- Тинкхам М. Введение в сверхпроводимость, М.: Атомиздат, 1980.
- Фаддеев Л. Д., Якубовский О. А. Лекции по квантовой механике для студентов-математиков. Учеб. пособие. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1980.
- Фейнман Р. Лейтон Р. Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике, т.9, Квантовая механика (II), М.: Мир, 1967.

Фоминов Я.В., Щелкачев Н.М. Эффект Джозефсона. Учебно-методическое пособие, М.: Изд-во МФТИ, 2010.

Хакен Х. Квантовополевая теория твердого тела, М.: Наука, 1980.

Шмидт В.В. Введение в физику сверхпроводимости. М.: МЦНМО, 2000.

Щелкачев Н.М., Фоминов Я.В. Электрический ток в наноструктурах: кулоновская блокада и квантовые точечные контакты. Учебно-методическое пособие, М.: Изд-во МФТИ, 2010.

Anderson P.W. Random-Phase Approximation in the Theory of Superconductivity // *Phys. Rev.* — 1958. — V. 112. — P. 1900–1917.

Blatt F. J. *Modern Physics*, McGraw-Hill, 1992.

Blonder G.E., Tinkham M., and T.M. Klapwijk. Transition from metallic to tunneling regimes in superconducting microconstrictions: excess current, charge imbalance and supercurrent conversion // *Phys. Rev. B* . — 1982. — V. 25(7). — P. 4515–4532.

Clarke J. SQUID concepts and systems // *NATO ASL Series*, edd. H. Weinstock and M. Nisenoff. — 1989. — V. F59. — P. 88–148.

Clarke J., Braginski A. I. *The SQUID Handbook. Vol. I Fundamentals and Technology of SQUIDs and SQUID Systems*, Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co, 2004.

Giaever I. Energy gap in superconductors measured by electron tunneling // *Physical Review Letters*. — 1960. — V. 5, №. 4. — P. 147.

Golubov A., Kupriyanov M. Josephson effect in snins and snis tunnel-junctions with finite transparency of the sn boundaries // *Zhurnal Eksperimentalnoi I Teoreticheskoi Fiziki*. — 1989. — V. 96, no. 4. — P. 1420–1434.

Janson L., Klein M., Lewis H., Lucas A., Marantan A., Luna K. Undergraduate experiment in superconductor point-contact spectroscopy with a Nb/Au junction // *American Journal of Physics*. — V. 80. — P. 133–143. — 2012.

Kopnin N.B. *Theory of Nonequilibrium Superconductivity*, Oxford: Oxford University Press, 2001.

Likharev K.K. Superconducting weak links // *Rev. Mod. Phys.* — 1979 — V. 51. — P. 101–159.

Vonsovsky S. V., Katsnelson M. I. *Quantum Solid State Physics*, Berlin: Springer, 1989.

Zagoskin A. *Quantum theory of many-body systems: Techniques and Applications*, New-York: Springer, 1998.

Zaitsev A. V. Quasiclassical equations of the theory of superconductivity for contiguous metals and the properties of constricted microcontacts // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* — 1984. — V. 86. — P. 1742–1758.

Макроскопические квантовые эффекты и их применение в электронных устройствах.

Учебное пособие в вопросах и задачах

Учебное пособие

Авторы:

Н. В. Кленов, А.Е. Щеголев, С.В. Бакурский, А.А. Неило, И.И. Соловьев,
М.В. Терешонок, М.Ю. Куприянов

Рецензенты:

член-корр. РАН В.Ф. Лукичев, д.ф.-м.н. В.В. Рязанов

подписано в печать 15.07.2019

Формат А4. Объем 12 п.л. Тираж 20 экз.

Заказ №

Отпечатано в отделе оперативной печати

Брис – М