

Московский физико-технический институт

Л.А.Максимов, А.В.Михеенков, И.Я.Полищук

Лекции по статистической физике

Предварительный вариант

Долгопрудный - 2009

Содержание

1	Лекция 1. Термодинамика	5
1.1	Термодинамические величины	5
1.2	Температура	5
1.3	Термодинамическое равновесие	6
1.4	Энтропия	7
1.5	Второй закон термодинамики	7
1.6	Термодинамические тождества	8
1.7	Принцип минимальности термодинамических потенциалов	10
1.8	Термодинамика фазовых переходов	12
1.9	Теория фазовых переходов второго рода на примере ферромагнетиков	15
2	Лекция 2. Основные положения статистической физики	18
2.1	Средние значения	18
2.2	Статистическая независимость и закон больших чисел	19
2.3	Число состояний, плотность числа состояний	20
2.4	Статистическая энтропия	22
2.5	Три примера	25
2.5.1	N спинов в магнитном поле	25
2.5.2	N осцилляторов	26
2.5.3	Идеальный газ	27
3	Лекция 3. О статсумме, распределениях...	28
3.1	Статистическая сумма	28
3.2	Функция распределения	31
3.3	Неравновесная энтропия	36
4	Лекция 4. О законе возрастания энтропии...	38
4.1	Закон возрастания энтропии	38
4.2	Теорема Нернста	41
5	Лекция 5. Вторичное квантование колебаний решетки	41
5.1	Вторичное квантование колебаний решетки	41
5.2	Математическое введение в теорию решетки	49
5.3	Спектр колебаний кубических решеток. Неустойчивость	51
5.4	Плотность состояний фононов. Точки Ван-Хова	55
6	Лекция 6. Вторичное квантование электронов	56
6.1	Фермионы во вторичном квантовании	56
6.2	Модель Гейзенберга	63
7	Лекция 7. Идеальный бозе-газ	65
7.1	Схема вычислений	65
7.2	Распределение Бозе-Эйнштейна, бозе-конденсация	67
7.3	Термодинамика бозе-газа	69

7.4	Четыре примера	71
7.4.1	Задача 1.	71
7.4.2	Задача 2.	71
7.4.3	Задача 3.	72
7.4.4	Задача 4.	74
8	Лекция 8. Идеальный ферми-газ	75
8.1	Термодинамика ферми-газа	75
8.2	Магнетизм электронного газа	79
8.3	Электрон в периодической кристаллической решетке	88
9	Лекция 9. Неидеальный бозе-газ при нулевой температуре	95
9.1	Неидеальный бозе-газ при нулевой температуре	95
9.2	Теория Кастина-Дума	108
9.3	Сверхтекучий газ при нулевой температуре в ловушках	111
9.3.1	Введение	111
9.3.2	A1. Нелинейное уравнение Шредингера, конденсат, уравнение Гросса-Питаевского	112
9.3.3	A2. Элементарные возбуждения неидеального бозе-газа. Сверхтекучесть	114
9.3.4	3A. Энергия и волновая функция основного состояния	118
9.3.5	A4. Солитоны и стационарный эффект Джозефсона	119
9.3.6	A5. Решеточный газ	121
9.3.7	A6. Прямое наблюдение коэффициентов боголюбовского преобразования	122
9.3.8	B1. Уравнение Гросса-Питаевского для газа в магнитной ловушке. Основное состояние в приближении Томаса-Ферми	123
9.3.9	B2. "Гидродинамические уравнения" бозе-газа при нулевой температуре. Возбуждения конденсата в ловушках	124
9.3.10	B3. Осцилляции основного состояния	126
9.3.11	B4. Излучение боголюбовских возбуждений в осциллирующем газе, обусловленное статическим дефектом	127
9.3.12	B5. Черенковское излучение	133
9.3.13	B6. Параметрический резонанс	135
10	Лекция 10. Коллективные возбуждения в твердых телах	138
10.1	Модель желе – коллективные возбуждения в металлах	138
10.2	Экситон Мотта в полупроводниках	144
10.3	Экситон Френкеля в молекулярных кристаллах	145
10.4	Полярон в диэлектриках	147
11	Лекция 11. Возбуждения ферми-жидкости	151
12	Лекция 12. Ферромагнитные магноны	159
12.1	Ферромагнетизм и спиновые волны в приближении самосогласованного поля	159
12.2	Преобразование Холстейна-Примакова, закон дисперсии магнонов	165

12.3	Магنونная теплоемкость	168
12.4	Одномерная задача Изинга и метод трансферматрицы (точное решение)	168
12.5	Теорема Голдстоуна и спиновые волны	170
13	Лекция 13. Сверхпроводимость I - феноменология	174
13.1	Введение	174
13.2	Магнитные свойства сверхпроводников	175
13.2.1	Магнитные свойства сверхпроводников первого рода	175
13.2.2	Магнитные свойства сверхпроводников второго рода.	176
13.3	Термодинамика сверхпроводников	176
13.3.1	Критическое поле для сверхпроводника первого рода ¹	176
13.3.2	Энтропия и теплоемкость сверхпроводника	177
13.4	Термодинамические потенциалы	178
13.5	Уравнение Лондонов	180
13.6	Эффект Мейсснера	181
13.7	Когда справедливо уравнение Лондонов?	184
13.8	Связь между В и Н в промежуточном состоянии	185
13.9	Уравнение Гинзбурга – Ландау	187
13.10	Граница между нормальной и сверхпроводящей фазами	192
13.11	Квантование магнитного потока	193
13.12	Характерные масштабы длин в сверхпроводнике	194
13.13	Вихри Абрикосова	195
13.13.1	Одиночный вихрь	195
13.13.2	Первое критическое поле	197
13.13.3	Второе критическое поле	199
13.14	Эффекты Джозефсона	200
14	Лекция 14. Сверхпроводимость II - микроскопическая теория	201
14.1	Гамильтониан и уравнение движения	202
14.2	Феномен Купера	204
14.3	Уравнения Боголюбова-Де Жена	205
14.4	Энергия основного состояния	212
14.5	Температурная зависимость энергетической щели	214
14.6	Элементарные возбуждения и сверхпроводимость	215
14.7	Незатухающий электрический ток.	216
14.8	Теплоемкость сверхпроводника	220

¹Обратим внимание, что в этом разделе мы не интересуемся приповерхностными эффектами в слое толщиной порядка глубины проникновения λ . Поэтому, естественно, размер образца $L \gg \lambda$ и полученные соотношения имеют точность λ/L .

1 Лекция 1. Термодинамика

Коротко перечислим основные положения термодинамики.

Термодинамика — наука *феноменологическая*. Она опирается на *аксиомы*, которые выражают обобщение экспериментально наблюдаемых свойств *макроскопических систем* — тел, сред, состоящих из очень большого числа N частиц (или волн) и находящихся в состоянии термодинамического (механического, химического) равновесия или в неравновесном состоянии, близком к равновесному.

1.1 Термодинамические величины

В первую очередь термодинамика использует важнейшие понятия механики, такие как замкнутая система и аддитивные интегралы движения.

Замкнутая система — это макроскопическое тело, которое находится в стационарных внешних условиях и не взаимодействует с другими телами. Замкнутая система состоит из большого числа *подсистем* — макроскопических тел, взаимодействие между которыми достаточно мало, чтобы можно было не учитывать взаимного влияния на внутренние свойства подсистем, но достаточно большое, чтобы могла произойти релаксация всей замкнутой системы к полному равновесию. В простейшем случае подсистемы различаются только положением в пространстве и числом частиц, но могут находиться в разных агрегатных состояниях (например, жидкость и пар) или проникать друг в друга (как электроны и кристаллическая решетка из ионов в металле). *Аддитивные интегралы* движения — сохраняющиеся во времени величины, которые для замкнутой системы равны сумме их значений для подсистем. Для газа и жидкости в замкнутом сосуде — это энергия E , объем V и число частиц N . Энергия основного состояния, т.е. минимальная энергия тела принимается равной нулю. Аддитивные интегралы движения и любые функции от них называются *термодинамическими величинами*. Термодинамическая величина, которая характеризует локальные свойства среды, называется *интенсивной* величиной (в противоположность интенсивным, аддитивные величины называют также экстенсивными). В частности, при механическом равновесии одинаковое значение во всех подсистемах имеет интенсивная величина — *давление*:

$$p = -\frac{\partial E}{\partial V}. \quad (1)$$

При химическом равновесии во всех подсистемах одинаковое значение имеет *химический потенциал*:

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N}. \quad (2)$$

1.2 Температура

Аксиома 0. Существует интенсивная термодинамическая величина, температура $T = T(E, V, N)$ которая характеризует степень нагретости тела и обладает следующими свойствами:

1. В основном состоянии температура равна нулю:

$$T|_{E=0} = 0. \quad (3)$$

2. Температура монотонно растет с увеличением энергии тела:

$$\frac{\partial T}{\partial E} > 0. \quad (4)$$

3. При термодинамическом равновесии все подсистемы одинаково нагреты, т.е. имеют одинаковую температуру:

$$T_1 = T_2 = \dots \quad (5)$$

Аддитивная **положительная** величина

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N}, \quad (6)$$

равная количеству энергии, необходимому для нагревания тела на один *градус*, называется теплоемкостью при постоянном объеме.

Вид монотонной зависимости температуры от энергии зависит от вещества и выбора температурной шкалы. Мы будем использовать энергетическую шкалу, в которой температура разреженного одноатомного газа вычисляется по формуле

$$T = \frac{pV}{N} = \frac{2E}{3N}. \quad (7)$$

Эта шкала отличается от шкалы градусов Кельвина T^0 множителем, который называется константой Больцмана

$$T = k_B T^0, \quad k_B = 1.3810^{-16} \frac{erg}{grad}. \quad (8)$$

1.3 Термодинамическое равновесие

Аксиома 1. *Состояние термодинамического равновесия замкнутой системы полностью характеризуется полным набором термодинамических величин.*

В частности, термодинамическое состояние газа или жидкости полностью описывается одним из наборов (E, V, N) , (T, V, N) или (T, p, N) . Если система состоит из подсистем, находящихся в разных агрегатных состояниях и имеющих сложный состав, то во всех подсистемах все интенсивные термодинамические величины имеют одинаковое значение. Например, при фазовом равновесии жидкого раствора с его паром одинаковое значение в жидкости и паре имеют не только температура и давление, но и химические потенциалы каждой из компонент раствора.

В рамках термодинамики любое неравновесное состояние замкнутой системы рассматривается как совокупность равновесных состояний подсистем, равновесие между которыми нарушено (например, разные части тела могут иметь разные температуры и давления).

1.4 Энтропия

Многие важные результаты в различных областях физики наиболее красиво формулируются, если найден соответствующий *вариационный принцип*. В термодинамике — это принцип максимальности энтропии.

Энтропией тела, находящегося в термодинамическом равновесии, называется аддитивная термодинамическая величина, равная

$$S(E) = \int_0^E \frac{dE}{T(E)}. \quad (9)$$

Из этого определения следуют три важных свойства энтропии:

$$(a) \quad S|_{E=0} = S|_{T=0} = 0 \quad (10)$$

$$(b) \quad \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T} > 0 \quad (11)$$

$$(c) \quad \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} = -\frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial E} = -\frac{1}{T^2 C_V} < 0 \quad (12)$$

То есть энтропия — монотонная выпуклая функция энергии. *Неравновесной энтропией* замкнутой системы, образованной из двух равновесных подсистем, называется сумма

$$S = S_1(E_1) + S_2(E_2). \quad (13)$$

Найдем максимальное значение этой суммы при условии постоянства полной энергии $E = E_1 + E_2$:

$$\frac{dS}{dE_1} = \frac{dS_1}{dE_1} + \frac{dS_2}{dE_2} \frac{d(E - E_1)}{dE_1} = \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} = 0, \quad (14)$$

$$\frac{d^2 S}{dE^2} = -\left(\frac{1}{T^2 C_V}\right)_1 - \left(\frac{1}{T^2 C_V}\right)_2 < 0 \quad (15)$$

Отсюда следует, что энтропия максимальна, когда обе подсистемы имеют одинаковую температуру.

Аналогично, варьируя энтропию системы по объему и числу частиц одной из подсистем при условии постоянства полного объема и полного числа частиц (используя $\frac{\partial S}{\partial V} = \frac{\partial S}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial V} = \frac{1}{T}(-p)$, $\frac{\partial S}{\partial N} = \frac{\partial S}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial N} = \frac{1}{T}\mu$), находим, что энтропия максимальна, когда равны друг другу давления и химические потенциалы подсистем.

Таким образом, три условия термодинамического равновесия — условия постоянства температуры, давления и химического потенциала — являются следствием одного условия максимальности энтропии в равновесном состоянии.

1.5 Второй закон термодинамики

Второй закон термодинамики гласит:

Аксиома 2. Энтропия неравновесной замкнутой системы с течением времени монотонно растет и принимает максимальное значение при наступлении термодинамического равновесия.

Процессы, при которых растет энтропия, называются *необратимыми процессами*. Процессы, происходящие практически при постоянной энтропии, называются *обратимыми или адиабатическими процессами*.

Закон возрастания энтропии задает направление релаксационного процесса. Рассмотрим необратимый процесс установления теплового равновесия в замкнутой системе, состоящей из двух подсистем, имеющих постоянные объемы и числа частиц, но энергия которых может перетекать от одной подсистемы к другой при условии сохранения полной энергии.

$$\frac{dE_1}{dt} = -\frac{dE_2}{dt} \quad (16)$$

Возьмем производную по времени от суммарной энтропии (13):

$$\frac{dS}{dt} = \frac{dS_1}{dE_1} \dot{E}_1 + \frac{dS_2}{dE_2} \dot{E}_2 = \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \dot{E}_1 \geq 0, \quad (17)$$

Пусть, например, $T_2 > T_1$, тогда из (17) следует, что $\dot{E}_1 \geq 0$. Таким образом, общеизвестный факт, что при тепловом контакте холодное тело нагревается, а горячее охлаждается, есть следствие второго закона термодинамики. Кроме того

$$\frac{dE_1}{dt} = \frac{dE_1}{dT_1} \frac{dT_1}{dt} = C_{V1} \frac{dT_1}{dt} = -C_{V2} \frac{dT_2}{dt}. \quad (18)$$

Если одна из подсистем много меньше другой ($N_1 \ll N_2, C_{V1} \ll C_{V2}$), то

$$\frac{dT_2}{dt} = -\frac{C_{V1}}{C_{V2}} \frac{dT_1}{dt}, \quad \left| \frac{dT_2}{dt} \right| \ll \left| \frac{dT_1}{dt} \right|$$

и температура большой подсистемы практически не меняется. Поэтому большую подсистему по отношению к малой называют *термостатом*.

1.6 Термодинамические тождества

Равновесная энтропия тела есть аддитивная функция энергии, объема и числа частиц:

$$S = S(E, V, N). \quad (19)$$

Можно, наоборот, энергию рассматривать как функцию энтропии и остальных аддитивных интегралов движения:

$$E = E(S, V, N). \quad (20)$$

В соответствии с *Аксиомой 1* набор (S, V, N) является одним из эквивалентных наборов термодинамических величин, полностью описывающих равновесное состояние тела.

Напишем дифференциал энергии

$$dE = \frac{\partial E}{\partial S}dS + \frac{\partial E}{\partial V}dV + \frac{\partial E}{\partial N}dN. \quad (21)$$

Используя физический смысл производных (1), (2), (11), этот дифференциал можно переписать в стандартной форме

$$dE = TdS - pdV + \mu dN \quad (22)$$

Это — основное термодинамическое тождество. Оно связывает малые изменения аддитивных термодинамических величин при переходе от одного равновесного состояния тела к другому.

Переходя к другим полным наборам термодинамических параметров, получаем другие термодинамические тождества

$$dF = d(E - TS) = -SdT - pdV + \mu dN, \quad (23)$$

$$dW = d(E + pV) = TdS + Vdp + \mu dN, \quad (24)$$

$$d\Phi = d(F + pV) = -SdT + Vdp + \mu dN, \quad (25)$$

$$d\Omega = d(F - \mu N) = -SdT - pdV - Nd\mu, \quad (26)$$

Из (22) для дифференциала энтропии получаем

$$dS = \frac{1}{T}dE + \frac{p}{T}dV - \frac{\mu}{T}dN. \quad (27)$$

Энергия $E = E(S, V, N)$ и функции

$$F(T, V, N) = E - TS, \quad (28)$$

$$W(S, p, N) = E + pV, \quad (29)$$

$$\Phi(T, p, N) = F + pV = \mu(T, p)N, \quad (30)$$

$$\Omega(T, V, \mu) = F - \mu N = -p(T, \mu)V, \quad (31)$$

называются *термодинамическими потенциалами*. Последние равенства в (30), (31) являются непосредственным следствием аддитивности термодинамических потенциалов². Из них следует, что химический потенциал есть термодинамический потенциал, отнесенный к одной частице, а давление — термодинамический потенциал, отнесенный к единице объема. Из сравнения (30) и (25), а также (31) и (26) получаем

$$d\mu = -\frac{S}{N}dT + \frac{V}{N}dp, \quad dp = -\frac{S}{V}dT - \frac{N}{V}d\mu, \quad (32)$$

Пусть система может обладать магнитным моментом. Тогда во внешнем магнитном поле каждый из введенных выше термодинамических потенциалов приобретает добавку mdH . Например, соотношение (22) переписывается

$$dE = TdS - pdV + \mu dN - mdH. \quad (33)$$

² $\Phi = \Phi(T, p, N)$, но T и p — интенсивные, локальные величины. Поэтому из аддитивности Φ следует $\Phi(T, p, N) = Nf(T, p)$, где f — некоторая функция. Но тогда $\mu = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N}\right) = f$ и отсюда $\Phi = \mu N$. Аналогично для Ω .

Отсюда следует, что

$$m = - \left(\frac{\partial E}{\partial H} \right)_{SVN} = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial H} \right)_{pTN} = - \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_{VTN} = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial H} \right)_{\mu TV}. \quad (34)$$

Последнее соотношение называется теоремой о малых добавках.

Любой из термодинамических потенциалов полностью описывает все термодинамические свойства тела. Например, производные от *свободной энергии* F определяют температурные зависимости давления, химического потенциала и теплоемкости:

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{TN}, \quad \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{TV}, \quad C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{VN} = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_{VN} \quad (35)$$

Из термодинамических тождеств следуют также важные соотношения типа

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{TN} = \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{VN} = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V}. \quad (36)$$

1.7 Принцип минимальности термодинамических потенциалов

Рассмотрим необратимый процесс установления термодинамического равновесия в замкнутой системе, состоящей из малой подсистемы — *тела 1* и *термостата 2*. Пусть, в отличие от пункта 1.4, в начальный момент времени тело находится в состоянии частичного внутреннего равновесия, таком что некоторый параметр тела, например магнитный момент, M отличен от своего термодинамически равновесного значения $M_{term} = M(E_1, V_1, N_1)$. Будем считать, что в ходе процесса релаксации у тела может меняться не только M , но и E_1, V_1, N_1 , при условии сохранения полных энергии, объема и числа частиц E_{tot}, V_{tot} и N_{tot} . Производная по времени от суммарной энтропии такой системы

$$S_{tot} = S_1(E_1, V_1, N_1, M) + S_2(E_{tot} - E_1, V_{tot} - V_1, N_{tot} - N_1) \quad (37)$$

равна (см. (27))

$$\dot{S}_{tot} = \dot{S}_1 + \dot{S}_2 = \dot{S}_1 - \frac{1}{T_2} \dot{E}_1 - \frac{p_2}{T_2} \dot{V}_1 + \frac{\mu_2}{T_2} \dot{N}_1 \quad (38)$$

В течение необратимого процесса температура, давление и химический потенциал термостата практически не меняются и фактически играют роль внешних условий для малой подсистемы. В дальнейшем параметры термостата будем писать без индекса 2.

Поскольку при необратимом процессе полная энтропия замкнутой системы может только расти $\dot{S}_{tot} \geq 0$, то из (38) получаем неравенство:

$$-T \dot{S}_1 + \dot{E}_1 + p \dot{V}_1 - \mu \dot{N}_1 \leq 0 \quad (39)$$

Рассмотрим частные случаи. Пусть тело имеет фиксированные объем и число частиц, и благодаря тепловому контакту его температура равна температуре

термостата: $T_1 = T$. Это — *изотермический процесс*, при котором согласно (39) происходит монотонное понижение свободной энергии тела.

$$\dot{F}_1 = \frac{d(E_1 - TS_1)}{dt} \leq 0 \quad T_1 = T = const, \quad V_1 = const, \quad N_1 = const \quad (40)$$

При *изобарическом процессе*, в течение которого постоянен не объем, а давление, монотонно уменьшается так называемая свободная энергия Гиббса:

$$\dot{\Phi}_1 = \frac{d(E_1 - TS_1 + pV_1)}{dt} \leq 0 \quad T_1 = T = const, \quad p_1 = p = const, \quad N_1 = const \quad (41)$$

Наконец, если на границе тела с термостатом происходит обмен частицами, монотонно убывает Ω - потенциал:

$$\dot{\Omega}_1 = \frac{d(E_1 - TS_1 - \mu N_1)}{dt} \leq 0 \quad T_1 = T = const, \quad V_1 = const, \quad \mu_1 = \mu = const \quad (42)$$

Таким образом, необратимые процессы сопровождаются уменьшением одного из термодинамических потенциалов.

Из формулы (38) следует еще одно важное соотношение. Проинтегрируем (38) в обратном направлении по времени от $t = +\infty$ до $t = -\infty$. Это дает уменьшение энтропии замкнутой системы при переходе тела из равновесного состояния в неравновесное (при постоянных значениях температуры, давления и химического потенциала термостата):

$$\Delta S_{tot} = -\frac{R_{min}}{T}. \quad (43)$$

Величина

$$R_{min} = \Delta E_1 + p\Delta V_1 - T\Delta S_1 - \mu\Delta N_1 \quad (44)$$

называется минимальной работой. Это минимальная работа, которую должен выполнить внешний источник, чтобы перевести данное тело, находящееся во внешней среде, из одного состояния в другое.

Рассмотрим этот вопрос подробнее. Пусть требуется перевести тело, находящееся во внешней среде (термостате) из одного состояния в другое за счет работы A внешних механических источников. Тогда изменение энергии тела ΔE_1 и среды ΔE связаны с работой соотношением

$$\Delta E_1 + \Delta E = A.$$

Поскольку среда все время находится в равновесии, то

$$\Delta E = T\Delta S - p\Delta V + \mu\Delta N.$$

Ввиду того, что

$$\Delta S + \Delta S_1 \geq 0, \quad \Delta V + \Delta V_1 = 0, \quad \Delta N + \Delta N_1 = 0,$$

имеем

$$R_{min} = \Delta(E_1 - TS_1 + pV_1 - \mu N_1) \leq A. \quad (45)$$

Таким образом, R_{\min} имеет смысл минимальной работы, которая требуется, чтобы перевести тело из одного состояния в другое (которые не должны быть равновесными). Если тело в каждый момент времени находится в равновесии, то для бесконечно малых изменений имеем

$$\delta R_{\min} = (T_1 - T) \delta S_1 - (p_1 - p) \delta V_1 + (\mu_1 - \mu) \delta N_1 \quad (46)$$

Аналогично можно показать, что, если тело, не находящееся в равновесии, поместить в среду, то максимальная работа которая может быть выполнена таким телом равна

$$R_{\max} = -\Delta(E_1 - TS_1 + pV_1 - \mu N_1). \quad (47)$$

1.8 Термодинамика фазовых переходов

Существуют различные агрегатные состояния вещества: твердое, жидкое, газообразное. При повышении температуры ферромагнетик переходит в парамагнитное состояние. При изменении температуры или давления в твердом теле происходят переходы из одной кристаллической структуры в другую. При определенных условиях наблюдаются переходы металл-диэлектрик, возникает сверхпроводимость. Все это — различные фазы вещества. *Равновесие фаз* имеет место, когда температуры, давления и химические потенциалы обеих фаз совпадают:

$$T_1 = T_2, \quad p_1 = p_2, \quad \mu_1 = \mu_2 \quad (48)$$

Эти экспериментальные факты можно вывести из принципа максимальности энтропии. Для температуры это было уже доказано (см. (14)). Докажем, например, равенство химических потенциалов обеих фаз из условия максимальности суммарной энтропии $S = S_1 + S_2$ при постоянном числе частиц $N = N_1 + N_2$:

$$\frac{dS}{dN_1} = \frac{dS_1}{dN_1} + \frac{dS_2}{dN_2} \frac{d(N - N_1)}{dN_1} = \frac{\mu_1}{T_1} - \frac{\mu_2}{T_2} = 0 \quad (49)$$

Отсюда, поскольку $T_1 = T_2$, то и $\mu_1 = \mu_2$ (аналогично, дифференцируя по объему, докажем третье из соотношений (48)).

Химические потенциалы разных фаз по разному зависят от температуры и давления. Вид этих зависимостей устанавливает статистическая физика, в рамках термодинамики эти зависимости следует предполагать известными. Условие фазового равновесия

$$\mu_1(p, T) = \mu_2(p, T) \quad (50)$$

неявным образом задает вид кривой фазового равновесия $p = p(T)$. Эту зависимость удобно представить в форме, которая возникает в результате дифференцирования уравнения (50) по температуре:

$$\left(\frac{\partial \mu_1}{\partial T} \right)_p + \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial p} \right)_T \frac{dp}{dT} = \left(\frac{\partial \mu_2}{\partial T} \right)_p + \left(\frac{\partial \mu_2}{\partial p} \right)_T \frac{dp}{dT} \quad (51)$$

Из термодинамического тождества

$$d\mu = -s dT + v dp, \quad s = S/N, v = V/N \quad (52)$$

следует, что

$$s = -\frac{\partial\mu}{\partial T}, \quad v = \frac{\partial\mu}{\partial p} \quad (53)$$

В результате получаем формулу Клайперона-Клаузиуса

$$\frac{dp}{dT} = \frac{q}{Tv_{12}}, \quad q = T(s_1 - s_2), \quad v_{12} = v_1 - v_2, \quad (54)$$

которая выражает наклон кривой фазового равновесия $p(T)$ через отношение теплоты перехода q к разности объемов v_{12} , приходящихся на одну молекулу вещества.

Рассмотрим для определенности парообразование. Давление, при котором пар и жидкость находятся во взаимном термодинамическом равновесии, называется давлением насыщенных паров. Пусть *фаза 1* есть пар, а *фаза 2* — жидкость, причем $s_2 \ll s_1$, и $v_2 \ll v_1 = T/p$. Тогда приближенно имеем

$$\frac{dp}{dT} = \frac{s_1}{v_1} = \frac{ps_1}{T}. \quad (55)$$

Энтропия, приходящаяся на одну молекулу пара есть большая безразмерная величина, которая слабо (логарифмически) зависит от температуры и давления. В этом легко убедиться, если считать насыщенный пар идеальным газом. Пренебрегая этой зависимостью, получаем

$$p = AT^{s_1} \quad (56)$$

Мы видим, что с ростом температуры давление насыщенных паров быстро растет.

Фазовые переходы, в которых скачком меняются первые производные химического потенциала (s, v) , называются фазовыми переходами *первого рода*. При фазовых переходах *второго рода* скачком меняются вторые производные — теплоемкость и сжимаемость. Они рассматриваются в следующем разделе.

Процесс фазового перехода первого рода является медленным — квазистационарным — процессом. Он происходит путем образования внутри одной фазы компактных зародышей другой фазы. При этом тепловое и механическое равновесие выполняется, но химические потенциалы зародыша и среды не равны друг другу. Вычислим энергию образования зародыша $\varepsilon(R)$, которую определим как разность энергий системы со сферическим зародышем радиуса R и без него с одинаковыми значениями полной энтропии, объема и числа частиц

$$\varepsilon(R) = \{E_1(S_1, V_1, N_1) + E_2(S - S_1, V - V_1, N - N_1) + 4\pi\sigma R^2\} - E_2(S, V, N) \quad (57)$$

В фигурных скобках выписана энергия гетерофазного состояния системы, которая равна сумме энергий каждой фазы и энергии поверхностного натяжения $4\pi\sigma R^2$. Радиус сферического зародыша связан с числом частиц в нем соотношением

$$R = aN_1^{1/3} \quad (58)$$

где $a = (3v_1/4\pi)^{1/3}$, v_1 — объем, приходящийся на одну частицу зародыша.

Энтропия S_1 , объем V_1 и число частиц N_1 зародыша малы по сравнению с энтропией, объемом и числом частиц среды, так что разность энергий среды в (57) можно заменить с учетом (22) на сумму приращений

$$E_2(S - S_1, V - V_1, N - N_1) - E_2(S, V, N) = -T_2 S_1 + p_2 V_1 - \mu_2 N_1$$

и получить

$$\varepsilon(R) = \{E_1(S_1, V_1, N_1) - T_2 S_1 + p_2 V_1 - \mu_2 N_1 + 4\pi\sigma R^2\} \quad (59)$$

Из определения термодинамического потенциала Гиббса (30) энергию вещества зародыша можно представить в форме

$$E = TS - pV + \mu N \quad (60)$$

Это дает

$$\varepsilon(R) = (\mu_1 - \mu_2)N_1 + (T_1 - T_2)S_1 - (p_1 - p_2)V_1 + 4\pi\sigma R^2. \quad (61)$$

Предполагая тепловое равновесие, имеем $T_1 = T_2 = T$. Механическое равновесие сферического зародыша выполняется, если давление в нем увеличено на давление поверхностного натяжения:

$$p_1 = p + \frac{2\sigma}{R}, \quad p_2 = p, \quad \mu_1(p_1) = \mu_1(p) + \frac{2\sigma}{R}v_1 \quad (62)$$

Выражение (61) принимает вид

$$\varepsilon(R) = (\mu_1(p) - \mu_2(p))N_1 + 4\pi\sigma a^2 N_1^{2/3} \quad (63)$$

Существенно, первый член справа растет с увеличением N_1 быстрее, чем последний. Если химический потенциал зародыша (при давлении равном давлению среды) меньше химического потенциала среды, то энергия достаточно большого зародыша отрицательна. Тогда, согласно принципу минимальности термодинамических потенциалов, состояние системы должно релаксировать в сторону увеличения зародыша до тех пор, пока существенная часть вещества не перейдет в новую фазу и химические потенциалы обеих фаз сравняются. Для маленького зародыша основную роль играет энергия поверхностного натяжения и система релаксирует в состояние без зародыша. Производная от (63) по числу частиц в зародыше равна

$$\frac{d\varepsilon}{dN_1} = (\mu_1(p) - \mu_2(p)) + \frac{8}{3}\pi\sigma a^2 N_1^{-1/3}. \quad (64)$$

Мы видим, что смена направлений процесса релаксации происходит в критической точке

$$N_c = \left[\frac{8}{3}\pi \frac{\sigma a^2}{\mu_2(p) - \mu_1(p)} \right]^3 \quad (65)$$

Таким образом, система с зародышем критического размера N_c находится в состоянии абсолютно неустойчивого равновесия. Между состоянием среды без зародышей и состояниями с закритическими зародышами имеется энергетический барьер. Поэтому состояние без зародышей является метастабильным и переходит в стабильное, только благодаря гетерогенным флуктуациям.

1.9 Теория фазовых переходов второго рода на примере ферромагнетиков

Вещество может находиться в различных фазовых состояниях: газ, жидкость, твердое тело. Существует два класса фазовых переходов — переходы первого и второго рода. Переходы первого рода происходят с выделением теплоты фазового перехода. При фазовых переходах второго рода скачком меняется теплоемкость. В этом разделе будет изложена теория фазовых переходов второго рода Ландау. При фазовых переходах второго рода происходит изменение внутренней симметрии вещества. Эту симметрию удобно характеризовать *параметром дальнего порядка*. У ферромагнетика имеется векторный параметр порядка — спонтанная намагниченность. У сверхпроводника — комплексный параметр порядка, который условно можно интерпретировать как волновую функцию куперовских пар. При переходе в более симметричную фазу этот параметр исчезает.

Из электродинамики известно, что при небольшом увеличении магнитного поля энергия единицы объема тела увеличивается на величину

$$dE = \frac{1}{4\pi} H dB$$

Поэтому термодинамическое тождество для свободной энергии $F(T, B)$ тела в магнитном поле следует писать в форме

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN + \frac{1}{4\pi} H dB$$

Чтобы не заниматься проблемой размагничивающего фактора, будем считать, что рассматриваемое тело имеет форму длинного цилиндра и внешнее поле H направлено вдоль оси цилиндра. Тогда напряженность H магнитного поля внутри тела равно внешнему магнитному полю, и более удобно использовать в качестве независимой переменной не индукцию $B = H + 4\pi M$, а напряженность H и эффективную свободную энергию

$$\mathcal{F}(T, H) = F(T, B) - \frac{1}{8\pi} H^2 - HM,$$

для которой термодинамическое тождество имеет вид

$$d\mathcal{F} = -SdT - pdV + \mu dN - MdH$$

В термодинамически равновесном состоянии намагниченность однозначно определяется видом функции $\mathcal{F}(T, H)$

$$M = - \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial H} \right)_T$$

У ферромагнитных веществ даже в отсутствии внешнего магнитного поля возможно существование спонтанного магнитного момента. При заданной температуре равновесное значение спонтанной намагниченности определяется минимальным значением свободной энергии $\mathcal{F}(T, H = 0, M)$. Если этот минимум

отвечает значению $M = 0$, то тело находится в парамагнитном состоянии. Если опуститься по температуре ниже температуры Кюри T_c , то минимальному значению свободной энергии отвечает $M \neq 0$. Количественную формулировку этого явления можно получить, записав свободную энергию тела в форме разложения по степеням намагниченности

$$\mathcal{F} = F_0(T) + a(T)M^2 + \frac{1}{2}b(T)M^4 \quad (66)$$

Предполагается, что вещество изотропно. Поэтому нечетных степеней \vec{M} в этом разложении нет. Цель теории Ландау — описать термодинамические и магнитные свойства ферромагнетика в окрестности точки Кюри. Вблизи этой точки намагниченность должна быть малой величиной. Для этого необходимо $b(T) > 0$.

Тогда более высоких степеней намагниченности в разложении (66) можно не учитывать

Минимум функции (66) определяется соотношениями

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial M} = a(T)M + b(T)M^3 = 0 \quad (67)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial M^2} = a(T) + 3b(T)M^2 > 0 \quad (68)$$

Если коэффициент $a(T)$ положителен, то минимум находится в начале координат, и вещество парамагнитно. Если $a(T) < 0$, то минимум находится в точке

$$M = \sqrt{\frac{|a(T)|}{b(T)}} \quad (69)$$

и вещество обладает спонтанным моментом. Простейшей моделью, реализующей эту ситуацию, является

$$a(T) = \alpha(T - T_c), \quad \alpha > 0, \quad b(T) = b = const \quad (70)$$

В этой модели намагниченность обращается в нуль по корневому закону

$$M = M_0(T) = \sqrt{\frac{\alpha}{b}(T_c - T)}, \quad T < T_c \quad (71)$$

$$M = 0, \quad T > T_c$$

Равновесное минимальное значение равновесной свободной энергии (66) равно

$$\mathcal{F} = F_0(T) - \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{b} (T_c - T)^2, \quad T < T_c \quad (72)$$

$$\mathcal{F} = F_0(T), \quad T > T_c$$

Энтропия тела $S = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T}$ равна

$$S = S_0(T) - \frac{\alpha^2}{b} (T_c - T), \quad T < T_c \quad (73)$$

$$S = S_0(T), \quad T > T_c$$

В ферромагнитном состоянии энтропия имеет отрицательную добавку, указывающую на некоторый дополнительный порядок. Эта добавка приводит к скачку теплоемкости $C(T) = T \frac{\partial S}{\partial T}$

$$\begin{aligned} C(T) &= T \frac{\partial S}{\partial T} = C_0(T) + \frac{\alpha^2}{b} T, & T < T_c \\ C(T) &= C_0(T), & T > T_c \end{aligned} \quad (74)$$

Реально в точке Кюри теплоемкость имеет более сильную особенность, которая обусловлена так называемыми критическими флуктуациями. Такое поведение теплоемкости можно описать, заменив модель (70) на модель более общего вида

$$a(T) = \alpha(T_c - T)^\gamma, \quad 0 < \gamma < 1 \quad (75)$$

Величина γ называется критическим индексом. В этой модели ферромагнитная добавка равна

$$\delta F = -\frac{1}{2} \frac{a^2}{b} = -\frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{b} (T_c - T)^{2\gamma}, \quad T < T_c$$

и добавка к теплоемкости в точке Кюри обращается в бесконечность по закону

$$\delta C = +\gamma(2\gamma - 1) \frac{\alpha^2}{b} T (T_c - T)^{2\gamma-2}, \quad T < T_c$$

Эта особенность напоминает греческую букву лямбда и называется лямбда-точкой.

Теперь рассмотрим поведение ферромагнетика в магнитном поле. При этом мы ограничимся моделью Ландау (70). В слабом магнитном поле свободная энергия (66) принимает вид

$$\mathcal{F}(T, H, M) = F_0(T) + a(T) M^2 + \frac{1}{2} b M^4 - H M \quad (76)$$

Найдем минимум этой функции

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial M} = a(T) M + b M^3 - H = 0 \quad (77)$$

В парамагнитной области, пренебрегая кубическим членом имеем

$$M = \frac{H}{a(T)}, \quad T > T_c$$

и магнитная восприимчивость описывается законом Кюри-Вейсса

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_{H=0} = \frac{1}{\alpha(T_c - T_c)}, \quad T > T_c$$

Ниже температуры Кюри равновесная намагниченность близка к спонтанному значению (71)

$$M = M_0 + \delta M$$

В линейном приближении с учетом (70), (71) имеем

$$a(T) \delta M + 3bM_0^2 \delta M - H = 0; \quad a(T) \delta M - 3a(T) \delta M - H = 0$$

$$\delta M = \frac{H}{2|a(T)|}$$

Как и в парамагнитной области, восприимчивость стремится к бесконечности, но с другим коэффициентом

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_{H=0} = \frac{1}{2\alpha(T_c - T)}, \quad T > T_c$$

Статистическая теория, которая свободную энергию ферромагнетика вычисляет в приближении самосогласованного поля, воспроизводит результаты термодинамической теории Ландау и дает количественные оценки термодинамических параметров. В частности, из статистической теории следует, что температура Кюри по порядку величины равна энергии обменного взаимодействия электронов на соседних атомах.

2 Лекция 2. Основные положения статистической физики

Термодинамика устанавливает соотношения между термодинамическими величинами, но не дает способа их вычисления. Эту задачу решает статистическая физика, которая объединяет методы микроскопической физики — квантовой механики и теории поля с методами теории вероятности и статистической физики для построения описания равновесных состояний макроскопических систем. (К сожалению, в физической литературе слово "состояние" используется сразу в трех смыслах — это и состояние одной частицы, и механическое собственное состояние макроскопического гамильтониана, и статистическое среднее состояние макроскопической системы. Но поднимать вопрос о ясности физической терминологии считается неприличным и с этим приходится смириться.)

2.1 Средние значения

Макроскопические системы, среды — это тела из большого числа частиц или поля с большим числом степеней свободы. Состояние среды известно всегда весьма приближенно. Поэтому при описании этого состояния важное значение имеют средние значения физических величин. Среднее значение физической величины A , можно определить двумя способами.

Первый способ — у одной системы многократно в моменты времени t_i повторяется измерение этой величины $A(t_1), A(t_2), \dots, A(t_n)$, и производится усреднение по результатам измерений. Такое среднее $\langle A \rangle_t$ называется *средним по времени*

Второй способ заключается в том, что берется множество (ансамбль) одинаковых систем, находящихся в одинаковых внешних условиях и одинаково приготовленных, и производится усреднение по результатам однократного измерения

величины A у каждой системы:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{n}(A_1 + A_2 + \dots + A_n). \quad (1)$$

Такое среднее, которое мы будем обозначать \bar{A} или $\langle A \rangle$, называется *средним по ансамблю*. Имеет место "эргодическая гипотеза", согласно которой оба способа усреднения дают одинаковый результат для всех величин у всех макроскопических систем, находящихся в равновесных состояниях. Для неравновесных систем, состояние которых эволюционирует во времени, сохраняет смысл только второй способ усреднения. Поэтому в настоящих лекциях под усреднением будет всегда подразумеваться усреднение по ансамблю.

Разность $\Delta A = A - \langle A \rangle$ называется *флуктуацией* величины A . Величина $\sigma_A = \sqrt{\langle (\Delta A)^2 \rangle}$ есть средняя квадратичная флуктуация или *дисперсия* величины A . Среднее значения произведения флуктуаций $\langle \Delta A \Delta B \rangle$ — есть *корреляция* величин A и B .

Заметим, что в замкнутой системе энергия и другие интегралы движения J во времени не флуктуируют, и для них $\langle (\Delta J)^2 \rangle_t = 0$. Так что для дисперсий интегралов движения эргодическая гипотеза несправедлива.

2.2 Статистическая независимость и закон больших чисел

Две физические величины *статистически независимы*, некоррелированы, если

$$\langle \Delta A \Delta B \rangle = 0. \quad (2)$$

Два тела статистически независимы, если все физические величины, относящиеся к одному телу не коррелированы со всеми физическими величинами второго тела.

Теперь можно дать более полное определение "макроскопической системы". Макроскопическая система — это такое тело, которое можно рассматривать как совокупность большого числа M ($M \gg 1$) статистически независимых подсистем. Чтобы подсистема была статистически независимой от соседней подсистемы, необходимо, вообще говоря, чтобы взаимодействие между частицами подсистемы было много сильнее, чем пограничное взаимодействие между частицами данной подсистемы и частицами соседней подсистемы. Это, как правило, имеет место, когда число частиц в подсистеме N_1 достаточно велико ($N_1 \gg 1$). В идеальном газе, частицы которого не взаимодействуют друг с другом, уже одна частица может рассматриваться как независимая подсистема. Так что идеальный газ из ста частиц вполне можно называть макроскопическим телом. Но мы этого делать не будем, и будем считать, что велико не только число частиц в системе, но и $\log N \gg 1$.

Мысленно разобьем макроскопическое однородное тело (газ, жидкость, кристалл) на большое число M одинаковых статистически независимых подсистем. Средние значения энергий одинаковых подсистем $\langle E_i \rangle$ равны друг другу. Поэтому средняя энергия всей системы есть

$$\langle E_{tot} \rangle = \left\langle \sum_i^M E_i \right\rangle = M \langle E_1 \rangle. \quad (3)$$

Вычислим дисперсию энергии системы:

$$\sigma_{tot}^2 = \langle \Delta E_{tot}^2 \rangle = \left\langle \sum_i \Delta E_i \sum_j \Delta E_j \right\rangle = \sum_i \langle (\Delta E_i)^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \langle \Delta E_i \Delta E_j \rangle. \quad (4)$$

Поскольку дисперсии у всех подсистем — одинаковые, а корреляции флуктуаций независимых подсистем равны нулю, то

$$\sigma_{tot}^2 = M\sigma_1^2. \quad (5)$$

Отсюда находим, что относительная флуктуация энергии системы, равная

$$\frac{\sigma_{tot}}{\bar{E}_{tot}} = \frac{\sigma_1}{\bar{E}_1 \sqrt{M}}, \quad (6)$$

очень мала, если $M \gg 1$. Очевидно, что этот результат, который в математической статистике называется *законом больших чисел*, справедлив для любой физической величины.

Большинство результатов статистической физики формулируются в термодинамическом пределе. *Термодинамический предел* — это предел $E, V, N, M \rightarrow \infty$ при сохранении плотности энергии E/V и плотности частиц N/V . В этом пределе физические величины не флуктуируют. Конкретные расчеты удобнее проводить при большом, но конечном значении объема системы. А переход к термодинамическому пределу производится в конечных формулах.

Из закона больших чисел следует, что

1. Однократное измерение любой физической величины, характеризующей макроскопическую систему, дает результат, близкий к среднему значению этой величины. Это позволяет доверять описанию экспериментального исследования, опубликованного в одной-двух работах, и не ждать многократного повторения эксперимента.

2. Чтобы *предсказать* результат измерения любой физической величины макроскопической системы достаточно вычислить ее среднее значение.

2.3 Число состояний, плотность числа состояний

Равновесное состояние макроскопической системы полностью описывается термодинамическими величинами — аддитивными интегралами движения и функциями от них. Рассмотрим однородную замкнутую систему, в которой объем и число частиц заданы, а остальные интегралы движения, такие как импульс, момент импульса, магнитный и электрический моменты, равны нулю. Тогда все термодинамические величины зависят только от энергии E , и задача статистической физики сводится к установлению явного вида этой зависимости, т.е. к определению температуры $T(E)$, давления $p(E)$ и химического потенциала $\mu(E)$ как функций от энергии.

В квантовой механике состояния замкнутой системы описываются уравнением Шредингера

$$H\Psi_\alpha = E_\alpha\Psi_\alpha. \quad (7)$$

Здесь H — гамильтониан системы. Вид волновой функции Ψ_α и энергия E_α однозначно задается "точкой" (фактически, набором квантовых чисел) α .

Как мы увидим ниже, при вычислении термодинамических величин возникают суммы вида

$$\sum_{\alpha} f(E_{\alpha}). \quad (8)$$

Чтобы вычислить это выражение следует сначала найти степень вырождения уровня E , т.е. число всех состояний, принадлежащих этому уровню $\Delta\Gamma(E)$, а затем взять сумму по уровням энергии. Это легко сделать, только если спектр энергии имеет эквидистантную структуру. В общем случае эту программу можно выполнить, введя понятие о плотности состояний. Из определения дельта-функции следует формула

$$f(E_{\alpha}) = \int dE f(E) \delta(E - E_{\alpha}). \quad (9)$$

Подставим это выражение в (8) и поменяем порядок интегрирования:

$$\sum_{\alpha} f(E_{\alpha}) = \int dE f(E) \frac{d\Gamma}{dE}, \quad (10)$$

где введено обозначение

$$\frac{d\Gamma}{dE} \equiv \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}). \quad (11)$$

Это — определение *плотности состояний системы*. Плотность состояний системы численно равна производной от величины

$$\Gamma(E) = \sum_{\alpha} \theta(E - E_{\alpha}), \quad (12)$$

которая есть полное *число состояний* в интервале от минимального значения, которое всегда можно принять равным нулю, до E :

Напомним, что функция Хевисайда равна $\theta(x) = 1$ при $x > 0$ и $\theta(x) = 0$ при $x < 0$, причем

$$\frac{d\theta(x)}{dx} = \delta(x) \quad (13)$$

Упомянутое выше число состояний с энергией E связано с плотностью состояний очевидным соотношением:

$$\Delta\Gamma(E) = \frac{d\Gamma}{dE} \Delta E, \quad (14)$$

где ΔE есть расстояние между уровнями системы.

В макроскопической системе число состояний $\Delta\Gamma(E)$ с энергией E очень быстро растет с ростом энергии (соответственно, быстро растет и число состояний $\Gamma(E)$ с энергией от нуля до E). Рассмотрим простейший пример — N спинов $S = 1/2$ в магнитном поле. Состояние с минимальной энергией только одно — все спины направлены по полю. Следующий уровень энергии соответствует одному перевернутому спину, на этом уровне N состояний (перевернуть можно любой из N спинов). Два перевернутых спина можно получить уже $\frac{N(N-1)}{2}$ способами и т.д.

2.4 Статистическая энтропия

В статистической физике энтропия определяется как логарифм числа состояний

$$\sigma(E) = \ln \Gamma(E) \quad (15)$$

Обратно, число состояний равно

$$\Gamma(E) = e^{\sigma(E)}. \quad (16)$$

Для макроскопической системы эта величина практически совпадает с логарифмом числа состояний с энергией E (14):

$$\sigma^*(E) = \ln \Delta\Gamma \quad (17)$$

Действительно, из формулы (16) находим

$$\ln \Delta\Gamma = \ln \left(\frac{d\Gamma}{dE} \Delta E \right) = \ln \left(e^{\sigma(E)} \frac{d\sigma}{dE} \Delta E \right) = \sigma(E) + \ln \left(\frac{d\sigma}{dE} \Delta E \right) \quad (18)$$

Под знаком логарифма стоит макроскопическая величина. Этот логарифм относится к макроскопической величине $\sigma(E)$ как $\ln N$ к N . Поэтому, опустив в (18) логарифм, мы допустим исчезающе малую ошибку. В результате получаем равенство

$$\ln \Delta\Gamma = \ln \Gamma \quad (19)$$

При вычислении энтропии конкретных макроскопических тел с одинаковой точностью можно использовать любую из формул (15) или (17). Формула (19) есть один из многочисленных примеров, когда две разные макроскопически большие величины имеют одинаковые логарифмы. В подобных случаях говорят о равенстве величин в логарифмическом приближении. Имея в виду непривычность этого равенства, приведем другой вывод, который, возможно, сделает его более понятным.

Число состояний $\Gamma(E)$ тождественно равно интегралу

$$\Gamma(E) = \int_0^E dE' \frac{d\Gamma}{dE'}$$

Используя определение (17), перепишем его в виде

$$\Gamma(E) = \int_0^E dE' e^{\sigma^*} \frac{1}{\Delta E}$$

Подинтегральное выражение максимально на верхней границе интегрирования. Разлагая показатель экспоненты по отклонению от верхнего предела, легко находим

$$\Gamma(E) = \frac{1}{\Delta E \frac{d\sigma^*}{dE}} e^{\sigma^*(E)} \quad (20)$$

Логарифмируя это уравнение, получаем

$$\sigma(E) = \ln \Gamma(E) = \sigma^*(E) - \ln \left(\Delta E \frac{d\sigma^*}{dE} \right) \quad (21)$$

Как и в (18), последним логарифмом можно пренебречь и, следовательно, $\sigma^* = \sigma$.

Наконец, приведем еще одно обоснование того, что с логарифмической точностью $\sigma(E) = \sigma^*(E)$. Пусть (это основное предположение о зависимости $\Gamma(E)$ от числа частиц)

$$\Gamma(E) \sim \exp(N\varphi(E/N)), \quad (22)$$

где $\varphi(E/N)$ – величина порядка единицы. Кроме того,

$$\varphi > 0, \quad \varphi' > 0, \quad \varphi'' < 0. \quad (23)$$

Здесь штрих – дифференцирование по (E/N) . Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E} &= \varphi' \exp(N\varphi) \\ \frac{\partial^2 \Gamma(E)}{\partial E^2} &= \exp(N\varphi) \left((\varphi')^2 + \frac{\varphi''}{N} \right) \approx \exp(N\varphi) \left((\varphi')^2 \right) > 0 \end{aligned} \quad (24)$$

Имеем

$$\Delta \Gamma = \Delta E \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E} < \Gamma(E) < \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E} E$$

Левое неравенство всегда верно, так как слева стоит число состояний в узкой корочке E , которое, конечно же меньше, чем $\Gamma(E)$. Правое неравенство очевидно, так как $\frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E}$ – растущая функция E (см. (24)) и это неравенство есть сильно завышенная оценка сверху.

С одной стороны (см. (22), (24)), $\sigma = \ln \Gamma(E) \sim \sigma_* = \ln \Delta \Gamma(E) \sim N$, так как $\varphi' \sim 1$. С другой стороны

$$|\sigma - \sigma_*| \leq \left| \ln \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E} E - \ln \Delta E \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E} \right| = |\ln(E/\Delta E)| \sim \ln N$$

Отсюда следует, что с логарифмической точностью $\sigma = \sigma_*$.

Статистическая энтропия систем с большим числом степеней свободы монотонно растет с ростом энергии. Это означает, что она обладает свойствами

$$(a) \quad \sigma|_{E=0} = \min, \quad (25)$$

$$(b) \quad \beta = \frac{d\sigma}{dE} > 0, \quad (26)$$

Менее тривиальное свойство статистической энтропии выражается неравенством

$$(c) \quad \frac{d^2 \sigma}{d^2 E} < 0. \quad (27)$$

Отрицательность второй производной $\sigma(E)$ по энергии необходима для сходимости последующих интегралов по энергии. Существуют механические системы, у

которых это свойство не выполняется, но для таких систем отсутствует состояние устойчивого термодинамического равновесия, и они распадаются. Например, для космического тела — черной дыры $\sigma \sim E^2$, и вторая производная от статистической энтропии положительна. Это находится в соответствии с особенностью эволюции черных дыр: большие дыры неограниченно растут, а малые испаряются за конечное время. Таким же свойством обладают зародыши новой фазы — например, пузырьки пара в кипящей воде.

Кроме того, статистическая энтропия есть **аддитивная величина**.

Докажем последнее утверждение. Пусть система составлена из двух независимых подсистем A и B , и ее состояния в точке $\alpha = (a, b)$ имеет энергию $E_\alpha = E_a + E_b$. Число состояний (12) такой системы равно

$$\Gamma_{AB}(E) = \sum_a \sum_b \theta(E - E_a - E_b). \quad (28)$$

Здесь сумма по b образует число состояний подсистемы B с энергией $(E - E_a)$. Получаем

$$\Gamma_{AB}(E) = \sum_a \Gamma_b(E - E_a). \quad (29)$$

Принимая во внимание предыдущие формулы, перепишем эту сумму в виде

$$\Gamma_{AB}(E) = \int dE_a \frac{d\Gamma_a}{dE_a} e^{\sigma_b(E-E_a)} = \int dE_a \left(e^{\sigma_a(E_a)} \frac{d\sigma_a}{dE_a} \right) e^{\sigma_b(E-E_a)} = \int dE_a \beta_a e^f \quad (30)$$

$$f(E_a) = \sigma_a(E_a) + \sigma_b(E - E_a) \quad (31)$$

Величина $f(E_a)$ макроскопически велика и резко зависит от энергии E_a . Это позволяет взять интеграл методом перевала. Функция f имеет острый максимум в точке $E_a = E^m$, в которой

$$\left. \frac{df}{dE_a} \right|_{E^m} = \beta_a - \beta_b = 0 \quad (32)$$

Разложим функцию f около ее максимума

$$f = f^m + \frac{1}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} x^2, \quad x = E_a - E^m. \quad (33)$$

Вторая производная $f'' = \left(\frac{d^2 \sigma}{d^2 E} \right)_a + \left(\frac{d^2 \sigma}{d^2 E} \right)_b$ отрицательна в силу (27). Подставим разложение (33) в (30) и вынесем предэкспоненциальный множитель в точке (32):

$$\Gamma(E) = \beta_a e^{f^m} \int dx e^{-\frac{1}{2} |f''| x^2}. \quad (34)$$

Последний интеграл равен $\sqrt{2\pi / |f''|}$. В результате получаем

$$\sigma_{AB}(E) = \ln \Gamma_{AB}(E) = \sigma_a(E_a^m) + \sigma_b(E_b^m) + \ln \left(\beta \sqrt{\frac{2\pi}{|f''|}} \right). \quad (35)$$

Опять пренебрегаем логарифмом. Тогда логарифм числа состояний составной макроскопической системы принимает явно аддитивную форму

$$(d) \quad \sigma_{AB}(E) = \sigma_a(E_a^m) + \sigma_b(E_b^m). \quad (36)$$

Таким образом, квантовомеханическая величина $\sigma(E)$, которая называется *статистической энтропией Больцмана*, обладает всеми свойствами термодинамической энтропии: она минимальна в основном состоянии системы (*a*), монотонно растет с ростом энергии (*b*), ее вторая производная по энергии отрицательна (*c*) и, наконец, это — аддитивная величина (*d*). Более того, статистическая энтропия составной системы $\sigma_{AB}(E)$ обладает свойством экстремальности — она равна максимальному значению суммы статистических энтропий подсистем, причем полная энергия системы разделяется по подсистемам так, что производные от статистических энтропий подсистем по энергии равны друг другу (см.(32)). По этой причине величина β^{-1} , обратная производной от статистической энтропии по энергии, называется *статистической температурой* τ :

$$\frac{d\sigma}{dE} = \frac{1}{\tau} \quad (37)$$

2.5 Три примера

Найдем число состояний Γ (или $\Delta\Gamma$) и статистическую энтропию σ для нескольких простейших макроскопических систем.

2.5.1 N спинов в магнитном поле

Систему N спинов $S = \frac{1}{2}$, находящихся в магнитном поле B , будем описывать гамильтонианом

$$H = -2\mu B \sum_{i=1}^N \left(s_i^z - \frac{1}{2} \right). \quad (38)$$

Энергия одного спина в магнитном поле, равная $-2\mu B s^z$ ($s^z = \pm \frac{1}{2}$), сдвинута на константу, чтобы минимальная энергия была равна нулю. Если $(N - M)$ спинов находятся в основном состоянии ($s^z = 1/2$), а M спинов — в возбужденном ($s^z = -1/2$), то система имеет энергию $E = M\Delta E$, где $\Delta E = 2\mu B$. Такая энергия может быть получена числом способов, равным

$$\Delta\Gamma_M = \frac{N!}{M!(N-M)!}. \quad (39)$$

При больших значениях аргумента по формуле Стирлинга факториал приближенно равен

$$N! \approx (N/e)^N, \quad (40)$$

и выражение (39) принимает вид

$$\Delta\Gamma = \left(\frac{N}{e} \right)^N \left(\frac{e}{M} \right)^M \left(\frac{e}{N-M} \right)^{N-M} = \frac{N^N}{M^M (N-M)^{N-M}}. \quad (41)$$

Логарифм этой величины можно представить в форме

$$\sigma^* = \ln \Delta\Gamma = -N(n \ln(n) + (1 - n) \ln(1 - n)) \quad (42)$$

Величина

$$n = \frac{M}{N} = \frac{E}{(N\Delta E)} \quad (43)$$

имеет смысл концентрации возбужденных спинов.

Кроме самой статистической энтропии важными характеристиками системы являются ее производные по энергии. Для рассмотренного примера они равны:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{d\sigma}{dE} = \frac{1}{\Delta E} \ln \left(\frac{1 - n}{n} \right), \quad (44)$$

$$\frac{d^2\sigma}{dE^2} = -\frac{1}{N(\Delta E)^2 n(1 - n)}. \quad (45)$$

Обратим внимание, что с ростом среднего числа возбужденных спинов n от нуля до половины температура τ растет от нуля до бесконечности, а при дальнейшем возрастании числа n (в интервале $1/2 < n < 1$) "температура" τ отрицательна. Состояние с отрицательной температурой возможно только для систем с конечным числом всех состояний системы. В данном случае это число равно 2^N .

2.5.2 N осцилляторов

Теперь рассмотрим число состояний с заданной энергией в системе N одинаковых осцилляторов. За вычетом энергии нулевых колебаний энергия системы равна

$$E = \Delta E \sum_{i=1}^N n_i, \quad \Delta E = \hbar\omega. \quad (46)$$

где n_i - номер возбуждения i -того осциллятора. Это значение энергии может быть получено числом способов, которое следует из комбинаторики

$$\frac{(N + M - 1)!}{(N - 1)!M!} \approx \frac{(N + M)^{N+M}}{N^N M^M}. \quad (47)$$

Логарифм этого числа (который, как мы уже знаем, есть статистическая энтропия системы) равен

$$\sigma = \ln \Delta\Gamma = N(-n \ln(n) + (1 + n) \ln(1 + n)), \quad n = \frac{M}{N}. \quad (48)$$

И здесь $n = M/N = E/(N\Delta E)$ — среднее число возбуждений, приходящихся на один осциллятор. Производные статистической энтропии (48) равны

$$\frac{d\sigma}{dE} = \frac{1}{\Delta E} \ln \left(\frac{1 + n}{n} \right), \quad (49)$$

$$\frac{d^2\sigma}{dE^2} = -\frac{1}{N(\Delta E)^2 n(1 + n)}. \quad (50)$$

Число состояний системы осцилляторов бесконечно, и состояния с отрицательной температурой отсутствуют.

2.5.3 Идеальный газ

Последний пример — вычисление числа состояний для идеального газа с числом частиц N и объемом V . Поступательное движение частиц всегда квазиклассично. В классической механике состояние системы характеризуется точкой в $6N$ -мерном фазовом пространстве

$$\alpha = (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N) \quad (51)$$

Число точек в элементе 6-мерного фазового объема $dr^3 dp^3$ согласно правилу Бора-Зоммерфельда равно отношению этого объема к $(2\pi\hbar)^3$. Обобщение этого правила на случай N одинаковых частиц дает дифференциал числа состояний

$$d\Gamma_\alpha = \frac{1}{N!} \prod_{i=1}^N \frac{d^3 r_i d^3 p_i}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (52)$$

Произведение дифференциалов поделено на $N!$ для того, чтобы все конфигурации, положения частиц в $6N$ -мерном фазовом пространстве, отличающиеся друг от друга лишь перестановками тождественных частиц, учитывались только один раз. С помощью (52) произвольная сумма по состояниям может быть представлена в форме интеграла

$$\sum_\alpha F_\alpha = \int d\Gamma_\alpha F_\alpha. \quad (53)$$

Полное число состояний — число точек в $6N$ -мерном пространстве с энергией

$$E_\alpha = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} \quad (54)$$

в интервале между 0 и E выражается интегралом (см.(12)):

$$\Gamma(E) = \int d\Gamma_\alpha \theta(E - E_\alpha) = \frac{1}{N!} \int \prod_{i=1}^N \frac{d^3 r_i d^3 p_i}{(2\pi\hbar)^3} \theta\left(E - \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}\right). \quad (55)$$

Интегрирование по пространственным координатам каждой частицы дает объем V , и с учетом формулы Стильтьеса получаем

$$\Gamma(E) = \left(\frac{Ve}{N(2\pi\hbar)^3}\right)^N J_{3N}(E), \quad (56)$$

$$J_{3N}(E) = \int \prod_{i=1}^N d^3 p_i \theta\left(E - \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}\right). \quad (57)$$

Введем обозначение $E = P^2/2m$, сократим в аргументе θ -функции множитель $1/2m$, и перепишем интеграл (57) в форме объема $3N$ -мерного шара радиуса P :

$$J_{3N}(E) = V_{3N}(P) = \int d^{3N} p \theta\left(P^2 - \sum_{i=1}^N p_i^2\right). \quad (58)$$

Объем многомерного шара равен

$$V_n(R) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} R^n \approx \left(\frac{2e\pi R^2}{n} \right)^{\frac{n}{2}}. \quad (59)$$

Используя эту формулу, находим логарифм числа состояний (56), т. е. статистическую энтропию идеального газа:

$$\sigma(E) = \ln \Gamma(E) = N \ln \left[\frac{Ve}{N(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{4\pi emE}{3N} \right)^{\frac{3}{2}} \right].$$

Производная от статистической энтропии по энергии определяет обратную статистическую температуру идеального газа (см. (37)):

$$\frac{1}{\tau} = \frac{d\sigma}{dE} = \frac{3N}{2E}, \quad \tau = \frac{2E}{3N}. \quad (60)$$

Но с другой стороны в лекции по термодинамике формулой для энергии идеального газа

$$E = \frac{3}{2}NT \quad (61)$$

определена шкала термодинамической температуры T . Отсюда следует, что $\tau = T$, т.е. статистическая температура есть обычная температура, а статистическая энтропия, связанная с температурой формулой (37), есть термодинамическая энтропия макроскопического тела.

Вторая производная статистической энтропии равна

$$\frac{d^2\sigma}{dE^2} = -\frac{3N}{2E^2}. \quad (62)$$

Таким образом, во всех рассмотренных примерах вторая производная статистической энтропии по энергии, как и должно быть, отрицательна и по порядку величины равна отношению $-N/E^2$. Для квантовых систем (см. (45), (50)), находящихся в слабо возбужденных состояниях, эта оценка несколько меняется:

$$\frac{d^2\sigma}{dE^2} \sim -1/E, \quad n \ll 1. \quad (63)$$

3 Лекция 3. О статсумме, распределениях...

3.1 Статистическая сумма

На предыдущей лекции было доказано, что энтропия макроскопической системы равна логарифму от числа состояний. Зная энтропию σ как функцию энергии, можно найти температуру и другие термодинамические величины. Однако вычислить число состояний

$$\Gamma = \sum_{\alpha} \theta(E - E_{\alpha}), \quad (1)$$

или плотность состояний системы

$$\frac{d\Gamma}{dE} = \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}) \quad (2)$$

сложно из-за наличия в них θ - или δ - функций, которые накладывают жесткие ограничения на суммарную энергию системы. Более удобной для вычислений величиной является, так называемая статистическая сумма

$$Z(\beta) = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}}, \quad \beta > 0. \quad (3)$$

Статистическая сумма равна образу Лапласа от плотности состояний

$$\int_0^{\infty} dE e^{-\beta E} \frac{d\Gamma}{dE} = \int_0^{\infty} dE e^{-\beta E} \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}) = Z(\beta). \quad (4)$$

Поскольку

$$\Gamma = e^{\sigma}, \quad \frac{d\Gamma}{dE} = \frac{d}{dE} e^{\sigma} = e^{\sigma} \frac{d\sigma}{dE}, \quad (5)$$

то статистическую сумму можно представить в форме интеграла

$$Z(\beta) = \int_0^{\infty} dE e^{\sigma - \beta E} \frac{d\sigma}{dE}, \quad (6)$$

Интеграл такого типа мы уже брали на предыдущей лекции. Разложим показатель экспоненты $f = \sigma - \beta E$ в ряд около точки E_m и ограничимся квадратичным приближением:

$$f(E) = f_m + f'_m x + \frac{1}{2} f''_m x^2, \quad x = E - E_m. \quad (7)$$

Точка E_m определяет максимум функции, если

$$f' = \frac{d\sigma}{dE} - \beta = 0, \quad (8)$$

$$f'' = \frac{d^2\sigma}{dE^2} < 0. \quad (9)$$

Неравенство (9) выражает одно из основных свойств статистической энтропии σ . Оно выполняется во всех трех примерах, рассмотренных на предыдущей лекции. В общем случае это условие является необходимым признаком возможности установления термодинамического равновесия в системе.

Итак, если выбрать в качестве E_m положение максимума функции (7), то с учетом знака f'' имеем

$$f(E) = f_m - \frac{1}{2} |f''| x^2, \quad (10)$$

и интеграл (6) принимает вид

$$Z(\beta) = e^{f_m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d\sigma}{dE} e^{-\frac{1}{2}|f''|x^2}, \quad (11)$$

Как показано в конце предыдущей лекции, $|\sigma''| \sim N/E^2$ или $1/E$, и подинтегральная экспонента имеет резкий максимум в точке E_m с шириной

$$\Delta E = (\sigma'')^{-\frac{1}{2}} \ll E. \quad (12)$$

Поэтому нижний предел интегрирования в (11) заменен на $-\infty$. По этой же причине предэкспоненциальный множитель можно вынести (с учетом (8)) из под знака интеграла и привести интеграл к форме Гаусса:

$$Z(\beta) = \beta e^{f_m} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}|f''|x^2}. \quad (13)$$

После интегрирования получаем

$$Z(\beta) = \beta e^{f_m} \sqrt{\frac{2\pi}{|f''|}}. \quad (14)$$

Логарифмируя, находим

$$\ln Z(\beta) = \sigma(E_m) - \beta E_m + \ln \left[\beta \sqrt{\frac{2\pi}{|\sigma''|}} \right]. \quad (15)$$

Для макроскопических систем два первых аддитивных члена справа велики по сравнению с последним логарифмом, и им можно пренебречь. Таким образом, логарифм статистической суммы в макроскопическом пределе равен

$$\ln Z(\beta) = \sigma(E_m) - \beta E_m. \quad (16)$$

Для системы, составленной из двух независимых подсистем A и B , энергия которой в точке $\alpha = (a, b)$ равна $E_\alpha = E_a + E_b$, статистическая сумма распадается на множители:

$$Z_{A,B}(\beta) = \sum_{a,b} e^{-\beta(E_a+E_b)} = Z_A(\beta)Z_B(\beta). \quad (17)$$

Отсюда непосредственно следует аддитивность логарифма статистической суммы

$$\ln Z_{A,B}(\beta) = \ln Z_A(\beta) + \ln Z_B(\beta). \quad (18)$$

Поэтому формулу (16) можно читать в обе стороны. Если принять во внимание доказанную на предыдущей лекции аддитивность σ (аддитивность энергии не обсуждается), формула (16) демонстрирует аддитивность $\ln Z$. Но если опираться на доказанную в (18) аддитивность $\ln Z$, то (16) переносит это свойство на статистическую энтропию.

Кроме того, из (8) и (17) получаем

$$\left. \frac{d\sigma}{dE} \right|_{AB} = \left. \frac{d\sigma}{dE} \right|_A = \left. \frac{d\sigma}{dE} \right|_B = \beta. \quad (19)$$

Последняя цепочка равенств означает, что производные от статистических энтропий по энергии для подсистем и от полной энтропии одинаковы и равны β .

Это доказывает, что аргумент статистической суммы (3) β имеет смысл обратной термодинамической температуры:

$$T = \frac{1}{\beta}. \quad (20)$$

а статистическая энтропия есть термодинамическая энтропия

$$\sigma(E_m) = S(E_m), \quad (21)$$

причем $E_m = E(T)$ есть энергия тела при температуре T .

Умножим обе стороны равенства (16) на T :

$$T \ln Z(\beta) = T\sigma(E_m) - E_m, \quad (22)$$

С учетом термодинамического смысла величин, входящих в это уравнение, переписем его в виде

$$T \ln Z \left(\frac{1}{T} \right) = TS - E, \quad (23)$$

Эта формула доказывает, что термодинамический потенциал — свободная энергия $F = E - TS$ - равен

$$F = -T \ln Z \left(\frac{1}{T} \right), \quad (24)$$

Это главная формула статистической физики. Она дает единый алгоритм вычисления всех термодинамических величин:

1. Вначале следует задать гамильтониан системы и решить кватомеханическую задачу — найти вид спектра энергии E_α .

2. Зная энергетический спектр, следует вычислить статистическую сумму (3).

3. После этого по формуле (24) определяем свободную энергию, производные от которой задают все остальные термодинамические величины.

3.2 Функция распределения

Выше при установлении связи между "механическими" величинами — σ, τ, Z и термодинамическими — S, T, F из математической статистики был использован только закон больших чисел. Для более глубокого понимания статистической физики следует использовать основные понятия теории вероятностей и математической статистики — вероятность события и функцию распределения.

Функция распределения w_α есть функция точки α и равна в этой точке вероятности того, что тело находится в механическом состоянии, характеризуемом набором квантовых чисел α . Если физическая величина A в точке α принимает значение A_α , то ее среднее значение равно

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha} w_{\alpha} A_{\alpha}. \quad (25)$$

Полагая в этом выражении $A = 1$, находим, что функция распределения нормируется соотношением

$$\sum_{\alpha} w_{\alpha} = 1. \quad (26)$$

Если физическая величина описывается эрмитовым оператором \hat{A} , который в представлении α имеет недиагональные элементы, то вместо (25) следует писать выражение более общего вида

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha\beta} \rho_{\alpha\beta} A_{\beta\alpha} = Sp(\hat{\rho}\hat{A}). \quad (27)$$

Эрмитов оператор $\hat{\rho}$, след которого равен единице

$$Sp\hat{\rho} = 1, \quad (28)$$

называется *матрицей плотности* или статистическим оператором.

Матрица плотности и ее диагональная часть — функция распределения — дают полное описание *статистического состояния* тела, так как они определяют средние значения всех физических величин, которые зависят от этого состояния.

Таким образом, если механическое состояние есть точка в фазовом пространстве, или полный набор квантовых чисел, или волновая функция, то статистическое состояние — это совокупность, множество механических состояний, размытых по некоторой области фазового или гильбертового пространства.

Пусть система находится в заданном механическом состоянии α_0 . Тогда

$$\rho_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} w_{\alpha}, \quad w_{\alpha} = \delta_{\alpha\alpha_0}. \quad (29)$$

Такое статистическое состояние полностью определяется соответствующей волновой функцией Ψ_{α_0} и называется чистым или когерентным состоянием.

Эволюция матрицы плотности замкнутой системы во времени описывается уравнением Лиувилля. Напомним, как оно выводится в курсе квантовой механики. В представлении Гайзенберга волновые функции и матрица плотности замкнутой системы от времени не зависят, и зависимость от времени переносится на операторы:

$$\hat{A}(t) = e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A} e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}. \quad (30)$$

При этом зависимость от времени величины $\langle A \rangle$ задается уравнением

$$\langle A \rangle = Sp(\hat{\rho}\hat{A}(t)) = Sp\left(\hat{\rho}e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A} e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}\right). \quad (31)$$

Под знаком шпура можно произвести циклическую перестановку, не меняя величины следа от произведения матриц. Поэтому формула (31) может быть представлена в видоизмененной форме

$$\langle A \rangle = Sp(e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{\rho} e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A}) = Sp(\hat{\rho}(t)\hat{A}). \quad (32)$$

Последнее выражение есть запись среднего значения величины A в представлении Шредингера, в котором оператор \hat{A} от времени не зависит, а зависимость от времени перенесена на матрицу плотности:

$$\rho(t) = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{\rho} e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}. \quad (33)$$

Дифференцирование этого выражения по времени приводит к уравнению Лиувилля:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (34)$$

Здесь $[f, g] \equiv fg - gf$. В классическом пределе правая часть уравнения Лиувилля принимает вид скобок Пуассона, но мы классическую форму уравнения Лиувилля использовать не будем.

Из уравнения Лиувилля следует, что матрица плотности стационарного равновесного состояния коммутирует с гамильтонианом:

$$[\hat{H}, \hat{\rho}] = 0. \quad (35)$$

Это есть квантовомеханическая формулировка того, что равновесная матрица плотности является *интегралом движения*.

Два оператора, которые коммутируют друг с другом, имеют общую систему собственных функций $\{\Psi_\alpha\}$. Поэтому равновесная матрица плотности в представлении собственных функций гамильтониана диагональна и сводится к функции распределения — набору диагональных элементов.

Вероятности независимых событий перемножаются. Это означает, что вероятность обнаружения системы, состоящей из p независимых подсистем в состоянии $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p)$ равна произведению

$$w_\alpha = w_{\alpha_1} w_{\alpha_2} \dots w_{\alpha_p}. \quad (36)$$

Логарифмируя, получаем свойство *аддитивности* логарифма равновесной функции распределения:

$$\ln w_\alpha = \ln w_{\alpha_1} + \ln w_{\alpha_2} + \dots + \ln w_{\alpha_p}. \quad (37)$$

Объединяя (35) и (37), приходим к очень важному результату — логарифм равновесной функции распределения есть *аддитивный интеграл движения*. У механической системы существует не более 7 независимых аддитивных интегралов движения: энергия, три компоненты импульса и три компоненты момента импульса. Мы будем рассматривать только такие тела, которые неподвижны и не вращаются. Тогда остается один единственный аддитивный интеграл движения — энергия, а все другие аддитивные сохраняющиеся величины должны быть линейными функциями энергии. Отсюда следует, что

$$\ln w_\alpha = A + BE_\alpha, \quad (38)$$

а сама равновесная функция распределения должна иметь вид

$$w_\alpha = e^{(A+BE_\alpha)}. \quad (39)$$

Подставим это выражение в (26):

$$\sum_{\alpha} e^{(A+BE_\alpha)} = 1. \quad (40)$$

Чтобы эта сумма сходилась при больших энергиях, необходимо, чтобы коэффициент B был отрицательным. Положим $B = -\beta, \beta > 0$ и вынесем e^A за знак суммы:

$$e^A \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} = 1. \quad (41)$$

Из этой формулы находим связь константы A с логарифмом от статистической суммы (3):

$$A = -\ln Z(\beta). \quad (42)$$

Выше было доказано, что аргумент статистической суммы β имеет смысл обратной термодинамической температуры (см.(20)), а логарифм статистической суммы непосредственно связан со свободной энергией (см. (24)). Это дает возможность переписать равновесную функцию распределения (39) в окончательной форме

$$w_{\alpha} = e^{\frac{F-E_{\alpha}}{T}}. \quad (43)$$

Выражение (43) называется статистическим распределением Гиббса или каноническим распределением. Главное свойство распределения Гиббса - все механические состояния α с одинаковой энергией равновероятны. В представлении общего вида, в котором гамильтониан имеет недиагональные матричные элементы, распределение Гиббса превращается в матрицу плотности

$$\hat{\rho} = e^{\frac{F-\hat{H}}{T}}. \quad (44)$$

В качестве примера непосредственного применения распределения Гиббса вычислим среднее значение энергии системы и ее дисперсию:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_{\alpha} w_{\alpha} E_{\alpha} = \\ \frac{\sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} E_{\alpha}}{\sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}}} &= -\frac{1}{Z} \frac{dZ}{d\beta} = -\frac{d \ln Z}{d\beta} = -T^2 \frac{d}{dT} \frac{F}{T} = F + TS. \end{aligned} \quad (45)$$

Заметим, что это вычисление дает новое и более простое доказательство формулы (24). Далее

$$\langle E^2 \rangle = \sum_{\alpha} w_{\alpha} E_{\alpha}^2 = \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{d\beta^2}, \quad (46)$$

Разность предыдущих выражений образует дисперсию:

$$\begin{aligned} \langle \Delta E^2 \rangle &= \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \\ \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{d\beta^2} - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{dZ}{d\beta} \right)^2 &= \frac{d}{d\beta} \left(\frac{1}{Z} \frac{dZ}{d\beta} \right) = \\ -\frac{d}{d\beta} \langle E \rangle &= T^2 \frac{dE}{dT} = T^2 C_V. \end{aligned} \quad (47)$$

Среднее значение любой функции $A(E)$ от энергии системы в равновесном состоянии вычисляется по формуле

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha} w(E_{\alpha}) A(E_{\alpha}) = \int dE \frac{d\Gamma}{dE} w(E) A(E) = \int dE f(E) A(E), \quad (48)$$

где функция

$$f(E) = \frac{d\Gamma}{dE} w(E) \quad (49)$$

имеет смысл вероятности обнаружить при измерении равновесной системы данное значение энергии. Другими словами, это есть распределение по энергии (а формула Гиббса — это распределение по α -состояниям). Распределение по энергии равно произведению монотонно растущей плотности по энергии и монотонно убывающего распределения Гиббса. Легко заметить, что это произведение с точностью до постоянного множителя совпадает с ядром статистической суммы (6) и имеет острый максимум в точке E^m . Функция в окрестности максимума описывается распределением Гаусса:

$$f(E) \sim e^{-\frac{1}{2} |\sigma''| (E-E_m)^2}. \quad (50)$$

с очень узкой шириной ΔE , для которой мы можем теперь дать точную термодинамическую оценку:

$$\Delta E^2 = \frac{1}{|\sigma''|}, \quad |\sigma''| = \left| \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \right| = \frac{1}{T^2 C_V}, \quad \Delta E = T \sqrt{C_V}. \quad (51)$$

Не случайно, что эта ширина распределения по энергии равна дисперсии энергии системы (47).

Подставим (50) в последний интеграл (48):

$$\langle A \rangle = A(E_m). \quad (52)$$

Отсюда, в частности, имеем

$$\langle E \rangle = E_m. \quad (53)$$

При вычислении (52) важен не конкретный вид распределения (43), а только -чрезвычайная узость функции (50). Можно доказать следующую теорему Каца:

Для вычисления средних значений физических величин в термодинамическом пределе ($E, V, N \rightarrow \infty$, но $E/V = const, N/V = const$) в качестве равновесной функции распределения можно использовать любую положительную функцию, нормированную на единицу и спадающую при больших энергиях быстрее, чем $\frac{d\Gamma}{dE}$.

Поэтому в качестве равновесной функции распределения замкнутой системы часто выбирают микроканоническое распределение

$$w(E_{\alpha}) = const \delta(E - E_{\alpha}), \quad (54)$$

или функцию

$$w(E_\alpha) = \text{const} \theta(E - E_\alpha), \quad (55)$$

или даже чистое состояние

$$w_\alpha = \delta_{\alpha, \alpha_0}, \quad (56)$$

но при этом теряется основное преимущество распределения Гиббса — отсутствие жестких ограничений на величину энергии системы.

3.3 Неравновесная энтропия

Выше были даны две формулировки энтропии равновесного состояния. Термодинамическое определение

$$S(E) = \int_0^E \frac{dE}{T(E)} \quad (57)$$

и статистическое определение Больцмана

$$S(E) = \ln \Gamma(E) = \ln \Delta \Gamma. \quad (58)$$

Еще одно выражение для равновесной энтропии возникает в результате усреднения распределения Гиббса (43):

$$\langle \ln w \rangle = \frac{F - \langle E \rangle}{T} = -S. \quad (59)$$

Следовательно, энтропия равновесного состояния равна

$$S = - \langle \ln w \rangle = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \ln w_{\alpha}, \quad (60)$$

или в операторном виде

$$S = -Sp(\rho \ln \rho). \quad (61)$$

Энтропия, определяемая как средний логарифм распределения (со знаком минус), называется энтропией Гиббса. Именно это выражение принимается в статистической физике в качестве обобщения на неравновесные системы, которое описывается функцией распределения или матрицей плотности общего вида.

Применим формулу (60) для вычисления неравновесной энтропии ферми- и бозе-газов.

В представлении чисел заполнения функция распределения газа имеет вид произведения одночастичных вероятностей $w(n_p)$ того, что импульс p имеют n_p частиц:

$$w_{\alpha} = w(n_{p_1}) w(n_{p_2}) w(n_{p_3}) \dots \quad (62)$$

Энтропия (60) этого распределения равна

$$\begin{aligned} S &= - \sum_{\alpha} w_{\alpha} \ln w_{\alpha} = \\ &= - \sum_{n_{p_1}} \sum_{n_{p_2}} \sum_{n_{p_3}} \dots \{w(n_{p_1})w(n_{p_2})w(n_{p_3})\dots\} \\ &\quad \{\ln w(n_{p_1}) + \ln w(n_{p_2}) + \ln w(n_{p_3}) + \dots\}. \end{aligned} \quad (63)$$

Суммирование последовательно по $n_{p_1}, n_{p_2}, n_{p_3}, \dots$ с учетом нормировки $\sum_{n_p} w(n_p) = 1$ дает:

$$S = - \left\{ \sum_{n_{p_1}} w(n_{p_1}) \ln w(n_{p_1}) + \sum_{n_{p_2}} w(n_{p_2}) \ln w(n_{p_2}) + \sum_{n_{p_3}} w(n_{p_3}) \ln w(n_{p_3}) + \dots \right\} \quad (64)$$

У ферми-газа на каждом одночастичном состоянии p не может находиться больше одной частицы. Поэтому каждая сумма по числам заполнения

$$- \sum_{n_p} w(n_p) \ln w(n_p). \quad (65)$$

имеет два члена

$$\sum_{n_p} w(n_p) \ln w(n_p) = w(0_p) \ln w(0_p) + w(1_p) \ln w(1_p). \quad (66)$$

Вероятность отсутствия частицы с импульсом p — $w(0_p)$ и вероятность обнаружить одну частицу с импульсом p — $w(1_p)$ можно выразить через среднее число заполнения:

$$\bar{n}_p = \sum_{n_p} w(n_p) n_p = w(1_p), \quad w(0_p) = 1 - w(1_p). \quad (67)$$

Сумма (65) принимает вид

$$-[(1 - \bar{n}_p) \ln(1 - \bar{n}_p) + \bar{n}_p \ln \bar{n}_p]. \quad (68)$$

В результате мы получаем выражение для неравновесной энтропии ферми газа

$$S = - \sum_p [(1 - \bar{n}_p) \ln(1 - \bar{n}_p) + \bar{n}_p \ln \bar{n}_p]. \quad (69)$$

В бозе-газе ситуация сложнее — числа заполнения уровня p принимают любое значение от нуля до бесконечности, и, в принципе, возможно любое распределение по числам заполнения. Чтобы выразить сумму (65) через один параметр — среднее число частиц на этом уровне, примем, что эта сумма имеет максимальное значение при заданном $\bar{n}(p)$. Этому требованию удовлетворяет вероятность

$$w(n) = (1 - q)q^n, \quad q = \frac{\bar{n}}{1 + \bar{n}}. \quad (70)$$

Вычисляя с помощью этого выражения сумму (65) и суммируя по импульсам, получаем неравновесную энтропию бозе-газа:

$$S = \sum_p [(1 + \bar{n}_p) \ln(1 + \bar{n}_p) - \bar{n}_p \ln \bar{n}_p]. \quad (71)$$

Если газ имеет высокую температуру, то частицы распределены по числу уровней, которое много больше числа частиц. Тогда $\bar{n}(p) \ll 1$, различие между

ферми- и бозе-газами становится несущественным, и формулы (69), (71) приводят к одинаковому выражению — энтропии неравновесного больцмановского газа

$$S = - \sum_p \bar{n}_p \ln \frac{\bar{n}_p}{e}. \quad (72)$$

Выражение (60) можно записать в форме Больцмана, если обобщить понятие числа состояний на неравновесный случай. Ограничимся неравновесными статистическими состояниями, каждое из которых равномерно распределено по механическим состояниям (точкам), имеющим энергию в интервале $(E, E + \Delta E)$ и расположено в ограниченной области M фазового (гильбертова) пространства, которая содержит $\Delta\Gamma$ точек. Такое статистическое состояние описывается распределением $w_\alpha = w_m$ для точек, в которых система находится с одинаковой вероятностью, и $w_\alpha = 0$ в остальных точках. Из условия нормировки находим

$$\sum_\alpha w_\alpha = w_m \Delta\Gamma = 1, \quad w_m = \frac{1}{\Delta\Gamma}. \quad (73)$$

Подставляя это распределение в (60), получаем неравновесную энтропию в форме Больцмана

$$S = - \langle \ln w \rangle = - \sum_{\alpha \in M} w_m \ln w_m = \sum_{\alpha \in M} w_m \ln \Delta\Gamma = \ln \Delta\Gamma, \quad (74)$$

4 Лекция 4. О законе возрастания энтропии...

4.1 Закон возрастания энтропии

Термодинамика постулирует, что неравновесная замкнутая система с течением времени релаксирует в состояние термодинамического равновесия, причем энтропия системы монотонно растет и достигает максимального значения в состоянии термодинамического равновесия. В статистической физике закон возрастания энтропии необходимо вывести из законов квантовой механики и математической статистики.

В статистической физике эволюция замкнутой системы описывается уравнением Лиувилля

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (1)$$

Используя это уравнение, найдем зависимость от времени энтропии Гиббса (61):

$$-\frac{\partial \langle \ln \hat{\rho} \rangle}{\partial t} = -Sp \left[\ln \hat{\rho} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} \right]. \quad (2)$$

Чтобы найти это выражение умножим (1) на $-\ln \hat{\rho}$ и возьмем след от обеих частей равенства

$$-\frac{\partial \langle \ln \hat{\rho} \rangle}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} Sp\{[\hat{H}, \hat{\rho}] \ln \hat{\rho}\} = -\frac{i}{\hbar} Sp\left\{\hat{H} [\hat{\rho}, \ln \hat{\rho}]\right\} = 0. \quad (3)$$

Итак, из уравнения Лиувилля следует, что энтропия замкнутой системы (1) сохраняется. Такой результат обусловлен тем, что оно описывает эволюцию матрицы плотности в предположении, что элемент статистической неопределенности достаточно ввести один раз — при формировании начального распределения, а дальнейшее движение системы идет по законам квантовой механики (см.(30)):

$$\rho_{ab}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_a - E_b)t} \rho_{ab}(0). \quad (4)$$

По сути дела, чтобы сравнить начальное и конечное состояния системы и их энтропии, следует конечное состояние измерить. При измерении вносятся дополнительные статистические операции — во первых необходимо усреднить по степени точности измерительной аппаратуры, во вторых следует учесть длительность эксперимента τ и, наконец, ошибку, вносимую неточностью определения момента времени, в который начиналось измерение τ' . Усреднение по приборным ошибкам мы рассматривать не будем, чтобы не заниматься проблемой конкретного измерения (хотя по этому предмету есть своя интересная наука). Усредним матрицу плотности (4) по времени измерения с помощью функции Гаусса

$$\langle \rho_{ab}(t) \rangle_{\tau} = \int dt' G(t', \tau) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_a - E_b)(t+t')} \rho_{ab}(0) = \rho_{ab}(t) e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{\tau(E_a - E_b)}{\hbar} \right)^2}. \quad (5)$$

Поскольку энергия системы — аддитивная величина, а масштаб "неопределенности энергии", вносимой конечным временем измерения τ очень мал, то после измерения ширина распределения матрицы плотности по энергии становится практически равной нулю и матрица плотности превращается в диагональную матрицу в представлении собственных функций гамильтониана системы. Фактически, измерение является излишним, поскольку ту же роль играет усреднение по точности часов. Точность любых часов ограниченная. Чем больше промежуток времени между начальным моментом времени $t = 0$ и моментом времени измерения t , тем больше неточность фиксации этого момента:

$$\tau' = \xi t. \quad (6)$$

Здесь ξ — численный параметр. Подставляя в (4) вместо величины τ величину τ' , получаем, что неточность часов приводит к монотонному и очень быстрому превращению неравновесной матрицы плотности в матрицу, диагональную по энергии.

Но процесс эволюции системы на этом не останавливается. При реальном описании механических состояний тела используются не представление собственных функций полного гамильтониана замкнутой системы, а представление собственных функций модельного гамильтониана. Например, в газе — это функции с фиксированными импульсами частиц $\alpha = (p_1, p_2, p_3, \dots)$. В результате взаимодействия между частицами эти функции превращаются в их сложную суперпозицию и начальное распределение w_{α} постепенно размывается по все большему числу

$\Delta\Gamma$ состояний с заданной энергией. Эволюция заканчивается, система приходит в равновесное статистическое состояние, когда система равномерно заполняет все точки фазового (гильбертового) пространства с фиксированной энергией, и логарифм числа состояний $\ln(\Delta\Gamma)$ — энтропия становится максимальной. Физически это проявляется как закон возрастания энтропии.

Проведенное выше обсуждение не доказывает возрастание энтропии, а лишь указывает направление, в котором это доказательство следует искать. На следующих лекциях при изучении кинетических явлений в некоторых простейших физических системах будет приведено количественное доказательство закона возрастания энтропии. Здесь же ограничимся демонстрацией того, что одночастичные равновесные распределения Ферми и Бозе, а также распределение Гиббса непосредственно следуют из требования максимальной энтропии в состоянии термодинамического равновесия. Для Ферми- или Бозе-газов следует искать условный экстремум выражений (69) или (71) при постоянных значениях полной энергии и полного числа частиц. Составим функционал Лагранжа:

$$L = + \sum_p [(\eta + n_p) \ln(1 + \eta n_p) - n_p \ln n_p] - \beta \sum_p n_p E_p - \gamma \sum_p n_p, \quad \eta = \pm 1. \quad (7)$$

Приравняем нулю производную от функционала по числу частиц с импульсом p :

$$\frac{\partial L}{\partial n_p} = \ln(1 + \eta n_p) - \ln n_p - \beta E_p - \gamma = 0. \quad (8)$$

Отсюда получаем при $\eta = 1$ распределение Бозе и при $\eta = -1$ — распределение Ферми:

$$n_p = \frac{1}{e^{\beta E_p - \gamma} - \eta}. \quad (9)$$

Теперь найдем экстремум энтропии Гиббса (61) при условии постоянства энергии системы и нормировки. Исходим из функционала

$$L = -Sp(\rho \ln \rho) - \beta Sp(\rho H) - \gamma Sp\rho. \quad (10)$$

Составляем вариацию

$$\delta L = -Sp\{\delta\rho(\ln \rho + 1 + \beta H + \gamma)\}. \quad (11)$$

Из равенства вариации нулю получаем выражение

$$\rho = e^{-(1+\gamma+\beta H)}, \quad (12)$$

которое с точностью до обозначений совпадает с каноническим распределением Гиббса (43).

4.2 Теорема Нернста

Согласно термодинамическому определению (57) энтропия основного состояния, энергия которого равна нулю (и $T=0$), тождественно равна нулю. Из статистического определения (58) минимальное значение энтропии определяется числом состояний $\Gamma(0)$ с минимальной энергией $E=0$. У большинства тел основное состояние является невырожденным — $\Gamma(0) = 1$, и

$$S(0) = \ln \Gamma(0) = 0. \quad (13)$$

Это равенство составляет содержание теоремы Нернста. Однако, в системе N невзаимодействующих спинов S энергия каждого спина в отсутствие магнитной энергии $(2S + 1)$ -кратно вырождена по направлениям спина. Энтропия этой системы не зависит ни от температуры, ни от давления и равна

$$S(0) = \ln \Gamma(0) = N \ln(2S + 1). \quad (14)$$

Обычно система невзаимодействующих спинов есть подсистема веществ с парамагнитными примесями. Энтропия парамагнетика равно сумме энтропий подсистем — спиновой, фононной и электронной. Энтропия фононной подсистемы пропорциональна T^3 , а электронной (в металлах) — T . Таким образом, полная энтропия парамагнетика при низких температурах равна

$$S(T) = \ln \Gamma(0) = N \ln(2S + 1) + AT^3 + BT. \quad (15)$$

Отсюда находим теплоемкость

$$C(T) = T \frac{\partial S}{\partial T} = 3AT^3 + BT. \quad (16)$$

В системах, которые имеют "щель" Δ в спектре элементарных возбуждений, энтропия и теплоемкость обращаются в нуль при $T \rightarrow 0$ по экспоненциальному закону

$$S(T) \sim C(T) \sim e^{-\frac{\Delta}{T}}. \quad (17)$$

Обращение теплоемкости в нуль при $T \rightarrow 0$ — важнейшее следствие теоремы Нернста.

На этом мы заканчиваем изложение основных положений термодинамики и статистической физики. Далее будет изложен "метод вторичного квантования", который еще понадобится, а на физтеховских курсах по квантовой механике обычно не изучается.

5 Лекция 5. Вторичное квантование колебаний решетки

5.1 Вторичное квантование колебаний решетки

В этой лекции будет коротко изложен полезный математический метод — "вторичное квантование", которое позволяет компактно формулировать свойства

многочастичных квантовомеханических систем. Суть этого метода заключается в описании систем многих частиц в представлении чисел заполнения. В курсе квантовой механики этот метод формулируется для задачи об одномерном осцилляторе.

Коротко напомним задачу о "вторичном квантовании" осциллятора. Гамильтониан одномерного осциллятора имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{M\omega^2 x^2}{2} \quad (1)$$

где коммутатор x и импульса $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ равен $[x, \hat{p}] = i\hbar$. Обезразмерим (1) на единицу энергии $\hbar\omega$.

$$\hat{h} = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} = \frac{1}{\hbar\omega M} \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{M\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2} \quad (2)$$

Возникли естественные единицы длины и импульса

$$p_0 = \sqrt{\hbar\omega M}; \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}; \quad p_0 x_0 = \hbar \quad (3)$$

и безразмерные переменные

$$\hat{P} = \frac{\hat{p}}{p_0}; \quad \hat{Q} = \frac{x}{x_0}$$

в которых безразмерный гамильтониан (2) принимает простой вид

$$\hat{h} = \frac{1}{2}(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2) \quad (4)$$

где коммутатор \hat{P} и \hat{Q} равен

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = \frac{[x, \hat{p}]}{p_0 x_0} = i \quad (5)$$

Квадратичную форму (4) можно факторизовать линейным преобразованием. Для обычных чисел такая факторизация элементарна $(a^2 + b^2) = (a + ib)(a - ib)$. Для операторов сделаем аналогичное преобразование, не забывая, однако, об их некоммутативности. Вводим неэрмитовы, сопряженные друг другу операторы

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{P}); \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - i\hat{P}) \quad (6)$$

Соответственно, обратное преобразование имеет вид

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^+); \quad \hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ - \hat{a}) \quad (7)$$

Это линейное преобразование приводит квадратичную форму (4) к виду

$$\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 = \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+ \quad (8)$$

Осталось выяснить коммутационные соотношения операторов \hat{a} и \hat{a}^+ .

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \frac{1}{2} [(\hat{Q} + i\hat{P}), (\hat{Q} - i\hat{P})] = \frac{i}{2} ([\hat{P}, \hat{Q}] - [\hat{Q}, \hat{P}]) = 1 \quad (9)$$

очевидно также, что $[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^+, \hat{a}^+] = 0$

Безразмерный гамильтониан (4) с учетом (8) и (9) принимает вид

$$\hat{h} = \frac{1}{2} (\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+) = \frac{1}{2} (2\hat{a}^+ \hat{a} + [\hat{a}, \hat{a}^+]) = \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \quad (10)$$

Окончательно, гамильтониан (1) принимает вид

$$\hat{H} = \hbar\omega (\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2}) \quad (11)$$

Как известно, энергия n -ного состояния осциллятора равна

$$E_n = \hbar\omega (n + \frac{1}{2}) \quad (12)$$

Сравнение (72) и (73) показывает, что произведение $\hat{a}^+ \hat{a}$ имеет смысл оператора номера возбуждения осциллятора, т.е. собственное значение этого оператора для n -ного состояния осциллятора $|n\rangle$ равно n .

$$\hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle \quad (13)$$

Это соотношение выполняется тождественно, если единственные отличные от нуля матричные элементы операторов \hat{a} и \hat{a}^+ равны

$$\langle n-1 | \hat{a} |n\rangle = \langle n | \hat{a}^+ |n-1\rangle = \sqrt{n} \quad (14)$$

Действительно

$$\langle n | \hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = \langle n | \hat{a}^+ |n-1\rangle \langle n-1 | \hat{a} |n\rangle = n$$

Для наглядности, состояние осциллятора $|n\rangle$ называют состоянием с n фононами. Тогда оператор $\hat{a}^+ \hat{a}$ называют оператором числа фононов, каждый из которых имеет энергию $\hbar\omega$. При этом матричные элементы (14) читают справа налево и называют оператор \hat{a} оператором поглощения фонона, а оператор \hat{a}^+ — оператором рождения фонона. В справедливости всех предыдущих формул можно непосредственно убедиться, выражая собственные функции осциллятора через полиномы Эрмита и записывая оператор поглощения в форме

$$\hat{a} = x \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} + i\hat{p} \sqrt{\frac{1}{2\hbar M\omega}}$$

Рассмотрим квантовомеханическую задачу определения собственных колебаний кристалла, которая сводится к проблеме диагонализации гамильтониана:

$$H = \sum_j \frac{p_j^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (15)$$

Здесь первая сумма есть сумма кинетических энергий атомов, которые колеблются около узлов кристаллической решетки

$$R_j^\alpha = a_1^\alpha n_1 + a_2^\alpha n_2 + a_3^\alpha n_3. \quad (16)$$

Три вектора $a_1^\alpha, a_2^\alpha, a_3^\alpha$ — это три периода решетки. Примем, что число номеров узлов $j = (n_1, n_2, n_3)$ в каждом из трех направлений равно N_1 , а полное число расположенных в узлах атомов кристалла равно $N_0 = N_1^3$. Вторая сумма в (15) есть сумма потенциалов парных взаимодействий атомов. Гамильтониан (15) имеет классический вид, но, фактически, является квантовомеханическим оператором, поскольку координата и импульс квантовой частицы удовлетворяют коммутационному соотношению (принципу неопределенности Гейзенберга):

$$[r^\alpha, p^\beta] = r^\alpha p^\beta - p^\beta r^\alpha = i\hbar \delta^{\alpha\beta}. \quad (17)$$

Отклонения (смещения) атомов от положений равновесия

$$u_j^\alpha = r_j^\alpha - R_j^\alpha \quad (18)$$

малы по сравнению с межатомными расстояниями, и потенциалы можно представить в форме разложения по этим смещениям:

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) &= U(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j + \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) = U(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) + \\ &+ U^\alpha(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)(u_i^\alpha - u_j^\alpha) + \frac{1}{2} U^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)(u_i^\alpha - u_j^\alpha)(u_i^\beta - u_j^\beta) + \dots \end{aligned} \quad (19)$$

Кубические и более высокие члены разложения будем опускать. Подставим это выражение в (15). Сумма нулевых членов разложения дает потенциальную энергию кристалла, когда все атомы находятся в узлах решетки — U_0 . Нас интересуют возбуждения кристалла и постоянную величину U_0 будем опускать. Совокупность линейных по смещениям членов равна нулю

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j} [U^\alpha(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)(u_i^\alpha - u_j^\alpha)] = 0, \quad (20)$$

т.к. в равновесии равна нулю суммарная сила окружающих атомов

$$\sum_j U^\alpha(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = 0 \quad (21)$$

Определяющую роль в гамильтониане кристалла играют квадратичные по смещениям члены:

$$H = \sum_j \frac{p_j^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{2} U^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) (u_i^\alpha - u_j^\alpha) (u_i^\beta - u_j^\beta). \quad (22)$$

Это — гамильтониан кристалла в гармоническом приближении. Он задает энергию кристалла как функцию $6N$ переменных смещений атомов u_j^α и их импульсов $p_j^\alpha = M \frac{d}{dt} u_j^\alpha$. Совокупность смещений можно рассматривать как 3-х компонентную вектор-функцию, заданную в дискретных точках пространства \mathbf{R}_j и для всех

моментов времени t . С этой точки зрения гамильтониан кристалла есть функционал от дискретного *поля смещений*, аналогично тому как энергия электромагнитного поля есть функционал от 4-мерного потенциала, заданного во всех точках пространства и времени. Поэтому задача определения собственных колебаний кристалла (и их квантования) полностью эквивалентна задаче определения собственных колебаний электромагнитного поля.

Для полного определения колебаний необходимо задать граничные условия на поверхности кристалла. Если специально не интересоваться поверхностными колебаниями, то на смещения можно наложить условия периодичности

$$u_{n_1, n_2, n_3}^\alpha = u_{n_1+N_1, n_2, n_3}^\alpha = u_{n_1, n_2+N_1, n_3}^\alpha = u_{n_1, n_2, n_3+N_1}^\alpha. \quad (23)$$

В результате гамильтониан (22) становится явным образом пространственно однородным, т.к. его вид не меняется при переносе начала координат из одного узла в любой другой. Все пространственно однородные формы диагонализуются в импульсном представлении. Переход к импульсному представлению осуществляется преобразованием Фурье, т.е. разложением смещений и импульсов атомов по плоским волнам:

$$u_j^\alpha = u^\alpha(\mathbf{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^\alpha e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}, \quad u_{\mathbf{k}}^\alpha = (u_{-\mathbf{k}}^\alpha)^* = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{R}} u^\alpha(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}}, \quad (24)$$

$$p_j^\alpha = p^\alpha(\mathbf{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}}^\alpha e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}, \quad p_{\mathbf{k}}^\alpha = (p_{-\mathbf{k}}^\alpha)^* = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{R}} p^\alpha(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}. \quad (25)$$

Здесь и далее из соображений удобства преобразования Фурье смещений и импульсов отличаются знаком в экспоненте. Сопряженность компонент с противоположными волновыми векторами следует из действительности (эрмитовости) смещений и импульсов. Для краткости у радиуса \mathbf{R}_j будем опускать номер узла. Подставим разложения Фурье в (22) и поменяем порядок суммирования:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \frac{p_{\mathbf{k}}^\alpha p_{-\mathbf{k}}^\alpha}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^\alpha u_{-\mathbf{k}}^\beta U_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}, \quad (26)$$

Здесь использовано соотношение

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)\mathbf{R}} = N_0 \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} \quad (27)$$

и введено обозначение

$$U_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{R}} \frac{1}{2} U^{\alpha\beta}(\mathbf{R}) (e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} - 1)(e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} - 1) = \sum_{\mathbf{R}} U^{\alpha\beta}(\mathbf{R}) (1 - \cos(\mathbf{k}\mathbf{R})). \quad (28)$$

Итак, гамильтониан распался на сумму по волновым векторам, но потенциальная энергия по-прежнему недиагональна по тензорным индексам. Выражение $U^{\alpha\beta}(\mathbf{R})$ есть вторая производная от потенциала парного взаимодействия и поэтому оно действительно и симметрично по верхним индексам. Соответственно действителен и симметричен тензор (28). Это означает, что потенциальную энергию можно

диагонализовать путем разложения смещений по собственным векторам поляризации колебаний $e_{\mathbf{k}s}^\alpha$:

$$u_{\mathbf{k}}^\alpha = \sum_s u_{\mathbf{k}s} e_{\mathbf{k}s}^\alpha, \quad U_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} e_{\mathbf{k}s}^\beta = M (\omega_{\mathbf{k}s})^2 e_{\mathbf{k}s}^\alpha, \quad e_{\mathbf{k}s}^\alpha e_{\mathbf{k}s'}^\alpha = \delta_{ss'}, \quad s = 1, 2, 3 \quad (29)$$

Такое же преобразование применяем к импульсам:

$$p_{\mathbf{k}}^\alpha = \sum_s p_{\mathbf{k}s} e_{\mathbf{k}s}^\alpha, \quad (30)$$

В результате гамильтониан (26) принимает вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}s} \left[\frac{p_{\mathbf{k}s} p_{-\mathbf{k}s}}{2M} + \frac{M}{2} (\omega_{\mathbf{k}s})^2 u_{\mathbf{k}s} u_{-\mathbf{k}s} \right], \quad (31)$$

Каждый член суммы напоминает гамильтониан независимого одномерного осциллятора с собственной частотой $\omega_{\mathbf{k}s}$, но для окончательной диагонализации гамильтониана следует избавиться от произведений с противоположными волновыми векторами. С учетом того, что компоненты смещений и импульсов с противоположными \mathbf{k} не являются независимыми величинами, а эрмитово сопряжены по отношению друг к другу, выполним еще одно преобразование:

$$u_{\mathbf{k}s} = Q_{\mathbf{k}s} (b_{\mathbf{k}s} + b_{-\mathbf{k}s}^*), \quad Q_{\mathbf{k}s} = Q_{-\mathbf{k}s}, \quad p_{\mathbf{k}s} = i P_{\mathbf{k}s} (b_{\mathbf{k}s}^* - b_{-\mathbf{k}s}), \quad P_{\mathbf{k}s} = P_{-\mathbf{k}s}. \quad (32)$$

Такой вид преобразований явным образом обеспечивает действительность (эрмитовость) левых частей этих равенств. Строго говоря вместо знака комплексного сопряжения (*) следует писать знак эрмитового сопряжения (+). Мы этого не делаем, чтобы подчеркнуть близость формул, описывающих классический и квантовый кристалл. По этой же причине не пишем "галочки" над операторами. Обратное преобразование дает

$$b_{\mathbf{k}s} = \frac{1}{2} \left(\frac{u_{\mathbf{k}s}}{Q_{\mathbf{k}s}} + i \frac{p_{-\mathbf{k}s}}{P_{\mathbf{k}s}} \right), \quad b_{\mathbf{k}s}^* = \frac{1}{2} \left(\frac{u_{-\mathbf{k}s}}{Q_{\mathbf{k}s}} - i \frac{p_{\mathbf{k}s}}{P_{\mathbf{k}s}} \right) \quad (33)$$

Перейдем в (31) к новым переменным:

$$H = \sum_{\mathbf{k}s} \left[\frac{1}{2M} P_{\mathbf{k}s}^2 (b_{\mathbf{k}s}^* - b_{-\mathbf{k}s}) (b_{\mathbf{k}s} - b_{-\mathbf{k}s}^*) + \frac{M}{2} (\omega_{\mathbf{k}s})^2 Q_{\mathbf{k}s}^2 (b_{\mathbf{k}s} + b_{-\mathbf{k}s}^*) (b_{\mathbf{k}s}^* + b_{-\mathbf{k}s}) \right] = \quad (34)$$

$$\sum_{\mathbf{k}s} \left[\frac{1}{2M} P_{\mathbf{k}s}^2 (b_{\mathbf{k}s}^* b_{\mathbf{k}s} - b_{-\mathbf{k}s} b_{\mathbf{k}s} - b_{\mathbf{k}s}^* b_{-\mathbf{k}s}^* + b_{-\mathbf{k}s} b_{-\mathbf{k}s}^*) + \frac{M}{2} (\omega_{\mathbf{k}s})^2 Q_{\mathbf{k}s}^2 (b_{\mathbf{k}s} b_{\mathbf{k}s}^* + b_{-\mathbf{k}s}^* b_{\mathbf{k}s}^* + b_{\mathbf{k}s} b_{-\mathbf{k}s} + b_{-\mathbf{k}s}^* b_{-\mathbf{k}s}) \right].$$

Чтобы члены с противоположными волновыми векторами сократились следует положить

$$\frac{1}{2M} P_{\mathbf{k}s}^2 = \frac{M}{2} (\omega_{\mathbf{k}s})^2 Q_{\mathbf{k}s}^2 \quad (35)$$

В результате получаем диагональный гамильтониан

$$H = \sum_{\mathbf{k}s} \frac{1}{M} P_{\mathbf{k}s}^2 (b_{\mathbf{k}s}^* b_{\mathbf{k}s} + b_{-\mathbf{k}s} b_{-\mathbf{k}s}^*), \quad (36)$$

выраженный через амплитуды $b_{\mathbf{k}s}$ и коэффициент $P_{\mathbf{k}s}$, величину которого выберем ниже из физических соображений. До сих пор мы не учитывали квантовую природу движения атомов кристалла. Для смещений и импульсов атомов кристалла соотношение (17) с учетом того, что величины, относящиеся к разным атомам, коммутативны, принимает вид

$$[u_i^\alpha, p_j^\beta] = i\hbar \delta^{\alpha\beta} \delta_{ij}, \quad (37)$$

которое почти не изменяется при переходе в пространство волновых векторов

$$[u_{\mathbf{k}}^\alpha, p_{\mathbf{k}'}^\beta] = i\hbar \delta^{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (38)$$

Из (29),(30) находим аналогичное соотношение

$$[u_{\mathbf{k}s}, p_{\mathbf{k}'s'}] = i\hbar \delta^{ss'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (39)$$

Наконец, для величин (33) коммутационные соотношения имеют вид

$$[b_{\mathbf{k}s}, b_{\mathbf{k}'s'}] = 0, \quad [b_{\mathbf{k}s}, b_{\mathbf{k}'s'}^*] = \frac{\hbar}{2Q_{\mathbf{k}s}P_{\mathbf{k}s}} \delta^{ss'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (40)$$

Воспользуемся свободой выбора коэффициента $P_{\mathbf{k}s}$ и примем

$$\frac{\hbar}{2Q_{\mathbf{k}s}P_{\mathbf{k}s}} = 1 \quad (41)$$

Эта формула вместе с (35) дает

$$Q_{\mathbf{k}s} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\mathbf{k}s}}}, \quad P_{\mathbf{k}s} = \sqrt{\frac{1}{2}\hbar M\omega_{\mathbf{k}s}}. \quad (42)$$

Теперь вид гамильтониана (36) становится однозначным:

$$H = \sum_{\mathbf{k}s} \frac{1}{2} \hbar \omega_{\mathbf{k}s} (b_{\mathbf{k}s}^* b_{\mathbf{k}s} + b_{-\mathbf{k}s} b_{-\mathbf{k}s}^*), \quad (43)$$

Поскольку выражение (41) приводит второе коммутационное соотношение (40) к виду

$$[b_{\mathbf{k}s}, b_{\mathbf{k}'s'}^*] = \delta^{ss'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (44)$$

гамильтониан упругого кристалла можно переписать в окончательной форме

$$H = \sum_{\mathbf{k}s} \hbar \omega_{\mathbf{k}s} \left(b_{\mathbf{k}s}^* b_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \right) \quad (45)$$

Каждый член этой суммы есть энергия собственного колебания с волновым вектором \mathbf{k} и одной из трех мод s с различными поляризациями, одна из которых называется продольной звуковой модой, а две других поперечными звуковыми модами. Постоянная часть этого гамильтониана

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k}s} \frac{1}{2} \hbar \omega_{\mathbf{k}s} \quad (46)$$

называется энергией нулевых колебаний кристалла. Операторы возбуждений $b_{\mathbf{k}s}, b_{\mathbf{k}s}^*$ обладают простыми свойствами и имеют прозрачный физический смысл. Пусть

$$H' = H - E_0 = \sum_{\mathbf{k}s} \hbar \omega_{\mathbf{k}s} b_{\mathbf{k}s}^* b_{\mathbf{k}s} \quad (47)$$

и $|n\rangle$ — одна из собственных функций этого гамильтониана:

$$H' |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (48)$$

Вычислим энергию состояния $\psi = b_{\mathbf{k}s} |n\rangle$:

$$(H' - E_n)\psi = \sum_{\mathbf{k}'s'} \hbar \omega_{\mathbf{k}'s'} b_{\mathbf{k}'s'}^* b_{\mathbf{k}'s'} b_{\mathbf{k}s} |n\rangle - b_{\mathbf{k}s} \sum_{\mathbf{k}'s'} \omega_{\mathbf{k}'s'} b_{\mathbf{k}'s'}^* b_{\mathbf{k}'s'} |n\rangle \quad (49)$$

Члены с $k \neq k'$ сокращаются, и остается

$$(H' - E_n)\psi = \hbar \omega_{\mathbf{k}s} [b_{\mathbf{k}s}^* b_{\mathbf{k}s} b_{\mathbf{k}s} - b_{\mathbf{k}s} b_{\mathbf{k}s}^* b_{\mathbf{k}s}] |n\rangle = \hbar \omega_{\mathbf{k}s} [b_{\mathbf{k}s}^* b_{\mathbf{k}s} - b_{\mathbf{k}s} b_{\mathbf{k}s}^*] b_{\mathbf{k}s} |n\rangle \quad (50)$$

Теперь воспользуемся соотношением коммутации (44):

$$(H' - E_n)\psi = -\hbar \omega_{\mathbf{k}s} \psi, \quad H' \psi = (E_n - \hbar \omega_{\mathbf{k}s}) \psi. \quad (51)$$

Итак, действие оператора $b_{\mathbf{k}s}$ на некоторое собственное состояние кристалла создает новое собственное состояние с энергией, уменьшенной на энергию одного кванта колебаний $\hbar \omega_{\mathbf{k}s}$. Повторив эти вычисления с оператором $b_{\mathbf{k}s}^*$, находим, что он, напротив, увеличивает энергию системы на такую же величину. Следовательно, оператор $b_{\mathbf{k}s}$ есть оператор уничтожения, а $b_{\mathbf{k}s}^*$ — оператор рождения одного кванта колебаний. Это — *фонон*, с волновым вектором \mathbf{k} , поляризацией s и частотой $\omega_{\mathbf{k}s}$. Фонон есть бозе-частица, поскольку в одном состоянии с заданными $\mathbf{k}s$ может находиться любое (целое) число таких частиц. Пусть $|0\rangle$ есть волновая функция основного состояния кристалла в обозначениях Дирака. Тогда волновая функция

$$|n\rangle = \sqrt{\frac{1}{n!}} (b_{\mathbf{k}s}^*)^n |0\rangle, \quad \langle n | n \rangle = 1. \quad (52)$$

нормирована на единицу и описывает возбужденное состояние кристалла с "числом заполнения" (числом тождественных фононов) колебания с волновым вектором \mathbf{k} и поляризацией s , равным n и энергией $\hbar \omega_{\mathbf{k}s} n$. Многими способами можно найти матричные элементы

$$\langle n-1 | b_{\mathbf{k}s} | n \rangle = \langle n | b_{\mathbf{k}s}^* | n-1 \rangle = \sqrt{n}, \quad (53)$$

и доказать формулу

$$b_{\mathbf{k}s}^* b_{\mathbf{k}s} |n\rangle = n |n\rangle, \quad (54)$$

которая означает, что выражение $\hat{n} = b_{\mathbf{k}s}^* b_{\mathbf{k}s}$ имеет смысл оператора числа частиц. Формулы (51 - 54) относятся к состояниям кристалла, в которых возбуждена одна волна. Состояние с большим числом колебаний с различными длинами волн и поляризациями описывается в представлении чисел заполнения волновой функцией

$$|n_{\mathbf{k}s}, n_{\mathbf{k}'s'} \dots\rangle = \sqrt{\frac{1}{n_{\mathbf{k}s}!}} (b_{\mathbf{k}s}^*)^{n_{\mathbf{k}s}} |0\rangle \sqrt{\frac{1}{n_{\mathbf{k}'s'}!}} (b_{\mathbf{k}'s'}^*)^{n_{\mathbf{k}'s'}} \dots |0\rangle. \quad (55)$$

Таким образом колебания квантового гармонического кристалла образуют бозе-газ фононов, который в представлении чисел заполнения описывается гамильтонианом (45), и вектор смещения связан с операторами поглощения и рождения фононов формулой (см.(24), (29), (32), (42)):

$$u^\alpha(R) = \sum_{\mathbf{k}s} \sqrt{\frac{\hbar}{2N_0 M \omega_{\mathbf{k}s}}} e^{i\mathbf{k}R} e_{\mathbf{k}s}^\alpha (b_{\mathbf{k}s} + b_{-\mathbf{k}s}^*).$$

Преобразование поля смещений к виду, в котором оно выражается через операторы уничтожения и рождения фотонов, называется вторичным квантованием колебаний решетки.

5.2 Математическое введение в теорию решетки

Пусть имеется правильная решетка, содержащая N узлов, причем \mathbf{a}_i — базисные векторы элементарных трансляций в решетке. Введем базисные векторы элементарных \mathbf{b}_i трансляций в обратной решетке по формуле

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3] / V_a, \mathbf{b}_2 = 2\pi [\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1] / V_a, \mathbf{b}_3 = 2\pi [\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2] / V_a, \quad (56)$$

где $V_a = (\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]) = -$ объем элементарной ячейки в прямой решетке. Легко проверить, что

$$\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}. \quad (57)$$

При этом объем элементарной ячейки обратной решетки равен

$$V_b = (\mathbf{b}_1 \cdot [\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3]) = \frac{(2\pi)^3}{V_a}. \quad (58)$$

Общее выражение для вектора обратной решетки \mathbf{g} имеет вид $\mathbf{g} = n_i \mathbf{b}_i$, где n_i — произвольный набор из трех целых чисел — координаты узлов в выбранном базисе.

Пусть функция $f(\mathbf{x})$ периодическая с периодом решетки (\mathbf{x} — координата произвольной точки трехмерного пространства, а не только координата узлов решетки). Тогда ее можно разложить в ряд Фурье по векторам обратной решетки $\bar{\mathbf{g}}$ следующим образом

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{g}} f_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{x}} \quad (59)$$

В этом легко убедиться, если сделать замену

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + n_i \mathbf{a}_i, \quad (60)$$

где n_i — произвольные целые числа, и воспользоваться свойством (57).

Пусть функция q_r задана на дискретном множестве N узлов *одномерной* решетки. Рассмотрим ряд

$$q_r = N^{-1/2} \sum_k Q_k e^{ikr} \quad (61)$$

Для удобства считаем, что расстояние r меряется в единицах a , а k в единицах $1/a$. Потребуем удовлетворения функции периодическим граничным условиям

$$q_r = q_{r+N} \quad (62)$$

Из этого требования следует условие $e^{ikN} = 1$, или $k = 2\pi n/N$, где n — целое число. Поскольку r пробегает множество узлов решетки, то вектор k фактически определен с точностью до вектора обратной решетки, или, как говорят пробегает значения из *1-ой зоны Бриллюэна*. Удобно положить N четным и считать, что $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm (N/2 - 1), N/2$. Легко также показать справедливость следующих соотношений ортогональности

$$\frac{1}{N} \sum_k e^{ikr} = \delta_{r0} \quad (63)$$

$$\frac{1}{N} \sum_r e^{irk} = \delta_{k0} \quad (64)$$

Проверим, например, справедливость первого из этих равенств

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_k e^{ikm} &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N/2} e^{i2\pi nm/N} + \frac{1}{N} \sum_{n=-1}^{-(N/2-1)} e^{i2\pi nm/N} = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N/2} e^{i2\pi nm/N} + \frac{1}{N} \sum_{n=N-1}^{N/2+1} e^{i2\pi nm/N} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i2\pi nm/N} \\ &= \frac{1}{N} \frac{1 - (e^{i2\pi m/N})^N}{1 - e^{i2\pi m/N}} = \delta_{m0} \end{aligned}$$

Условия (63) – (64) позволяют записать преобразование, обратное (61),

$$Q_k = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_r q_r e^{-ikr}. \quad (65)$$

Переход от суммирования по зоне Бриллюэна обратной решетки к интегрированию обосновывается с помощью следующей цепочки равенств

$$\frac{1}{N} \sum_k \dots = \frac{1}{2\pi} \frac{2\pi}{N} \sum_k \dots = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\pi}^{\pi} \dots \Delta k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \dots dk = \int_{-1/2}^{1/2} \dots dg \quad (66)$$

Здесь $\Delta k = \frac{2\pi}{N}$, $g = \frac{k}{2\pi}$.

В трехмерном случае соотношение (66) переписывается в виде

$$\frac{1}{N^3} \sum_k = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \dots d^3 k \quad (67)$$

5.3 Спектр колебаний кубических решеток. Неустойчивость

Вторичное квантование колебаний кристаллической решетки и общие свойства фононов, были обсуждены на предыдущей лекции. Здесь будут обсуждены конкретные свойства спектра фононов, плотность состояний, неустойчивость простой кубической решетки. Для удобства изложения проведем диагонализацию гамильтониана решетки заново.

Динамические свойства кристаллического диэлектрика описываются гамильтонианом, который есть сумма кинетической энергии атомов, расположенных около узлов решетки, и потенциальной энергии взаимодействия атомов, которая в гармоническом приближении имеет вид однородной квадратичной формы относительно смещений $u_j^\alpha = r_j^\alpha - R_j^\alpha$:

$$H = \sum_j \frac{p_j^2}{2M} + \frac{1}{4} \sum_{i,j} U^{\alpha\beta} (R_i - R_j) (u_i^\alpha - u_j^\alpha) (u_i^\beta - u_j^\beta). \quad (68)$$

Как и на предыдущей лекции, мы ограничимся рассмотрением кристаллов с кристаллической структурой, содержащей один атом в элементарной ячейке. Координаты узлов такой решетки пробегают дискретный ряд значений

$$R_j^\alpha = a_1^\alpha n_1 + a_2^\alpha n_2 + a_3^\alpha n_3. \quad (69)$$

Три вектора $a_1^\alpha, a_2^\alpha, a_3^\alpha$ — это три периода решетки. Число номеров узлов $j = (n_1, n_2, n_3)$ в каждом из трех направлений равно N_1 , а полное число узлов кристалла равно $N_0 = N_1^3$. На смещения накладываются условия периодичности

$$u_{n_1, n_2, n_3}^\alpha = u_{n_1+N_1, n_2, n_3}^\alpha = u_{n_1, n_2+N_1, n_3}^\alpha = u_{n_1, n_2, n_3+N_1}^\alpha. \quad (70)$$

Замечательной особенностью гамильтониана в гармоническом приближении (68) является то, что он приводит к одинаковым уравнениям и в классической механике и в квантовой механике. В классической механике уравнения движения имеют вид

$$\frac{\partial u_j^\alpha}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial p_j^\alpha}, \quad \frac{\partial p_j^\alpha}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial u_j^\alpha}$$

Дифференцируя (68), легко находим

$$\frac{\partial u_j^\alpha}{\partial t} = \frac{1}{M} p_j^\alpha, \quad \frac{\partial p_j^\alpha}{\partial t} = -\sum_i U^{\alpha\beta} (R_i - R_j) (u_j^\beta - u_i^\beta) \quad (71)$$

Это же уравнение получается из квантовых уравнений, определяющих производные по времени

$$\frac{\partial u_j^\alpha}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[u_j^\alpha, H], \quad \frac{\partial p_j^\alpha}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[p_j^\alpha, H],$$

с учетом коммутационного соотношения

$$[u_i^\alpha, p_j^\beta] = i\hbar\delta^{\alpha\beta}\delta_{ij}. \quad (72)$$

Из (71) непосредственно следует система уравнений Ньютона

$$\frac{\partial^2 u_j^\alpha}{\partial t^2} = -\frac{1}{M} \sum_i U^{\alpha\beta}(R_i - R_j)(u_j^\beta - u_i^\beta) \quad (73)$$

Ищем собственное колебание кристалла в форме плоской волны

$$u_j^\alpha = u_k^\alpha e^{-i\omega t + ikR_j} \quad (74)$$

Подстановка этого выражения в (73) дает

$$\omega^2 u_k^\alpha = D_k^{\alpha\beta} u_k^\beta, \quad (75)$$

$$D_k^{\alpha\beta} = \frac{1}{M} \sum_i U^{\alpha\beta}(R_i - R_j)[e^{ikR_j} - e^{ikR_i}]e^{-ikR_j}. \quad (76)$$

Всегда матрица $U^{\alpha\beta}$ обладает свойствами

$$U^{\alpha\beta}(R) = U^{\alpha\beta}(-R) = U^{\beta\alpha}(R)$$

и выражение (76) равно

$$D_k^{\alpha\beta} = \frac{1}{M} \sum_R U^{\alpha\beta}(R)(1 - \cos \vec{k}\vec{R}). \quad (77)$$

Этот симметричный тензор $D_k^{\alpha\beta}$ называется динамической матрицей. Он диагонален в представлении собственных векторов

$$D_k^{\alpha\beta} e_{ks}^\beta = D_{ks} e_{ks}^\alpha, \quad e_{ks}^\alpha e_{ks'}^\alpha = \delta_{ss'}, \quad s = 1, 2, 3 \quad (78)$$

Динамическая матрица обращается в нуль при $k \rightarrow 0$. Следовательно, ее собственные значения при малых k пропорциональны k^2 :

$$D_{ks} = c_s^2 k^2 \quad (79)$$

Выбирая $u_k^\alpha = \text{const} * e_{ks}^\alpha$, находим из (75) собственную частоту

$$\omega_{ks} = \sqrt{D_{ks}}, \quad (80)$$

причем при малом волновом векторе имеет место линейная зависимость (звуковой спектр)

$$\omega_{ks} = c_s k. \quad (81)$$

Таким образом, для каждого волнового вектора кристалл имеет три моды — три собственных (“нормальных”) колебания с взаимно ортогональными поляризациями \vec{e}_{ks} и собственными частотами ω_{ks} . В пределе длинных волн говорят о трех звуковых модах. В общем случае, как следует из (77), собственные частоты являются периодическими функциями волнового вектора

$$\omega_{ks} = \omega_{k+B,s}$$

где вектор \vec{B} есть один из трех периодов обратной решетки

$$\vec{B}_1 = \frac{2\pi}{v_0}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3), \vec{B}_2 = \frac{2\pi}{v_0}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1), \vec{B}_3 = \frac{2\pi}{v_0}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2),$$

где $v_0 = \vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ есть объем элементарной ячейки.

Рассмотрим динамическую матрицу подробнее в моделях, в которых величина $U^{\alpha\beta}(R)$ есть вторая производная от потенциала парного взаимодействия атомов. Потенциал зависит только от расстояния между атомами.

Градиент потенциала взаимодействия $U(R)$ равен

$$U^\alpha(R) = U' n^\alpha, n^\alpha = R^\alpha/R.$$

Тензор вторых производных имеет вид

$$U^{\alpha\beta}(R) = (U'' - \frac{1}{R}U')n^\alpha n^\beta + \delta^{\alpha\beta} \frac{1}{R}U'$$

Подставим этот тензор в динамическую матрицу (77)

$$D_k^{\alpha\beta} = \frac{1}{M} \sum_R (1 - \cos \vec{k}\vec{R}) [(U'' - \frac{1}{R}U')n^\alpha n^\beta + \delta^{\alpha\beta} \frac{1}{R}U']. \quad (82)$$

В силу симметрии решетки недиагональные компоненты динамической матрицы равны нулю. Например, в D_k^{xy} недиагональная компонента символа Кронекера равна нулю, а выражение, пропорциональное $n^x n^y$ меняет знак при замене $\vec{R} \rightarrow -\vec{R}$ и после суммирования по узлам решетки исчезает. Поэтому в рассматриваемой модели динамическая матрица диагональна с самого начала, и три поляризации направлены по x, y и z . Для определенности, рассмотрим z -моду

$$\begin{aligned} \omega_{kz} &= \sqrt{D_k^{zz}}, \vec{e}_z = (0, 0, 1) \\ D_k^{zz} &= \frac{1}{M} \sum_R (1 - \cos \vec{k}\vec{R}) [(U'' - \frac{1}{R}U')(n^z)^2 + \frac{1}{R}U'] \end{aligned} \quad (83)$$

В случае $\vec{k} \parallel \vec{e}_z$ эта мода является продольной, в случае $\vec{k} \perp \vec{e}_z$ — поперечной. Для общего направления волнового вектора, направление поляризации остается неизменным.

Рассмотрим модель простой кубической решетки и ограничимся приближением, которое учитывает только взаимодействие шести ближайших соседей, когда $\vec{R} = (\pm a, 0, 0)$, $\vec{R} = (0, \pm a, 0)$, или $\vec{R} = (0, 0, \pm a)$

$$\begin{aligned} D_k^{zz} &= \frac{2}{M}(1 - \cos k_z a)(U'' - \frac{1}{a}U') + \frac{2}{Ma}U'\gamma \\ \gamma &= (1 - \cos k_x a) + (1 - \cos k_y a) + (1 - \cos k_z a) \end{aligned} \quad (84)$$

В частности, если $k_z = 0$, то $D_k^{zz} = \frac{6}{Ma}U'\gamma$. Может оказаться, что ближайшие соседи отталкиваются друг от друга, и $U' < 0$. В этом случае z -мода имеет мнимую частоту

$$\omega_{kz} = i\sqrt{\frac{2\gamma}{Ma}|U'|}$$

Это указывает на неустойчивость решетки. Такая неустойчивость называется "неустойчивостью карточного домика".

В объемноцентрированной решетке координаты восьми ближайших соседей имеют вид

$$\vec{R} = \frac{1}{\sqrt{3}}(\pm a, \pm a, \pm a)$$

и динамическая матрица равна

$$D_k^{xx} = D_k^{yy} = D_k^{zz} = \frac{\varphi}{M}\left[\frac{1}{3}(U'' - \frac{1}{a}U') + \frac{1}{a}U'\right]. \quad (85)$$

где

$$\varphi = \sum_R (1 - \cos \vec{k}\vec{R})$$

В этой решетке в приближении ближайших соседей все три моды имеют одинаковую частоту $\omega_{kz} = \sqrt{D_k^{zz}}$, и решетка стабильна, если

$$U'' + \frac{2}{a}U' > 0$$

В частности, при отталкивания по степенному закону имеем

$$U = U_0 \frac{a^n}{r^n}, U' = -nU_0 \frac{a^n}{r^{n+1}}, U'' = n(n+1)U_0 \frac{a^n}{r^{n+2}}$$

$$U'' + \frac{2}{a}U' = n(n-1)U_0 a^{-2}$$

Таким образом, объемноцентрированная решетка более устойчива, чем простая кубическая. Это помогает понять, почему кристаллов с симметрией простой кубической решетки в природе не существует.

Подчеркнем, что высказанное утверждение нельзя воспринимать как доказательство, поскольку приближение парного взаимодействия для описания свойств твердых тел является весьма грубым. В качестве альтернативы рассмотрим модель

$$D_k^{\alpha\beta} = Ak^\alpha k^\beta + Bk^2 \delta^{\alpha\beta}, A > 0, B > 0.$$

В этой модели уравнение (75) принимает вид

$$\omega^2 u_k^\alpha = Ak^\alpha (\vec{k}\vec{u}_k) + Bk^2 u_k^\alpha,$$

Это уравнение дает продольную моду

$$\vec{k} \parallel \vec{u}_k, \omega^2 = (A + B)k^2$$

и две поперечных

$$\vec{k} \perp \vec{u}_k, \omega^2 = Bk^2$$

Эта модель демонстрирует общее свойство твердых тел: скорость звука продольной моды всегда больше скоростей поперечных мод.

5.4 Плотность состояний фононов. Точки Ван-Хова

Основные термодинамические и кинетические величины, характеризующие диэлектрик, такие как давление, энтропия, теплоемкость, теплопроводность представимы в форме интегралов по фононам:

$$\begin{aligned}\sum_{ks} f(\omega_{ks}, \vec{n}_{ks}) &= \sum_s \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(\omega_{ks}, \vec{n}_{ks}) \\ &= \int d\omega g(\omega) \int \frac{d\vec{n}}{4\pi} f(\omega_{ks}, \vec{n}_{ks})\end{aligned}$$

Здесь введена плотность состояний фононов, равная

$$g(\omega) = \sum_s \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_{ks}) = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \sum_s \int dk_{\perp} dS_k \delta(\omega - \omega_{ks}) \quad (86)$$

Здесь dS_k — элемент поверхности постоянной энергии, dk_{\perp} — дифференциал волнового вектора, ортогонального к dS_k , ($d\omega_{ks} = |\nabla\omega_{ks}| dk_{\perp}$). Взяв интеграл по частоте, получаем

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_s \int \frac{dS_k}{|\nabla\omega_{ks}|}$$

Особый вклад в этот интеграл дают точки Ван-Хова, в которых градиент фононного спектра для одной из мод обращается в нуль. Т.е. в этой точке частота моды имеет минимум, максимум, или седло.

В окрестности каждой такой точки спектр имеет вид

$$\omega_k = \omega_0 + \frac{1}{2} \gamma^{\alpha\beta} (k^{\alpha} - k_0^{\alpha})(k^{\beta} - k_0^{\beta}) \quad (87)$$

Повернув систему координат, это выражение можно привести к диагональной форме

$$\omega_k = \omega_0 + \frac{1}{2} [\gamma_1 (k_1 - k_{10})^2 + \gamma_2 (k_2 - k_{20})^2 + \gamma_3 (k_3 - k_{30})^2] \quad (88)$$

1. Минимум. Все коэффициенты γ_n положительны. В этом случае имеем корневую особенность: вклад окрестности минимума равен

$$g_{\min}(\omega) \sim \begin{cases} 0, \omega < \omega_0 \\ \sqrt{\omega - \omega_0}, \omega > \omega_0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned}f(\omega - \omega_0) &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta\left(\frac{1}{2}(\gamma_1 (k_1 - k_{10})^2 + \gamma_2 (k_2 - k_{20})^2 + \gamma_3 (k_3 - k_{30})^2) - (\omega - \omega_0)\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{8}{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3}} \int 4\pi q^2 dq \delta(q^2 - (\omega - \omega_0)) = \frac{1}{\pi^2} \sqrt{\frac{(\omega - \omega_0)}{2\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3}}\end{aligned}$$

2. Максимум. Все коэффициенты γ_n отрицательны. Снова имеем корневую особенность, но снизу, при $\omega < \omega_0$.

3. Седловая точка. Два коэффициента положительны, один отрицателен. Имеем после очевидных переобозначений

$$\begin{aligned} g_{saddle}(\omega) &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta\left(\frac{1}{2}(\gamma_1(k_1 - k_{10})^2 + \gamma_2(k_2 - k_{20})^2 - |\gamma_3|(k_3 - k_{30})^2) - (\omega - \omega_0)\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{8}{\gamma_1\gamma_2|\gamma_3|}} \int 2\pi q dq dp \delta(q^2 - p^2 - (\omega - \omega_0)) \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \sqrt{\frac{8}{\gamma_1\gamma_2|\gamma_3|}} \int_{-P}^P dp \theta(p^2 + (\omega - \omega_0)) \end{aligned}$$

Здесь $(-P, P)$ — интервал, внутри которого справедливо разложение (87). При $\omega < \omega_0$ имеем корневую особенность несколько иного типа

$$g_{saddle}(\omega) \sim \begin{cases} P - \sqrt{\omega_0 - \omega}, & \omega < \omega_0 \\ P, & \omega > \omega_0 \end{cases}$$

Если отрицателен один коэффициент, а два положительны, то

$$g_{saddle}(\omega) \sim \begin{cases} P, & \omega < \omega_0 \\ P - \sqrt{\omega - \omega_0}, & \omega > \omega_0 \end{cases}$$

4. Один коэффициент γ равен нулю. Это — квазидвумерная зависимость частоты от волнового вектора. Если два не равные нулю коэффициента положительны или оба отрицательны, то имеет место скачек плотности состояний. Если два коэффициента имеют разные знаки, то возникает логарифмическая особенность.

5. Два коэффициента γ равны нулю. Это — квазиодномерный случай. В этом случае имеет место самая резкая особенность типа $1/\sqrt{\omega - \omega_0}$.

Все типы особенностей плотности фоновых состояний наблюдались методом измерения плотности состояния методом неупругого рассеяния нейтронов.

6 Лекция 6. Вторичное квантование электронов

6.1 Фермионы во вторичном квантовании

Теперь рассмотрим вторичное квантование поля ферми-частиц. Электроны в металле в первом приближении рассматривают как идеальный ферми-газ. Квантовомеханические волновые функции газа из N ферми-частиц можно описывать в форме разложения

$$\Psi = \sum_{\alpha} C_{\alpha} \Psi_{\alpha} \quad (1)$$

по системе детерминантов Слетера

$$\Psi_{\alpha, N} = \frac{1}{N!} \begin{pmatrix} \psi_{p_1}(x_1) & \psi_{p_1}(x_2) & \dots \\ \psi_{p_2}(x_1) & \psi_{p_2}(x_2) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Здесь $\alpha = (p_1, p_2, \dots)$, $x_i = (\mathbf{r}_i, \xi_i)$ - координата и спиновая переменная i -того электрона. Одноэлектронные волновые функции $\psi_p(x)$ принадлежат любой полной системе ортонормированных функций, характеризуемых квантовым числом p . Это может быть набор плоских волн. Тогда $p_j = (\mathbf{p}_j, \sigma_j)$ - импульс и проекция спина электрона. Далее мы будем опускать для краткости спиновые переменные во всех случаях, в которых обменное и магнитное взаимодействия электронов не играют роли. Детерминанты Слетера образуют полную ортонормированную систему функций

$$\int d^{3N} \Psi_{\alpha}^+ \Psi_{\alpha'} = \delta_{\alpha, \alpha'}. \quad (2)$$

Оказывается, удобнее вместо громоздких детерминантов Слетера использовать функции или векторы состояния

$$|\alpha\rangle = |n_{p_1}, n_{p_2}, \dots\rangle, \quad (3)$$

где n_{p_j} - число электронов в одночастичном состоянии p_j , равное нулю или единице. Это - исходное положение представления чисел заполнения, или вторичного квантования ферми-частиц. По определению функции состояния ортонормированы:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \delta_{\alpha, \beta}. \quad (4)$$

В представлении чисел заполнения все операторы физических величин записываются с помощью элементарных операторов поглощения a_p и рождения a_p^+ частицы в состоянии p :

$$a_p |1_p\rangle = z_p |0_p\rangle, a_p^+ |0_p\rangle = z_p |1_p\rangle, z_p = \pm 1. \quad (5)$$

(Здесь у функции состояния (3) указано только число частиц (0 или 1) в состоянии p) Операторы a_p и a_p^+ эрмитово сопряжены по отношению друг к другу и полностью определяются своими, отличными от нуля, матричными элементами:

$$\langle 0_p | a_p | 1_p \rangle = \langle 1_p | a_p^+ | 0_p \rangle = z_p. \quad (6)$$

Коэффициент $z_p = \pm 1$ можно однозначно связать с квантовым числом p . Но его знать нет необходимости, поскольку в любую физическую величину этот коэффициент входит квадратичным образом ($(z_p)^2 = 1$). И в дальнейшем мы будем его опускать. Из принципа Паули (в одном состоянии не может находиться больше, чем одна частица) следует, что

$$a_p^+ |1_p\rangle = (a_p^+)^2 |0\rangle = 0 \quad (7)$$

Наконец, применяя формулы (6), легко получить

$$[a_p a_p^+ + a_p^+ a_p] |0_p\rangle = |0_p\rangle, \quad [a_p a_p^+ + a_p^+ a_p] |1_p\rangle = |1_p\rangle. \quad (8)$$

Эти свойства можно переписать в операторном виде:

$$a_p^2 = 0, \quad (a_p^+)^2 = 0, \quad \{a_p, a_p^+\} = a_p a_p^+ + a_p^+ a_p = 1. \quad (9)$$

Последняя формула называется соотношением антикоммутации. Оператор

$$\hat{n}_p = a_p^+ a_p \quad (10)$$

называется оператором числа частиц в состоянии p , так как:

$$a_p^+ a_p | n_p \rangle = n_p | n_p \rangle. \quad (11)$$

Свойства (9) не должны зависеть от конкретного выбора представления и должны иметь одинаковый вид для любой полной системы ортонормированных функций. Пусть

$$A_m = \sum_p A_{mp} a_p, \quad \sum_p A_{mp} A_{mp}^* = 1 \quad (12)$$

Поскольку уничтожение двух электронов с состоянием m невозможно, то

$$A_m^2 = \sum_{pq} A_{mp} A_{mq} a_p a_q = 0 \quad (13)$$

Поменяем под знаком суммы обозначения импульсов и возьмем полусумму:

$$A_m^2 = \frac{1}{2} \sum_{pq} A_{mp} A_{mq} [a_p a_q + a_q a_p] = 0. \quad (14)$$

Это равенство не может зависеть от выбора матрицы A . Поэтому

$$\{a_p, a_q\} = 0, \quad \{a_p^+, a_q^+\} = 0. \quad (15)$$

Третье соотношение для A, A^+ дает

$$\{A_m, A_m^+\} = \sum_{pq} A_{mp} A_{mq}^* \{a_p a_q^+\} = 1. \quad (16)$$

Это равенство выполняется для любой унитарной матрицы A , если

$$\{a_p a_q^+\} = \delta_{pq}. \quad (17)$$

Таким образом, операторы рождения и уничтожения электрона при любом полном наборе квантовых чисел удовлетворяют соотношениям антикоммутации (15), (21).

Потребуем, чтобы оператор

$$\phi(r) = \sum_p \psi_p(r) a_p \quad (18)$$

имел смысл оператора уничтожения частицы в координатной точке \mathbf{r} . Он имеет вид разложения обычной волновой функции одного электрона по плоским волнам

$$\psi_p(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \chi_\sigma(\xi). \quad (19)$$

Здесь явно выписана спиновая часть волновой функции электрона

$$\chi_\sigma(\xi) = \delta_{\sigma,\xi}, \quad \sigma, \xi = \pm 1. \quad (20)$$

Отсюда - происхождение термина *вторичное квантование*. "Первичное квантование", т.е. замена физических величин на операторы, приводит к переходу от классической физики к квантовой. "Вторичное квантование" - замена волновой функции на оператор поглощения - только эффективный математический метод, позволяющий в компактном виде записывать формулы квантовой механики систем из большого числа одинаковых частиц. Из правил антикоммутации (15), (21) следуют соотношения

$$\{\phi(r), \phi(r')\} = 0, \quad \{\phi(r)^+, \phi(r')^+\} = 0, \quad \{\phi(r), \phi(r')^+\} = \frac{1}{V} \sum_p e^{ip(r-r')} = \delta(r-r'). \quad (21)$$

В справедливости последнего равенства можно убедиться, проинтегрировав по объему.

Покажем, что представления "первого" и "второго" квантований эквивалентны. Рассмотрим случай двух электронов с импульсами p и q . Такое состояние можно создать, если подействовать на состояние без электронов - "вакуум" $|0\rangle$ - двумя операторами рождения электронов:

$$|1_p, 1_q\rangle = a_p^+ a_q^+ |0\rangle. \quad (22)$$

Рассмотрим выражение

$$\langle 0 | \phi(r_1) \phi(r_2) | 1_p, 1_q \rangle = \sum_{p_1, p_2} \psi_{p_1}(r_1) \psi_{p_2}(r_2) \langle 0 | a_{p_1} a_{p_2} a_p^+ a_q^+ | 0 \rangle. \quad (23)$$

Используя соотношения (15), (17) и нормировку "вакуума" ($\langle 0 | 0 \rangle = 1$), находим

$$\langle 0 | a_{p_1} a_{p_2} a_p^+ a_q^+ | 0 \rangle = \delta_{p_1, q} \delta_{p_2, p} - \delta_{p_1, p} \delta_{p_2, q}. \quad (24)$$

В результате выражение (23) принимает вид детерминанта Слетера

$$\begin{pmatrix} \psi_q(r_1) & \psi_q(r_2) \\ \psi_p(r_1) & \psi_p(r_2) \end{pmatrix}$$

В общем случае N электронов эквивалентность представлений Ψ_α и $|\alpha\rangle$ устанавливается тождеством, которое доказывается в курсах квантовой механики:

$$\Psi_{\alpha, N} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \phi(r_N) \dots \phi(r_1) |\alpha, N\rangle. \quad (25)$$

Обратим внимание на то, что в этом выражении справа благодаря N -кратному действию операторов уничтожения на состояние из N частиц создается состояние, не содержащее ни одной частицы - вакуумное состояние. Оно и стоит в (25)

слева, умноженное на c - число - функцию Слетера. Во вторичном квантовании "норма" операторной волновой функции (18)

$$\hat{N} = \int d^3r \phi^+(r) \phi(r) = \sum_p \hat{n}_p \quad (26)$$

есть сумма числа частиц по всем одночастичным состояниям и, следовательно, имеет смысл оператора полного числа электронов.

Оператор кинетической энергии системы электронов во вторичном квантовании имеет вид среднего значения кинетической энергии одного электрона, в котором волновая функция электрона заменена на оператор (18):

$$\hat{T} = \int (d^3r \phi^+(\mathbf{r}) \frac{1}{2m} [-i\nabla]^2 \phi(\mathbf{r})). \quad (27)$$

Однако, после интегрирования по координатам это выражение принимает ясную физическую форму суммы кинетических энергий электронов по всем импульсам

$$\hat{T} = \sum_p \frac{p^2}{2m} \hat{n}_p \quad (28)$$

В общем случае оператор вторичного квантования $\hat{A}^{(2)}$ любой аддитивной физической величины $A^{(1)}(r_1, \dots, r_N)$ должен иметь такой вид, который приводит к матричным элементам, равным значениям матричных элементов, вычисленным с использованием детерминантов Слетера

$$\langle \beta, N | \hat{A}^{(2)} | \alpha, N \rangle = \int d^{3N}r \Psi_\beta^+ A^{(1)}(r_1, \dots, r_N) \Psi_\alpha. \quad (29)$$

Это равенство выполняется тождественно, если оператор вторичного квантования выражается формулой

$$\hat{A}^{(2)} = \frac{1}{N!} \int d^{3N}r \phi^+(r_1) \dots \phi^+(r_N) A^{(1)}(r_1, \dots, r_N) \phi(r_N) \dots \phi(r_1). \quad (30)$$

В этом легко убедиться, если подставить (30) в (29) и применить соотношение (25).

Применим (30), чтобы записать гамильтониан системы электронов во внешнем поле U

$$H^{(1)} = \sum_{n=1}^N h_n, \quad h_n = \frac{\hat{p}_n^2}{2m} + U(r_n). \quad (31)$$

в представлении вторичного квантования :

$$\hat{H}^{(2)} = \frac{1}{N!} \int d^{3N}r \phi^+(r_1) \dots \phi^+(r_N) \sum_{n=1}^N h_n \phi(r_N) \dots \phi(r_1). \quad (32)$$

Все члены суммы по n равны друг другу, и после замены под знаком интегралов нумерации координат получаем:

$$\hat{H}^{(2)} = \frac{1}{(N-1)!} \int d^{3N} r \phi^+(r_1) \dots \phi^+(r_{N-1}) \phi^+(r_N) \phi(r_N) \phi(r_{N-1}) \dots h_1 \phi(r_1). \quad (33)$$

Нам необходимо знать действие этого гамильтониана на подпространство состояний системы из частиц N :

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(2)} | \alpha, N \rangle = & \frac{1}{(N-1)!} \int d^{3(N-1)} r \phi^+(r_1) \dots \phi^+(r_{N-1}) \\ & \left\{ \int d^3 r_N \phi^+(r_N) \phi(r_N) \right\} \\ & \phi(r_{N-1}) \dots h_1 \phi(r_1) | \alpha, N \rangle. \end{aligned} \quad (34)$$

Здесь на нижней строке выделено состояние, которое построено действием $(N-1)$ операторов уничтожения на состояние из N частиц, т.е. состояние из одной частицы. А на предыдущей строке в фигурных скобках стоит оператор числа частиц (см.(26)), который по отношению к любому состоянию из одной частицы равен единице. Вычеркнув в интеграле (34) оператор числа частиц, получаем

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(2)} | \alpha, N \rangle = & \frac{1}{(N-1)!} \int d^{3(N-2)} r \phi^+(r_1) \dots \phi^+(r_{N-2}) \\ & \left\{ \int d^3 r_{N-1} \phi^+(r_{N-1}) \phi(r_{N-1}) \right\} \\ & \phi(r_{N-2}) \dots h_1 \phi(r_1) | \alpha, N \rangle. \end{aligned} \quad (35)$$

В этом выражении оператор числа частиц (в фигурных скобках) действует уже на состояние из двух частиц и равен 2. Следующая пара операторов рождения и поглощения опять образует оператор числа частиц и равен 3. Повторяя эту операцию $(N-1)$ раз, мы приходим к интегралу по координатам одной частицы

$$\hat{H}^{(2)} | \alpha, N \rangle = \int d^3 r \phi^+(r_1) h_1 \phi(r_1) | \alpha, N \rangle. \quad (36)$$

Опустив в этом равенстве вектор состояния $| \alpha, N \rangle$, получаем оператор энергии системы электронов в координатном представлении. Применив разложение (18), находим энергию электронов в импульсном представлении

$$\hat{H}^{(2)} = \sum_p \frac{p^2}{2m} \hat{n}_p + \sum_{pq} a_p^+ U_{pq} a_q, \quad (37)$$

Последняя сумма - оператор потенциальной энергии электронов. Каждый член этой суммы описывает процесс рассеяния элетрона на внешнем потенциале,

который во вторичном квантовании выглядит как последовательность исчезновения электрона с импульсом q и рождения электрона с импульсом p . Амплитуда этого перехода определяется матричным элементом

$$U_{pq} = \int d^3r \psi_p^*(r) U(r) \psi_q(r). \quad (38)$$

Аналогичным образом можно найти вид во вторичном квантовании части гамильтониана системы, обусловленной парным взаимодействием частиц друг с другом:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{m,n} V(r_m - r_n) \quad (39)$$

Подставляя эту сумму в (30), получим интеграл вида (33), в котором вместо энергии частицы стоит энергия взаимодействия двух частиц

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2(N-2)!} \int d^{3N}r \phi^+(r_1) \dots \phi^+(r_{N-1}) \{ \phi^+(r_N) \phi(r_N) \} \phi(r_{N-1}) \dots V(r_1 - r_2) \phi(r_2) \phi(r_1). \quad (40)$$

Повторив процедуру исключения оператора числа частиц $(N-2)$ раз, как в (33)-(36), находим, что во вторичном квантовании гамильтониан взаимодействия частиц имеет форму диагонального матричного элемента от энергии взаимодействия двух частиц, но с волновыми функциями имеющими операторную природу

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2} \int d^3r \phi^+(r_1) \dots \phi^+(r_2) V(r_1 - r_2) \phi(r_2) \phi(r_1). \quad (41)$$

В импульсном представлении гамильтониан взаимодействия равен

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ (p_1, p_2 | V | p_3, p_4) a_{p_3} a_{p_4}. \quad (42)$$

Каждый член этой суммы описывает рассеяние двух электронов друг на друге $(p_3, p_4 \rightarrow p_1, p_2)$ с амплитудой рассеяния

$$(p_1, p_2 | V | p_3, p_4) = \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_{p_1}^*(r_1) \psi_{p_2}^*(r_2) V(r_1 - r_2) \psi_{p_3}(r_2) \psi_{p_4}(r_1). \quad (43)$$

Подставляя в эту амплитуду явный вид одночастичных волновых функций (19) и учитывая, что кроме интегрирования по координатам r_1, r_2 следует суммировать по спиновым переменным ξ_1, ξ_2 , получаем

$$(p_1, p_2 | V | p_3, p_4) = \frac{1}{V^2} \delta_{\sigma_1, \sigma_4} \delta_{\sigma_2, \sigma_3} \int d^3r_1 d^3r_2 e^{-i(p_1 - p_4)r_1} e^{-i(p_2 - p_3)r_2} V(r_1 - r_2). \quad (44)$$

Обратим внимание, что потенциал взаимодействия электронов не зависит от спиновых переменных, а зависит только от расстояния между электронами. Поэтому при столкновении спин каждого электрона не меняется: электрон, переходящий из состояния p_4 в p_1 , сохраняет спин σ_1 , а второй электрон сохраняет спин σ_2 .

В дальнейшем, чтобы не путать обозначения для потенциала взаимодействия и объема, которые обозначены одной буквой, положим объем системы равным единице ($V = 1$).

Перейдем к новым переменным $r = r_1 - r_2, r_2$. Интеграл по r_2 приводит к закону сохранения суммарного импульса сталкивающихся частиц

$$\int d^3 r_2 e^{-i(p_1+p_2-p_3-p_4)r_2} = \delta_{p_1+p_2, p_3+p_4} \quad (45)$$

а интеграл по r имеет смысл матричного элемента от потенциала взаимодействия :

$$V_q = \int d^3 r e^{-iqr} V(r), \quad q = p_1 - p_4. \quad (46)$$

Таким образом, гамильтониан взаимодействия электронов в представлении чисел заполнения имеет вид

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{p_1, p_2, p_3, p_4, \sigma_1, \sigma_2} \delta_{p_1+p_2, p_3+p_4} a_{p_1 \sigma_1}^+ a_{p_2 \sigma_2}^+ V_{q=p_1-p_4} a_{p_3 \sigma_2} a_{p_4 \sigma_1}. \quad (47)$$

Интеграл V_q для экранированного кулоновского взаимодействия электронов

$$V(r) = \frac{e^2}{r} e^{-\kappa r} \quad (48)$$

равен

$$V_q = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa^2}. \quad (49)$$

В модели короткодействующего потенциала имеем

$$V(r) = -\lambda \delta(r), \quad V_q = -\lambda. \quad (50)$$

6.2 Модель Гейзенберга

Теперь рассмотрим модель, которая демонстрирует возникновение таких свойств твердых тел, как ферромагнетизм и антиферромагнетизм. В отличие от металла в диэлектрике электроны не распространяются свободно по кристаллу, а находятся в связанных состояниях внутри атомов, расположенных в узлах кристаллической решетки R . Для простоты будем предполагать, что каждый атом имеет только один электрон на незаполненной s -оболочке. В этой модели в гамильтониане взаимодействия (42) квантовое число имеет смысл координаты атома R , с которым связан электрон и проекции спина σ . Гамильтониан (42) принимает вид:

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum a_{R_1, \sigma_1}^+ a_{R_2, \sigma_2}^+ (R_1, R_2 | V | R_3, R_4) a_{R_3, \sigma_2} a_{R_4, \sigma_1}. \quad (51)$$

Здесь учтено, что матричный элемент взаимодействия диагонален по спиновым переменным. Пока гамильтониан (51) отличается от (42) лишь формой записи: в (42) принято импульсное представление, а в (51) - узельное. Чтобы последний гамильтониан отражал основные черты модели, в нем следует опустить те члены, которые не сохраняют число частиц на каждом узле кристаллической решетки. Следует оставить члены, в которых $R_1 = R_4, R_2 = R_3$ или $R_1 = R_3, R_2 = R_4$. В результате получаем

$$\hat{V}^{(2)} = \hat{V}_Q^{(2)} + \hat{V}_S^{(2)}, \quad (52)$$

$$\hat{V}_Q^{(2)} = \frac{1}{2} \sum a_{R_1, \sigma_1}^+ a_{R_1, \sigma_1} a_{R_2, \sigma_2}^+ a_{R_2, \sigma_2} (R_1, R_2 | V | R_2, R_1), \quad (53)$$

$$\hat{V}_S^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{R_1 \neq R_2} a_{R_1, \sigma_1}^+ a_{R_2, \sigma_2}^+ (R_1, R_2 | V | R_1, R_2) a_{R_1, \sigma_2} a_{R_2, \sigma_1}. \quad (54)$$

Гамильтониан распался на две части. Первая $\hat{V}_Q^{(2)}$ содержит произведение числа частиц в узле R_1

$$n(R_1) = \sum_{\sigma_1} a_{R_1, \sigma_1}^+ a_{R_1, \sigma_1} \quad (55)$$

и числа частиц в узле R_2 . Поскольку в каждом узле находится ровно один электрон, то

$$\hat{V}_Q^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{R_1, R_2} V(R_1 - R_2). \quad (56)$$

Это - классическая энергия кулоновского взаимодействия электронов. Она в точности равна энергии взаимодействия ионов, с которыми связаны электроны. А энергия взаимодействия электронов с ионами - в два раза больше и имеет противоположный знак (притяжение). Поэтому полная кулоновская энергия этой электронейтральной системы равна нулю.

Вторая часть гамильтониана (52) не имеет классических аналогов и может быть переписана в виде

$$\hat{V}_S^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{R_1 \neq R_2} \left[\sum_{\sigma_1, \sigma_2} a_{R_1, \sigma_1}^+ a_{R_1, \sigma_2} a_{R_1, \sigma_2}^+ a_{R_2, \sigma_1} \right] J(R_1 - R_2). \quad (57)$$

Изменение знака произошло из-за перестановки ферми-операторов Величина J называется обменным интегралом

$$J(R_1 - R_2) = (R_1, R_2 | V | R_1, R_2) \quad (58)$$

Это название связано с тем, что каждый член суммы (57) описывает процесс, в ходе которого электроны остаются в узлах R_1, R_2 , но обмениваются спинами: $\sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2$. Возможна и иная трактовка этого процесса: происходит двойной прыжок, при котором электроны обмениваются местами, сохраняя свои спины.

Гамильтониан (57) можно выразить как взаимодействие спинов. Для операторов в любом узле имеют место соотношения:

$$a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\uparrow} = \frac{1}{2} + S^z, \quad (59)$$

$$a_{\downarrow}^{\dagger} a_{\downarrow} = \frac{1}{2} - S^z, \quad (60)$$

$$a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\downarrow} = S^+, \quad (61)$$

$$a_{\downarrow}^{\dagger} a_{\uparrow} = S^-. \quad (62)$$

Используя эти соотношения, перепишем квадратную скобку в (57) в форме

$$[\dots] = 2S_{R_1}^z S_{R_2}^z + \frac{1}{2} + S_{R_1}^+ S_{R_2}^- + S_{R_1}^- S_{R_2}^+ = 2\mathbf{S}_{R_1} \mathbf{S}_{R_2} + \frac{1}{2}. \quad (63)$$

Таким образом, мы нашли, что взаимодействие локализованных на узлах решетки электронов сводится к гамильтониану изотропного обменного взаимодействия решетки спинов $S = \frac{1}{2}$:

$$\hat{V}_S^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{R_1 \neq R_2} J(R_1 - R_2) \left[2\mathbf{S}_{R_1} \mathbf{S}_{R_2} + \frac{1}{2} \right]. \quad (64)$$

Этот гамильтониан называется гамильтонианом Гейзенберга.

7 Лекция 7. Идеальный бозе-газ

7.1 Схема вычислений

Напомним основную схему вычислений термодинамических величин в рамках статистической физики. Логарифм распределения Гиббса w_{α} замкнутой системы при заданном объеме V системы есть линейная функция единственного аддитивного интеграла движения, энергии E_{α} :

$$\ln w_{\alpha} = \beta(F - E_{\alpha}) \quad (1)$$

Если рассматривать ансамбль замкнутых систем с фиксированным объемом, но с неопределенным числом частиц, то это число частиц в любой конкретной системе ансамбля от времени не зависит. Поэтому логарифм распределения Гиббса такого ансамбля следует представить в виде линейной функции двух аддитивных интегралов движения - энергии E_{α} и числа N_{α} частиц

$$\ln w_{\alpha} = \beta(\Omega - E_{\alpha} + \mu N_{\alpha}) \quad (2)$$

с тремя параметрами: объемом системы V , обратной температурой $\beta = 1/T$ и новым параметром μ , который называется химическим потенциалом. Аддитивная величина Ω является функцией этих параметров и определяется условием

нормировки распределения Гиббса

$$\sum_{\alpha} w_{\alpha} = e^{\beta\Omega} Z = 1, \quad (3)$$

$$Z = \sum_{\alpha} e^{-\beta(E_{\alpha} - \mu N_{\alpha})} \quad (4)$$

Таким образом, новый термодинамический потенциал

$$\Omega(V, T, \mu) = -T \ln Z \quad (5)$$

выражается через логарифм новой статистической суммы (4), в которой проводится суммирование по всем состояниям $\{\alpha\}$ системы со всеми возможными значениями энергии и числа частиц.

Свяжем параметры распределения Гиббса (2) с энтропией и средними значениями числа частиц и энергии системы.

$$S = - \sum_{\alpha} w_{\alpha} \ln w_{\alpha} = - \sum_{\alpha} w_{\alpha} \beta (\Omega - E_{\alpha} + \mu N_{\alpha}) = -\beta (\Omega - E + \mu N) \quad (6)$$

$$N = \sum_{\alpha} w_{\alpha} N_{\alpha} = \frac{\sum_{\alpha} e^{-\beta(E_{\alpha} - \mu N_{\alpha})} N_{\alpha}}{Z} = \frac{1}{Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial (\beta \mu)} \right)_{\beta} = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{\beta} \quad (7)$$

$$E - \mu N = \sum_{\alpha} w_{\alpha} (E_{\alpha} - \mu N_{\alpha}) = - \frac{1}{Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)_{\mu} = - \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right)_{\mu} = \left(\frac{\partial (\beta \Omega)}{\partial \beta} \right)_{\mu} = \Omega - T \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{\mu} \quad (8)$$

Из соотношений (6), (8) следует, что

$$\Omega = E - \mu N - TS \quad (9)$$

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{\mu} = -S \quad (10)$$

Используя термодинамическое определение потенциала Гиббса

$$\Phi = E - TS + pV = \mu N \quad (11)$$

получаем

$$\Omega = -pV \quad (12)$$

Совокупность формул (6)-(12) доказывает, что параметры β, μ, Ω распределения Гиббса с переменным числом частиц (2) имеют смысл стандартных термодинамических величин.

Заметим, что сопоставляя выражения (2), (6), логарифм распределения Гиббса (со знаком минус) естественно назвать энтропией состояния, но такое понятие обычно не используется.

7.2 Распределение Бозе-Эйнштейна, бозе-конденсация

Применим общие формулы предыдущего параграфа к случаю идеального бозе-газа. Идеальный бозе-газ - это система невзаимодействующих друг с другом тождественных частиц. В представлении чисел заполнения каждое состояние α системы описывается набором чисел заполнения $\{n_p\}$ одночастичных состояний с энергиями $\{\varepsilon_p\}$.

Число частиц и энергия этого состояния равны

$$N_\alpha = \sum_p n_p, \quad E_\alpha = \sum_p n_p \varepsilon_p \quad (13)$$

Число частиц в каждом одночастичном состоянии n_p может принимать любое значение от 0 до ∞ .

Из (4), (5) имеем

$$\Omega(V, T, \mu) = -T \ln \left\{ \sum_\alpha e^{-\beta(E_\alpha - \mu N_\alpha)} \right\} = -T \ln \left\{ \sum_{\{n_p\}} e^{-\beta \sum_p n_p (\varepsilon_p - \mu)} \right\} \quad (14)$$

$$= -T \ln \left\{ \sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-\beta n_1 (\varepsilon_1 - \mu)} \sum_{n_2=0}^{\infty} e^{-\beta n_2 (\varepsilon_2 - \mu)} \sum_{n_3=0}^{\infty} e^{-\beta n_3 (\varepsilon_3 - \mu)} \dots \right\} \quad (15)$$

$$= \sum_p \Omega_p \quad (16)$$

Здесь мы ввели специальное обозначение для термодинамического потенциала подсистемы частиц в состоянии p :

$$\Omega_p = -T \ln Z_p, \quad Z_p = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n (\varepsilon_p - \mu)} \quad (17)$$

В частности

$$Z_0 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n (\varepsilon_0 - \mu)} \quad (18)$$

Чтобы эта сумма имела смысл, необходимо

$$e^{\beta(\mu - \varepsilon_0)} < 1, \quad \mu < \varepsilon_0 \quad (19)$$

Это означает, что химический потенциал должен быть меньше минимальной энергии одночастичного состояния. Далее мы будем рассматривать только нерелятивистские частицы со спектром $\varepsilon_p = p^2/2m$. Поэтому $\varepsilon_0 = 0$, и мы будем говорить, что химический потенциал идеального бозе-газа всегда отрицателен

$$\mu < 0 \quad (20)$$

При этом условии геометрические прогрессии в (17), (18) сходятся и дают

$$Z_p = \frac{1}{[1 - e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)}]}, \quad \Omega_p = T \ln [1 - e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)}] \quad (21)$$

Из формулы (7) находим среднее число частиц в состоянии p

$$\langle n_p \rangle = N_p = - \left(\frac{\partial \Omega_p}{\partial \mu} \right) \quad (22)$$

$$N_p = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1} \quad (23)$$

Это - функция распределения идеального бозе-газа, распределение Бозе-Эйнштейна.

Полное число частиц

$$N = \sum_p N_p = \sum_p \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1} \quad (24)$$

не зависит от температуры и, тем самым неявным образом задает зависимость химического потенциала от температуры. Найдем эту зависимость. По правилу Бора-Зоммерфельда для любой функции от энергии сумма по импульсам эквивалентна интегралу

$$I = \sum_p f(\varepsilon_p) = \int \frac{L^3 d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} f(\varepsilon_p) = \nu V \int_0^\infty \varepsilon^{1/2} d\varepsilon f(\varepsilon) \quad (25)$$

где $\nu = \frac{m^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}$. Применяя это соотношение и делая замену переменных $z = p^2/2mT$, приводим число частиц (24) к виду

$$N = T^{3/2} \nu V \int_0^\infty \frac{z^{1/2} dz}{e^z e^{-\beta\mu} - 1} \quad (26)$$

Отсюда

$$\int_0^\infty \frac{z^{1/2} dz}{e^z e^{-\beta\mu} - 1} = \frac{N}{T^{3/2} \nu V} \quad (27)$$

Чтобы при росте температуры интеграл падал как $T^{-3/2}$, необходимо падение подынтегрального выражения, т.е. фактор $e^{\beta\mu}$ должен расти. Поэтому при достаточно высоких температурах единицей в подынтегральном выражении можно пренебречь и получить выражение

$$N = \Gamma(3/2) T^{3/2} \nu V e^{\beta\mu} \quad (28)$$

из которого следует понижение химического потенциала по закону

$$e^{\beta\mu} \sim T^{3/2}, \quad \mu \sim -\frac{3}{2} T \ln \frac{1}{T} \quad (29)$$

При таких температурах в знаменателе распределения (23) можно пренебречь единицей и перевести распределение Бозе в распределение Максвелла-Больцмана

$$N_p = e^{\beta(\mu - \varepsilon_p)}, \quad (30)$$

когда все заполнение всех уровней мало.

С понижением температуры при заданной плотности газа правая часть уравнения (27) растет, химический потенциал на плоскости (T, μ) приближается снизу к оси абсцисс, и обращается в нуль при температуре

$$T_c = \left(\frac{N}{\nu V J_{3/2}} \right)^{2/3} \quad (31)$$

$$J_{3/2} = \int_0^{\infty} \frac{z^{1/2} dz}{e^z - 1} \simeq 2,3 \quad (32)$$

При $T < T_c$ химический потенциал принимает минимально возможное значение, т.е. $\mu = 0$. Равенство (26) теряет смысл. В этой области число частиц на нижнем уровне N_0 очень велико, и при вычислении суммы (24) следует это число выделить и заменить сумму на интеграл (25) только для возбужденных состояний

$$N = \sum_p N_p = N_0 + T^{3/2} \nu V \int_0^{\infty} dz \frac{z^{1/2}}{e^z - 1} \quad (33)$$

Отсюда с учетом определения (31) находим температурную зависимость числа N_0 :

$$N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right] \quad (34)$$

Это замечательное явление накопления макроскопического числа частиц на нижнем уровне называется "конденсацией Бозе-Эйнштейна".

7.3 Термодинамика бозе-газа

Рассмотрим термодинамические свойства бозе-газа при низких температурах.

Термодинамический потенциал идеального бозе-газа согласно (21), (25) равен

$$\Omega = T \sum_p \ln [1 - e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)}] = T \nu V \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \ln [1 - e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}] \quad (35)$$

После интегрирования по частям получаем

$$\Omega = -\frac{2}{3} \nu V \int_0^{\infty} \varepsilon^{3/2} d\varepsilon \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} \quad (36)$$

Сравним это выражение с энергией бозе-газа

$$E = \sum_p N_p \varepsilon_p = \nu V \int_0^{\infty} \varepsilon^{3/2} d\varepsilon \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} \quad (37)$$

Отсюда

$$\Omega = -\frac{2}{3}E \quad (38)$$

Поскольку $\Omega = -pV$, то давление идеального газа p пропорционально плотности его энергии

$$p = \frac{2}{3}E/V \quad (39)$$

Если записать энергию, как функцию температуры, то уравнение (39) задает зависимость давления от температуры, т.е. уравнение состояния газа. При высоких температурах, когда распределение Бозе-Эйнштейна переходит в распределение Больцмана, получаем

$$E = \nu V \int_0^{\infty} \varepsilon^{3/2} d\varepsilon e^{\beta(\mu-\varepsilon)} = T^{5/2} \nu V e^{\beta\mu} \int_0^{\infty} z^{5/2-1} dz e^{-z} = T^{5/2} \nu V e^{\beta\mu} \Gamma(5/2) \quad (40)$$

Поделим эту энергию на число частиц (28):

$$\frac{E}{N} = \frac{\Gamma(5/2)}{\Gamma(3/2)} T = \frac{3}{2} T \quad (41)$$

Отсюда воспроизводится школьный закон Клайперона-Ломоносова

$$p = -\frac{\Omega}{V} = NT/V \quad (42)$$

и теплоемкость больцмановского газа

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{3}{2} N \quad (43)$$

Когда имеет место бозе-конденсация и химический потенциал равен нулю, энергия газа равна

$$E = \nu V \int_0^{\infty} \varepsilon^{3/2} d\varepsilon \frac{1}{e^{\beta\varepsilon} - 1} = \nu V T^{5/2} J_{5/2}, \quad J_{5/2} = \int_0^{\infty} \frac{z^{3/2} dz}{e^z - 1} \simeq 1.8 \quad (44)$$

(Вклад в энергию дают только возбужденные частицы) Отсюда находим при $T \leq T_c$ давление

$$p = -\frac{\Omega}{V} = \frac{2}{3} \nu T^{5/2} J_{5/2} \quad (45)$$

и теплоемкость бозе-газа

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \frac{5}{2} \nu V T^{3/2} J_{5/2} \quad (46)$$

В качестве последнего вопроса получим матрицу плотности идеального бозе-газа в представлении вторичного квантования. Для идеального газа операторная форма матрицы плотности есть стрельба из пушек по воробьям. Но для сравнения с

теорией неидеального бозе газа, это полезно. В представлении чисел заполнения матрица плотности Гиббса подсистема частиц в состоянии p имеет вид

$$\hat{\rho}_p = \frac{1}{Z_p} e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)\hat{n}_p} = \frac{1}{Z_p} \sum_n |n\rangle e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)n} \langle n|, \quad Sp\hat{\rho}_p = 1 \quad (47)$$

Отсюда непосредственно получаются формулы (17) и (23):

$$Z_p = Sp e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)\hat{n}_p} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)n} \quad (48)$$

$$\langle \hat{n}_p \rangle = Sp [e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)\hat{n}_p} \hat{n}_p] = \frac{1}{Z_p} \sum_{n=0}^{\infty} [n e^{-\beta(\varepsilon_p - \mu)n}] \quad (49)$$

7.4 Четыре примера

В заключение рассмотрим несколько задач.

7.4.1 Задача 1.

Найдем уравнение состояния бозе-газа при переходе через точку бозе-конденсации в переменных (p, T) , (p, V) и (V, T) .

Изохора (p, T) . температуры при фиксированном объеме от закона (45) при $T > T_c$ постепенно превращается в (42).

Изотерма (p, V) . Зависимость давления от объема при фиксированной температуре, характерная для больцмановского газа ($p \sim V^{-1}$) с уменьшением объема приближенно сохраняется вплоть до критического объема (см. (31))

$$V_c = \frac{N}{\nu J_{3/2} T^{3/2}} \quad (50)$$

Согласно (45) при дальнейшем уменьшении объема давление не меняется (увеличение плотности частиц компенсируется выпадением частиц в Бозе-конденсат).

Изобара (V, T) . При постоянном давлении с понижением температуры газ сжимается вплоть до объема (50). А затем скачком, как при обычном фазовом переходе первого рода, происходит сжатие до нулевого объема, поскольку ниже критической температуры идеальный бозе-газ имеет бесконечную сжимаемость

$$\frac{\partial V}{\partial p} = \infty \quad (51)$$

7.4.2 Задача 2.

Поскольку подсистема частиц в состоянии p является замкнутой системой, к ней можно, как мы уже говорили, применить все понятия статистической физики замкнутых систем. Найдем, например, среднее число частиц и его флуктуацию

в этом состоянии равны:

$$\langle n_p \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\beta n(\varepsilon_p - \mu)}}{Z_p} = -\frac{T}{Z_p} \frac{\partial Z_p}{\partial \mu} = N_p = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1} \quad (52)$$

$$\langle n_p^2 \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n^2 e^{-\beta n(\varepsilon_p - \mu)}}{Z_p} = \frac{T^2}{Z_p} \frac{\partial^2 Z_p}{\partial \mu^2} \quad (53)$$

$$\langle (\delta n_p)^2 \rangle = \langle n_p^2 \rangle - \langle n_p \rangle^2 = \frac{T^2}{Z_p} \frac{\partial^2 Z_p}{\partial \mu^2} - \left(\frac{T}{Z_p} \frac{\partial Z_p}{\partial \mu} \right)^2 = T^2 \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{1}{Z_p} \frac{\partial Z_p}{\partial \mu} \right) = -T \frac{\partial \langle n_p \rangle}{\partial \mu} = N_p (1 + N_p) \quad (54)$$

$$\frac{\langle (\delta n_p)^2 \rangle}{\langle n_p \rangle^2} = \frac{1 + N_p}{N_p} = e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} \quad (55)$$

Относительная флуктуация чисел заполнения Бозе-частиц больше единицы. Удивляться этому не стоит, поскольку свойство уменьшения относительной дисперсии с ростом числа частиц как $1/N$ (закон больших чисел) относится только к системам, составленным из большого числа независимых подсистем.

7.4.3 Задача 3.

Обратим внимание на качественное отличие когерентного состояния от состояния частиц с нулевым импульсом в идеальном газе с фиксированным химическим потенциалом, которое описывается не волновой функцией, а диагональной матрицей плотности (см. конец предыдущей лекции (47))

$$\hat{\rho}_0 = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n |\mu|} |n\rangle \langle n| \quad (56)$$

В этом состоянии, как было вычислено в задаче 2 предыдущей лекции, имеем

$$\langle n_0 \rangle = N_0 = \frac{1}{e^{\beta |\mu|} - 1}, \quad \langle (\delta n_0)^2 \rangle = N_0 (1 + N_0), \quad \frac{\langle (\delta n_0)^2 \rangle}{\langle n_0 \rangle^2} = \frac{1 + N_0}{N_0} = e^{\beta |\mu|}$$

Различие обусловлено тем, что в состоянии идеального газа с исчезающе малым химическим потенциалом вероятность обнаружить заданное число частиц в конденсате очень слабо зависит от числа частиц. Наоборот в макроскопическом ($N_0 \rightarrow \infty$) когерентном состоянии относительная флуктуация числа частиц в конденсате, так же как и относительная флуктуация полного числа частиц, стремятся к нулю. Число частиц на нижнем уровне при понижении температуры растет:

$$N_0 = \frac{1}{e^{-\beta \mu} - 1} \quad (57)$$

и, формально, обращается при $\mu = 0$ в бесконечность. Чтобы снять это противоречие, в области температур порядка и меньше T_c правую часть уравнения (33) следует вычислять более аккуратно. Учтем, что в этой области химический потенциал хотя и очень мал, но не равен нулю:

$$N = \sum_p N_p = N_0 + T^{3/2} \nu V \int_0^\infty dz \frac{z^{1/2}}{e^z e^{-\beta\mu} - 1} \quad (58)$$

Из интеграла выделим часть, отвечающую нулевому химическому потенциалу (см.(32)):

$$N = N_0 + T^{3/2} \nu V J_{3/2} + T^{3/2} \nu V \int_0^\infty z^{1/2} dz \left[\frac{1}{e^z e^{-\beta\mu} - 1} - \frac{1}{e^z - 1} \right] \quad (59)$$

Основной вклад в последний интеграл при $|\beta\mu| \ll 1$ дает область $z \ll 1$. В этой области он равен

$$T^{3/2} \nu V \int_0^1 z^{1/2} dz \left[\frac{1}{z + |\beta\mu|} - \frac{1}{z} \right] = -T^{3/2} \nu V |\beta\mu|^{1/2} \int_0^\infty \frac{z^{1/2} dz}{(z + 1)} = -\pi T^{3/2} \nu V |\beta\mu|^{1/2} \quad (60)$$

Подставляя этот результат в (59), получаем

$$N = N_0 + T^{3/2} \nu V J_{3/2} - \pi T^{3/2} \nu V |\beta\mu|^{1/2} \quad (61)$$

Используя определение (31) и полагая, в соответствии с (57), $N_0 \simeq |\beta\mu|^{-1}$, перепишем эту формулу в виде

$$N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right] = \frac{1}{|\beta\mu|} - 1.4N \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} |\beta\mu|^{1/2} \quad (62)$$

Отсюда получаем

$$|\beta\mu| \simeq \frac{1}{N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right]}, \quad T \ll T_c \quad (63)$$

$$|\beta\mu| \simeq \frac{1}{N^{2/3}}, \quad T = T_c \quad (64)$$

$$|\beta\mu| \simeq \frac{1}{2} \left(1 - \left(\frac{T_c}{T} \right)^{3/2} \right), \quad (65)$$

Таким образом, в области ниже критической температуры химический потенциал при конечном числе частиц отличен от нуля, но в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) равен нулю. В этом пределе в (61) последним членом при $T \leq T_c$ следует пренебречь, и мы получаем формулу (34).

При $T > T_c$, на малом, но конечном расстоянии от критической температуры, химический потенциал в термодинамическом пределе отличен от нуля и согласно (65) равен

$$\mu = -\frac{1}{2} T_c \left(1 - \left(\frac{T_c}{T} \right)^{3/2} \right) \quad (66)$$

7.4.4 Задача 4.

Найдем теплоту фазового перехода Бозе-конденсации. В окрестности T_c давление равно

$$p = -\frac{\Omega}{V} = \frac{2E}{3V} = \frac{2}{3}\nu \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} d\varepsilon \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \quad (67)$$

$$= \frac{2}{3}\nu T^{5/2} \int_0^\infty z^{3/2} dz \frac{1}{e^z e^{-\beta\mu} - 1} = \frac{2}{3}T^{5/2}\nu \left\{ J_{5/2} + \int_0^\infty z^{3/2} dz \left[\frac{1}{e^z e^{|\beta\mu|} - 1} - \frac{1}{e^z - 1} \right] \right\} \quad (68)$$

$$= \frac{2}{3}T^{5/2}\nu \left\{ J_{5/2} - (e^{|\beta\mu|} - 1) \int_0^\infty z^{3/2} dz \frac{e^z}{(e^z e^{|\beta\mu|} - 1)(e^z - 1)} \right\} \quad (69)$$

В отличие от (59) здесь последний интеграл на нижнем пределе при $|\beta\mu| \rightarrow 0$ не расходится. Поэтому под знаком интеграла химическим потенциалом можно пренебречь и в линейном приближении по $|\beta\mu|$ получить

$$p = \frac{2}{3}T^{5/2}\nu \{ J_{5/2} - |\beta\mu| J_p \} \quad (70)$$

$$J_p = \int_0^\infty z^{3/2} dz \frac{e^z}{(e^z - 1)^2} \simeq 3.47 \quad (71)$$

Отсюда находим химический потенциал, как функцию температуры и давления

$$\mu = \frac{3}{2} \frac{p}{T^{3/2}\nu J_p} - \frac{J_{5/2} T}{J_p} \quad (72)$$

Воспользуемся термодинамическим тождеством

$$d\mu = -s dT + \frac{V}{N} dp \quad (73)$$

Из этой формулы, прежде всего, можно найти критический объем (50). Кроме того, получаем энтропию, отнесенную к одной частице

$$s = - \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_p = \left(\frac{3}{2} \right)^2 \frac{p}{T^{5/2}\nu J_p} + \frac{J_{5/2}}{J_p} = \frac{3}{2} \frac{1}{J_p} \{ J_{5/2} - |\beta\mu| J_p \} + \frac{J_{5/2}}{J_p} = \quad (74)$$

$$\frac{5}{2} \frac{1}{J_p} J_{5/2} - \frac{3}{2} |\beta\mu| \quad (75)$$

Поскольку ниже критической температуры $\mu = 0$, то ниже T_c энтропия равна нулю, и искомая теплота фазового перехода равна

$$q = \frac{5}{2} \frac{1}{J_p} J_{5/2} T_c \simeq 1.3 T_c \quad (76)$$

8 Лекция 8. Идеальный ферми-газ

8.1 Термодинамика ферми-газа

Рассмотрим систему, находящуюся в термостате, с которым может происходить обмен частиц. Распределение Гиббса в этом случае запишется

$$w_{nN} = A e^{\frac{\mu N - E_{nN}}{T}} \quad (1)$$

здесь μ —химический потенциал, а E_{nN} — энергия системы, содержащей N частиц и находящейся в n — квантовом состоянии. Для определения нормировочной константы A вычислим энтропию системы

$$S = - \langle \ln w_{nN} \rangle = - \ln A - \frac{\mu \bar{N}}{T} + \frac{\bar{E}}{T} \quad (2)$$

Тогда $\ln A = \bar{E} - TS - \mu \bar{N} = F - \Phi = -pV = \Omega$. Таким образом, выражение для термодинамического потенциала системы получается из условия нормировки

$$\sum_{nN} w_{nN} = 1 \quad (3)$$

откуда

$$\Omega = -T \ln \sum_N e^{\frac{\mu N}{T}} \sum_n e^{-\frac{E_{nN}}{T}} \quad (4)$$

Отсюда следует, что

$$\bar{n} = \frac{\sum_N N e^{\frac{\mu N}{T}} \sum_n e^{-\frac{E_{nN}}{T}}}{\sum_N e^{\frac{\mu N}{T}} \sum_n e^{-\frac{E_{nN}}{T}}} = - \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \quad (5)$$

В представлении вторичного квантования гамильтониан системы невзаимодействующих электронов имеет вид

$$H = \sum_k \varepsilon_k n_k \quad (6)$$

где ε_k - энергия электрона в состоянии k , n_k — оператор числа частиц в этом состоянии, имеющий собственные значения 0, 1. Тогда потенциал Ω записывается в виде

$$\Omega = -T \ln \sum_{n_1, n_2, \dots, n_N} e^{-\frac{\sum_k (\varepsilon_k - \mu) n_k}{T}} = -T \sum_k \ln \left(1 + e^{\frac{(\varepsilon_k - \mu)}{T}} \right) = \sum_k \Omega_k \quad (7)$$

Аддитивность потенциала Ω по индексу k означает, что частицы находящиеся в состоянии k можно рассматривать как подсистему, находящуюся в термостате и обменивающейся частицами с последним. Тогда в силу соотношения (5) для среднего числа частиц в некотором квантовом состоянии k получим

$$\bar{n}_k = - \frac{\partial \Omega_k}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\frac{(\varepsilon_k - \mu)}{T}} + 1} \quad (8)$$

Для свободного электронного газа имеем

$$\varepsilon = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \quad (9)$$

Число состояний в элементе фазового пространства $dp_x dp_y dp_z dV$ равно

$$g \frac{dp_x dp_y dp_z dV}{(2\pi\hbar)^3} \quad (10)$$

$g = 2s + 1$, где s – спин частицы. Откуда число частиц в этом элементе фазового пространства равно

$$dN_p = \frac{\bar{n}_k g dp_x dp_y dp_z dV}{(2\pi\hbar)^3} \quad (11)$$

Переходя к сферическим координатам получим

$$dN_p = \frac{gV p^2 dp}{2\pi^2 \hbar^3 \left(e^{\frac{(\varepsilon_p - \mu)}{T}} + 1 \right)} \quad (12)$$

Учитывая, что $\varepsilon = p^2/2m$, получим распределение по энергиям

$$dN_\varepsilon = \frac{gV m^{3/2} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3 \left(e^{\frac{(\varepsilon - \mu)}{T}} + 1 \right)} = \frac{bV \varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{e^{\frac{(\varepsilon - \mu)}{T}} + 1} \quad (13)$$

Полное число частиц в системе имеет вид

$$N = \int dN_\varepsilon = bV \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{e^{\frac{(\varepsilon - \mu)}{T}} + 1} \quad (14)$$

Энергия системы имеет вид

$$E = \int \varepsilon dN_\varepsilon = bV \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2} d\varepsilon}{e^{\frac{(\varepsilon - \mu)}{T}} + 1} \quad (15)$$

Термодинамический потенциал

$$\Omega = -bVT \int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \ln \left(1 + e^{\frac{(\mu - \varepsilon)}{T}} \right) d\varepsilon \quad (16)$$

Интегрируя это выражение по частям, получим

$$\Omega = -\frac{2}{3} bV \int \frac{\varepsilon^{3/2} d\varepsilon}{e^{\frac{(\varepsilon - \mu)}{T}} + 1} \quad (17)$$

Откуда имеем

$$\Omega = -\frac{2}{3} E \quad (18)$$

Поскольку $\Omega = -pV$, то

$$p = \frac{2}{3} b \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2} d\varepsilon}{e^{\frac{(\varepsilon - \mu)}{T}} + 1} \quad (19)$$

Перепишем это соотношение в виде

$$p = \frac{2}{3} b T^{5/2} \int_0^\infty \frac{z^{3/2} dz}{e^{z - \frac{\mu}{T}} + 1} \quad (20)$$

Выражение для числа электронов в системе в этих же обозначениях имеет вид

$$\frac{N}{V} = \frac{2}{3} b T^{3/2} \int_0^\infty \frac{z^{1/2} dz}{e^{z - \frac{\mu}{T}} + 1} \quad (21)$$

При равной нулю температуре выражение для давления (19) переписывается

$$p = b \mu^{5/2} (0) \quad (22)$$

Ниже будет показано (см. (30)) $\mu(0) = \varepsilon_F \sim (N/V)^{2/3}$. Поэтому давление ферми-газа при нулевой температуре пропорционально его плотности в степени $5/3$.

Вычислим теплоемкость многоэлектронной системы. Из (15) имеем

$$c = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = b \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \frac{\partial}{\partial T} f(\varepsilon) \quad (23)$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{(\varepsilon - \mu)}{T}} + 1} \quad (24)$$

Производная $\frac{\partial}{\partial T} f(\varepsilon)$ имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \frac{1}{T} \frac{e^{\frac{(\varepsilon - \mu)}{T}}}{\left(e^{\frac{(\varepsilon - \mu)}{T}} + 1 \right)^2} \left(\frac{(\varepsilon - \mu)}{T} + \mu' \right) \quad (25)$$

С другой стороны,

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{T} \frac{e^{\frac{(\varepsilon - \mu)}{T}}}{\left(e^{\frac{(\varepsilon - \mu)}{T}} + 1 \right)^2} \quad (26)$$

Следовательно,

$$\frac{\partial f}{\partial T} = -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \left(\frac{(\varepsilon - \mu)}{T} + \mu' \right) \quad (27)$$

Подставляя (27) в (23) и в соотношение $\frac{\partial N}{\partial T} = 0$ (см. (14)), означающее постоянство числа частиц при изменении температуры, получим

$$\begin{aligned} c &= -b \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \left(\frac{(\varepsilon - \mu)}{T} + \mu' \right) d\varepsilon \\ \int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \left(\frac{(\varepsilon - \mu)}{T} + \mu' \right) d\varepsilon &= 0 \end{aligned} \quad (28)$$

При $T \rightarrow 0$ функция распределения $f(\varepsilon) \rightarrow \theta(\varepsilon_F - \varepsilon)$, то есть заполнены все состояния с энергией $0 < \varepsilon < \varepsilon_F$. Подставляя это предельное выражение для функции распределения в (14), получим

$$N = bV \int_0^\infty \theta(\varepsilon_F - \varepsilon) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon = \frac{2}{3} bV \varepsilon_F^{3/2} \quad (29)$$

Откуда

$$\varepsilon_F = \left(\frac{3N}{2bV} \right)^{2/3} \quad (30)$$

Теория ферми-газа обычно применяется к металлам, для которых в области комнатных температур $T \ll \varepsilon_F$.

В приложениях полезной оказывается полезная формула для вычисления интегралов следующего вида

$$\int F(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \quad (31)$$

Представим формулу (26) в виде

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{4T} \frac{1}{ch^2 \left(\frac{\varepsilon - \mu}{2T} \right)^2} \quad (32)$$

По мере удаления от точки $\varepsilon = \mu$, эта функция быстро убывает, поэтому пределы интегрирования в интеграле (31) можно заменить на $\pm\infty$. По этой же причине в (31) для функции $F(\varepsilon)$ можно ограничиться конечным числом членов в разложении

$$F(\varepsilon) = F(\mu) + (\varepsilon - \mu) F'(\mu) + \frac{1}{2} (\varepsilon - \mu)^2 F''(\mu) \dots \quad (33)$$

В силу четности функции (32) вклад в интеграл (31) дают только четные члены разложения (33). Оставшиеся интегралы равны

$$\int \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = -1$$

$$\int (\varepsilon - \mu)^2 \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = -\frac{1}{4T} \int \frac{z^2}{ch^2(z/2T)} dz = -\frac{\pi^2 T^2}{3} \quad (34)$$

Таким образом,

$$\int F(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = -F(\mu) - \frac{\pi^2 T^2}{6} F''(\mu) \quad (35)$$

Применяя правило (35) к интегралам (28), получаем

$$c = -b \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \left(\frac{(\varepsilon - \mu)}{T} + \mu' \right) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = b\mu^{3/2} \frac{\partial \mu}{\partial T} + \frac{\pi^2 T^2}{6} b \left(\frac{3}{4\mu^{1/2}} \frac{\partial \mu}{\partial T} + 3\mu^{1/2}/T \right) \quad (36)$$

и

$$\int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \left(\frac{(\varepsilon - \mu)}{T} + \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = \mu^{1/2} \frac{\partial \mu}{\partial T} + \frac{\pi^2 T^2}{6} \left(-\frac{1}{4} \mu^{-3/2} \frac{\partial \mu}{\partial T} + \mu^{-1/2}/T \right) = 0 \quad (37)$$

Второй член в (37) содержит дополнительный малый множитель $\left(\frac{T}{\mu} \right)^2$, и им можно пренебречь. Тогда

$$\frac{\partial \mu}{\partial T} = -\frac{\pi^2 T}{6\mu} \quad (38)$$

Соотношение (38) позволяет опустить первый член в скобках в правой части (36), малый по сравнению со вторым по параметру $\left(\frac{T}{\mu} \right)^2$. Поэтому, подставляя (38) в (36) для теплоемкости имеем

$$c = \frac{\pi^2 b T}{3\mu} \quad (39)$$

То есть теплоемкость вырожденного ферми-газа линейно зависит от температуры. Этот результат не зависит от размерности системы.

8.2 Магнетизм электронного газа

Рассматривается электронный газ в магнитном поле. Наличие спинового магнитного момента приводит к тому, что спины выстраиваются вдоль магнитного поля - парамагнитный эффект. Однако, наряду с парамагнетизмом электронный газ обнаруживает и диамагнитные свойства, имеющие чисто квантовое происхождение. Это следует из известной из теории поля теоремы Бора - Дорфмана - ван-Леевен. Качественно это можно понять из того, что сила Лоренца действующая на заряд в *постоянном* магнитном поле перпендикулярна его скорости и не выполняет над ним работу. Поэтому энергия электрона (если отвлечься от энергии спина в магнитном поле) не зависит от поля и магнитный момент $\mathcal{M} = -\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathcal{H}} = 0$.

Как показал Ландау, энергия электрона в постоянном магнитном поле, направленном по оси z , квантуется в поперечном направлении и имеет вид

$$\varepsilon(p_z, \mathcal{H}) = \mu_B \mathcal{H} (2n + 1) + \frac{p_z^2}{2m} \pm \mu_B \mathcal{H}, n = 0, 1, \dots \quad (40)$$

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ — магнетон Бора, \mathcal{H} — величина магнитного поля, направленного по оси z .

Для вывода формулы (40) рассмотрим уравнение Шредингера для электрона в магнитном поле, направленном по оси z . Выберем вектор потенциал в виде $A_y = \mathcal{H}x$, $A_x = A_z = 0$. Уравнение Шредингера запишется

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla_y - \frac{e}{c} \mathcal{H}x \right)^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \psi}{\partial z^2} = \varepsilon \psi \quad (41)$$

Решение этого уравнения следует искать в виде

$$\psi(x, y, z) = e^{-ip_y y / \hbar} e^{-ip_z z / \hbar} \psi(x) \quad (42)$$

Подставляя (42) в (41), получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{e}{c} \mathcal{H}x \right)^2 \psi(x) + \frac{p_z^2}{2m} \psi(x) = \varepsilon \psi(x) \quad (43)$$

или

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{2mc^2} \left(x - \frac{cp_y}{e\mathcal{H}} \right)^2 \psi(x) = \left(\varepsilon - \frac{p_z^2}{2m} \right) \psi(x) \quad (44)$$

Введем обозначение $\omega = \frac{e\mathcal{H}}{c}$. Тогда последнее уравнение переписется в виде уравнения Шредингера для осциллятора, с точкой равновесия, смещенной в $\frac{cp_y}{e\mathcal{H}}$. Энергетический спектр полученного уравнения Шредингера совпадает с выражением (40), в котором учтена энергия спина в магнитном поле.

Вычислим число состояний с фиксированным n и продольным импульсом в интервале $(p_z, p_z + dp_z)$. Рассмотрим движение электрона в прямоугольном ящике размера L_x, L_y, L_z . По своему физическому смыслу $x_0 = \frac{cp_y}{e\mathcal{H}}$ есть равновесное положение осциллятора, которое должно находиться в пределах ящика

$$0 < \frac{cp_y}{e\mathcal{H}} < L_x \Leftrightarrow 0 < p_y < \frac{e\mathcal{H}L_x}{c} \quad (45)$$

Число состояний в интервале dp_y и dp_z совпадает с таковым для свободного движения

$$dn_y = dp_y L_y / 2\pi\hbar \quad (46)$$

$$dn_z = dp_z L_z / 2\pi\hbar \quad (47)$$

Число состояний с фиксированным n и продольным импульсом в интервале $(p_z, p_z + dp_z)$ равно

$$\rho_z dp_z = \frac{V}{(2\pi\hbar)^2} \frac{e\mathcal{H}}{c} dp_z \quad (48)$$

Запишем выражение для Ω -потенциала электронного газа в форме

$$\Omega(\mu, \mathcal{H}, T) = -T \sum_q \ln(1 + e^{(\mu - \varepsilon_q)/T}) \quad (49)$$

где символ q обозначает набор индексов, определяющих состояние электрона - n, p_z и проекцию спина на направление магнитного поля. Поэтому

$$\sum_q \dots = \sum_{spin} \sum_{n=0}^{\infty} \int \rho_z dp_z \dots \quad (50)$$

При $V = const$ имеем

$$d\Omega = -SdT - MVd\mathcal{H} - Nd\mu \quad (51)$$

Откуда получаем выражения для числа частиц и намагниченности

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, \mathcal{H}}, \quad M = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{H}} \right). \quad (52)$$

Для дальнейшего воспользуемся тремя формулами

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \frac{\pi\lambda}{\sin \pi\lambda} \frac{e^{\lambda\xi}}{\lambda^2} d\lambda = \ln(1 + e^\xi) \quad (53)$$

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \frac{e^{\lambda\xi}}{\lambda^2} d\lambda = \xi\theta(\xi), \quad (54)$$

где $\theta(\xi)$ – ступенчатая функция Хевисайда и

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\lambda\xi}}{4ch^2 \frac{\xi}{2}} d\xi = \frac{\pi\lambda}{\sin \pi\lambda} \quad (55)$$

Используя формулу (53), преобразуем (49) к виду

$$\Omega(\mu, \mathcal{H}, T) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \frac{\pi\lambda T}{\sin \pi\lambda T} \frac{\sum_q e^{\lambda(\mu - \varepsilon_q)}}{\lambda^2} d\lambda \quad (56)$$

С помощью (55) приведем (56) к виду

$$\Omega(\mu, \mathcal{H}, T) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \frac{d\lambda}{\lambda^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\sum_q e^{\lambda(\xi T + \mu - \varepsilon_q)}}{4ch^2 \frac{\xi}{2}} \quad (57)$$

Положим в (100) $T = 0$ и проинтегрируем по ξ (используя то, что интеграл (55) равен единице в пределе $\lambda \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned}\Omega(\mu, \mathcal{H}, 0) &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+\infty} \frac{\sum_q e^{\lambda(\mu-\varepsilon_q)} d\lambda}{\lambda^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{4ch^2 \frac{\xi}{2}} = \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+\infty} \frac{\sum_q e^{\lambda(\mu-\varepsilon_q)} d\lambda}{\lambda^2}\end{aligned}\quad (58)$$

Изменим в (100) порядок интегрирования

$$\begin{aligned}\Omega(\mu, \mathcal{H}, T) &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+\infty} \frac{d\lambda}{\lambda^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\sum_q e^{\lambda(\xi T + \mu - \varepsilon_q)}}{4ch^2 \frac{\xi}{2}} \quad (59) \\ \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{-\frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+\infty} \frac{d\lambda}{\lambda^2} \sum_q e^{\lambda(\xi T + \mu - \varepsilon_q)}}{4ch^2 \frac{\xi}{2}} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\Omega(\mu + \xi T, \mathcal{H}, 0)}{4ch^2 \frac{\xi}{2}} = \\ &= \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{\Omega(u, \mathcal{H}, 0)}{4ch^2 \frac{u-\mu}{2T}}\end{aligned}$$

Таким образом, мы связали термодинамический потенциал Ω при произвольной температуре с его значением при $T = 0$. Из предыдущей лекции мы знаем, что $(4Tch^2 \frac{u-\mu}{2T})^{-1} = -\frac{\partial f}{\partial u} = \delta(u - \mu)$. То есть выражение (59) непротиворечиво.

Воспользуемся теперь формулой (54) и преобразуем (58) к виду

$$\Omega(\mu, \mathcal{H}, 0) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_q \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+\infty} \frac{e^{\lambda(\mu-\varepsilon_q)} d\lambda}{\lambda^2} = -\sum_q (\mu - \varepsilon_q) \theta(\mu - \varepsilon_q) \quad (60)$$

Выполним вначале суммирование по n и по проекции спина. Заметим, что разность $\mu - \varepsilon$ для квантового числа $n - 1$ и спина направленного по полю равна значению этой разности для квантового числа n и спина направленного против поля

$$\begin{aligned}\mu - \mu_B \mathcal{H} [2(n-1) + 1] - \frac{p_z^2}{2m} - \mu_B \mathcal{H} &= \\ \mu - \mu_B \mathcal{H} [2n + 1] - \frac{p_z^2}{2m} + \mu_B \mathcal{H} &= \mu - 2n\mu_B \mathcal{H} - \frac{p_z^2}{2m}\end{aligned}\quad (61)$$

Это имеет место кроме квантового числа $n = 0$ и спина направленного вверх. Поэтому

$$\Omega(\mu, \mathcal{H}, 0) = -\frac{V}{(2\pi\hbar)^2} \frac{e\mathcal{H}}{c} \int dp_z \left[\left(\mu - \frac{p_z^2}{2m} \right) + 2 \sum_{n=1} \left(\mu - 2n\mu_B \mathcal{H} - \frac{p_z^2}{2m} \right) \right] \quad (62)$$

Интегрирование по p_z проходит в пределах $-\sqrt{2m(\mu - 2n\mu_B \mathcal{H})}$, $\sqrt{2m(\mu - 2n\mu_B \mathcal{H})}$

$$\begin{aligned}\int dp_z \left(\mu - 2n\mu_B \mathcal{H} - \frac{p_z^2}{2m} \right) &= 2 \cdot (\mu - 2n\mu_B \mathcal{H}) \sqrt{2m(\mu - 2n\mu_B \mathcal{H})} \\ -\frac{2}{3 \cdot 2m} (2m(\mu - 2n\mu_B \mathcal{H}))^{3/2} &= \frac{4}{3} \sqrt{2m} (\mu - 2n\mu_B \mathcal{H})^{3/2}\end{aligned}\quad (63)$$

Введем обозначения для химического потенциала газа при $T = 0$

$$\mu_0 = \left(\frac{3N}{8\pi V} \right)^{2/3} \frac{(2\pi\hbar)^2}{2m} \quad (64)$$

Тогда

$$\frac{V}{(2\pi\hbar)^2} \frac{e\mathcal{H}}{c} \frac{4}{3} \sqrt{2m} = \frac{8\pi V}{3N} \frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e\mathcal{H}\hbar \cdot N}{c} \frac{1}{2m} = \mu_B N \mathcal{H} \frac{1}{\mu_0^{3/2}} \quad (65)$$

Подставляя (63) и (102) в (62), получим

$$-\Omega(\mu, \mathcal{H}, 0) = \mu_B N \mathcal{H} \left[\left(\frac{\mu}{\mu_0} \right)^{3/2} + 2 \sum_{n=1}^l \left(\frac{\mu - 2n\mu_B \mathcal{H}}{\mu_0} \right)^{3/2} \right] \quad (66)$$

Перепишем это выражение в виде

$$-\Omega(\mu, \mathcal{H}, 0) = N \mu_0 \left(\frac{\mu_B \mathcal{H}}{\mu_0} \right)^{5/2} \left[\left(\frac{\mu}{\mu_B \mathcal{H}} \right)^{3/2} + 2 \sum_{n=1}^l \left(\frac{\mu}{\mu_B \mathcal{H}} - 2n \right)^{3/2} \right] \quad (67)$$

Теперь введем обозначение

$$x = \frac{\mu}{\mu_B \mathcal{H}} \quad (68)$$

и

$$R_a(x) = ax^{a-1} + 2a \sum_{n=1}^{\infty} (x - 2n)^{a-1} \theta(x - 2n) \quad (69)$$

Дифференцируя последнее выражение

$$\frac{\partial R_a(x)}{\partial x} = a \left[(a-1)x^{a-2} + 2(a-1) \sum_{n=1}^{\infty} (x-2n)^{a-2} \theta(x-2n) \right] + 2a \sum_{n=1}^{\infty} (x-2n)^{a-1} \delta(x-2n) \quad (70)$$

Отсюда следует, что для любого $a > 1$

$$\frac{\partial R_a(x)}{\partial x} = a R_{a-1}(x) \quad (71)$$

Итак,

$$-\Omega(\mu, \mathcal{H}, 0) = \frac{2}{5} N \mu_0 \left(\frac{\mu_B \mathcal{H}}{\mu_0} \right)^{5/2} R_{5/2}(x) \quad (72)$$

Из (52), (71), (72) имеем

$$N = N \left(\frac{\mu_B \mathcal{H}}{\mu_0} \right)^{3/2} R_{3/2}(x) \quad (73)$$

Откуда следует, что

$$\frac{\mu_0}{\mu_B \mathcal{H}} = [R_{3/2}(x)]^{2/3} \quad (74)$$

или

$$\frac{\mu}{\mu_0} = x [R_{3/2}(x)]^{-2/3} \quad (75)$$

Определив восприимчивость как,

$$\chi = \frac{M}{\mathcal{H}} = -\frac{1}{V\mathcal{H}} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{H}} \right) = \frac{N}{V} \frac{\mu_B^2}{\mu_0} \left(\frac{\mu_B \mathcal{H}}{\mu_0} \right)^{1/2} (R_{5/2}(x) - x R_{3/2}(x)) \quad (76)$$

и введя обозначение $\chi_0 = \frac{N \mu_B^2}{V \mu_0}$, находим

$$\frac{\chi(\mathcal{H}, 0)}{\chi_0} = (R_{5/2}(x) - x R_{3/2}(x)) [R_{3/2}(x)]^{-1/3} \quad (77)$$

Рассмотрим некоторые предельные случаи.

А. Сильные поля. Если

$$\frac{\mu}{\mu_B \mathcal{H}} < 2, \quad (78)$$

то в (67), (69) выживет только первый член и

$$R_{5/2}(x) = 5/2x^{3/2}, R_{3/2}(x) = 3/2x^{1/2} \quad (79)$$

Тогда, подставляя эти оценки (75) и (77) и используя (68), получим

$$\frac{\mu}{\mu_0} = \left(\frac{2}{3}\right)^{2/3} \left(\frac{\mu}{\mu_B \mathcal{H}}\right)^{2/3} \quad (80)$$

Откуда

$$\frac{\mu}{\mu_0} = \frac{4}{9} \left(\frac{\mu_0}{\mu_B \mathcal{H}}\right)^2 \quad (81)$$

Аналогично можно получить выражение для восприимчивости

$$\frac{\chi(\mathcal{H}, 0)}{\chi_0} = \frac{8}{27} \left(\frac{\mu_0}{\mu_B \mathcal{H}}\right)^4 \quad (82)$$

Б. Чуть сложнее исследуется случай слабых полей $x \gg 1$. Выведем асимптотическое выражение для функции $R_a(x)$. Из (69) имеем

$$\begin{aligned} a^{-1} R_a(2l) &= (2l)^{a-1} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (2l - 2n)^{a-1} \theta(2l - 2n) = \\ &= (2l)^{a-1} + 2^a [(l-1)^{a-1} + (l-2)^{a-1} + \dots + 2^{a-1} + 1^{a-1}] = 2^a \sum_{n=1}^l n^{a-1} - (2l)^{a-1} \end{aligned} \quad (83)$$

Для оценки этого выражения воспользуемся формулой Эйлера (вывод см. в конце лекции)

$$\sum_{k=1}^l f(k) = \int_{1/2}^{l+1/2} f(x) dx - \frac{1}{24} [f'(l+1/2) - f'(1/2)] \quad (84)$$

Согласно этой формуле при $a > 2$,

$$\sum_{n=1}^l n^{a-1} = \int_{1/2}^{l+1/2} n^{a-1} dn - \frac{a-1}{24} [(l+1/2)^{a-2} - 1/2^{a-2}] \quad (85)$$

$$\approx \frac{(l+1/2)^a - 1/2^a}{a} - \frac{a-1}{24} l^{a-2} \quad (86)$$

$$= \frac{l^a \left(1 + \frac{a}{2l} + \frac{a(a-1)}{2 \cdot (2l)^2}\right)}{a} - \frac{a-1}{6} (2l)^{a-2} \quad (87)$$

Домножим ответ на $2^a a$ и вычтем $a(2l)^{a-1}$ (см. (83))

$$R_a(2l) = (2l)^a - \frac{a(a-1)}{6} (2l)^{a-2} \quad (88)$$

$$R_a(x) = x^a \left(1 + \frac{a(a-1)}{3x^2} \right) \quad (89)$$

Эта оценка справедлива для $a > 2$. Для термодинамического потенциала

$$-\Omega(\mu, \mathcal{H}, 0) = \frac{2}{5} N \mu_0 \left(\frac{\mu_B \mathcal{H}}{\mu_0} \right)^{5/2} x^{5/2} \left[1 + \frac{5}{4x^2} \right] = \quad (90)$$

$$\frac{2}{5} N \mu_0 \left(\frac{\mu}{\mu_0} \right)^{5/2} \left[1 + \frac{5}{4} \left(\frac{\mu_B \mathcal{H}}{\mu} \right)^2 \right] \quad (91)$$

Тогда

$$N = -\frac{\partial \Omega(\mu, \mathcal{H}, 0)}{\partial \mu} = N \left[\left(\frac{\mu}{\mu_0} \right)^{3/2} + \frac{(\mu_B \mathcal{H})^2}{4\mu_0^{3/2} \mu^{1/2}} \right] \quad (92)$$

Откуда следует, что в нулевом магнитном поле $\mu = \mu_0$. В слабом магнитном поле $\mu = \mu_0 + \Delta\mu$

$$\frac{3\Delta\mu}{2\mu_0} = -\frac{(\mu_B \mathcal{H})^2}{4\mu_0^{3/2} \mu^{1/2}} \quad (93)$$

$$\Delta\mu/\mu_0 = -\frac{(\mu_B \mathcal{H})^2}{6\mu_0^2} \quad (94)$$

Намагниченность

$$\mathcal{M} = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{H}} \right)_{\mu, T} = N \frac{\mu_B^2 \mathcal{H}}{\mu_0} \quad (95)$$

а для восприимчивости

$$\frac{\chi(\mathcal{H}, 0)}{\chi_0} \approx 1 \quad (96)$$

Последнее выражение показывает, что свободный электронный газ всегда парамагнитен. Напомним, что при пренебрежении квантованием электронных уровней в магнитном поле, магнетизм электронного газа связан только с наличием спинового магнитного момента, при этом парамагнитная восприимчивость равна $\chi_{para} = 3\chi_0/2$. Таким образом, учет квантования приводит к диамагнитному эффекту $\chi_{dia} = -\chi_0/2$.

Несмотря на то, что свободный электронный газ, в целом, парамагнитен, в природе существует большое число диамагнитных металлов. Этот кажущийся парадокс разрешается следующим образом. Связанная с спином парамагнитная восприимчивость зависит от массы электрона через магнетон Бора, который определяется массой голого электрона. В то же время, поступательное движение электрона в металле, приводящее к диамагнитному эффекту, определяется эффективной массой электрона в металле m_* . При этом оказывается, что

$$\chi_{para}/\chi_{dia} = 1/3 (m/m_*) \quad (97)$$

Эта величина может быть больше единицы.

Рассмотрим предельный случай высоких температур $T \gg \mu_B \mathcal{H}$. В этой области температур химпотенциал имеет большое отрицательное значение (это физически понятно и, кроме того, будет подтверждено ниже расчетом). Используя это обстоятельство, можно записать

$$-\Omega(\mu, \mathcal{H}, T) = T \sum_q e^{(\mu - \varepsilon_q)/T} = T \sum_{spin} \sum_{n=0}^{\infty} \int dp_z \frac{V}{(2\pi\hbar)^2} \frac{e\mathcal{H}}{c} e^{\frac{\mu - \mu_B \mathcal{H}(2n+1) - \frac{p_z^2}{2m} \mp \mu_B \mathcal{H}}{T}} \quad (98)$$

Выполним интегрирование

$$\int dp_z e^{-\frac{p_z^2}{2mT}} = (2\pi mT)^{1/2}, \quad (99)$$

суммирование

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\mu_B \mathcal{H}(2n+1)}{T}} = \frac{1}{e^{\frac{\mu_B \mathcal{H}}{T}} - e^{-\frac{\mu_B \mathcal{H}}{T}}} \quad (100)$$

и суммирование по проекции спина, получим

$$\begin{aligned} -\Omega(\mu, \mathcal{H}, T) &= \frac{VT(2\pi mT)^{1/2}}{(2\pi\hbar)^2} \frac{e\mathcal{H}}{c} \frac{e^{\frac{\mu_B \mathcal{H}}{T}} + e^{-\frac{\mu_B \mathcal{H}}{T}}}{e^{\frac{\mu_B \mathcal{H}}{T}} - e^{-\frac{\mu_B \mathcal{H}}{T}}} e^{\frac{\mu}{T}} = \\ &= \frac{V}{4} \left(\frac{2m}{\pi\hbar^2} \right)^{3/2} T^{5/2} e^{\frac{\mu}{T}} \frac{\mu_B \mathcal{H}}{T} \operatorname{cth} \frac{\mu_B \mathcal{H}}{T} \end{aligned} \quad (101)$$

Число частиц получим дифференцированием последнего выражения по химпотенциалу

$$N = \frac{V}{4} \left(\frac{2mT}{\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\mu}{T}} \operatorname{cth} \frac{\mu_B \mathcal{H}}{T} \quad (102)$$

Логарифмируя (102), находим выражение для химпотенциала

$$\mu = -T \ln \left[\frac{V}{4N} \left(\frac{2mT}{\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{\mu_B \mathcal{H}}{T} \operatorname{cth} \frac{\mu_B \mathcal{H}}{T} \right], \quad (103)$$

которое являясь большим отрицательным числом в случае высоких температур переходит в выражение для химпотенциала больцмановского газа в отсутствие внешних полей.

Для намагниченности получим

$$\begin{aligned} M(H, T) &= -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{H}} \right)_{\mu T} = \\ &= \frac{1}{4\mathcal{H}} \left(\frac{2m}{\pi\hbar^2} \right)^{3/2} T^{5/2} e^{\frac{\mu}{T}} \left(\frac{\mu_B \mathcal{H}}{T} \operatorname{cth} \frac{\mu_B \mathcal{H}}{T} - \left(\frac{\mu_B \mathcal{H}}{T} \right)^2 \right) \end{aligned} \quad (104)$$

Подставляя сюда выражение (103) для химпотенциала получим

$$M(H, T) = \frac{N\mu_B}{V} \frac{T}{\mu_B \mathcal{H}} \left(1 - \frac{\frac{2\mu_B \mathcal{H}}{T}}{\operatorname{sh} \left(\frac{2\mu_B \mathcal{H}}{T} \right)} \right) \quad (105)$$

Это выражение существенно отличается от ланжевенновской зависимости $M(H, T) = \frac{N\mu_B}{V} th \frac{\mu_B \mathcal{H}}{T}$, которое в области высоких температур приводит к насыщению намагниченности. Эта зависимость не учитывает диамагнитного эффекта. В области высоких температур $T \gg \mu_0$ и сильных магнитных полей $T \ll \mu_B \mathcal{H}$ учет диамагнетизма приводит к тому, что намагнитченность монотонно как $1/\mathcal{H} \rightarrow 0$.

Перейдем теперь к исследованию осцилляционных эффектов в ферми-газе.

Еще в 1931 году де Гааз и ван Альфен экспериментально обнаружили периодическое изменение магнитной восприимчивости в висмуте при изменении магнитного поля в области низких температур.

Выше подробно был исследован случай низких (в пределе нулевых) температур. Мы выяснили, что если поле достаточно сильное $\frac{\mu}{\mu_B \mathcal{H}} < 2$ (см. (78)), то имеет место монотонная зависимость химического потенциала и восприимчивости с ростом поля. Эта область не представляет практического интереса и едва ли достижима. Затем была получена первая поправка к химическому потенциалу.

Проанализируем теперь, поведение восприимчивости в области слабых магнитных полей $\mu_B \mathcal{H} \ll \mu_0$. Для простоты рассмотрим случай нулевых температур ограничимся исследованием эффектов в двумерном ферми-газе. В этом случае уровни энергии равны

$$\varepsilon_l(\mathcal{H}) = \mu_B \mathcal{H} (2l + 1), l = 0, 1, \dots \quad (106)$$

В двумерном случае для степени вырождения уровня имеем

$$g_l = 2 \frac{S}{2\pi\hbar} \frac{e\mathcal{H}}{c} \equiv \beta\mathcal{H}, \beta = \frac{S}{\pi\hbar} \frac{e}{c}. \quad (107)$$

Здесь S — площадь системы. Если g_l больше полного числа электронов то *все* они занимают состояние с $l = 0$. При этом, полная энергия равна $\mathcal{E} = N\mu_B \mathcal{H}$, намагниченность $\mathcal{M} = -N\mu_B$, а восприимчивость равна нулю. По мере уменьшения магнитного поля уменьшается энергия до тех пор, пока g_l не станет меньше N . Тогда, вследствие принципа Паули, часть электронов перейдет на уровень с $l = 1$. При этом энергия системы возрастет с уменьшением поля и система становится парамагнитной.

Найдем общее выражение для энергии системы \mathcal{E} , когда N электронов полностью заполняют r низших уровней Ландау и, частично $r + 1$ уровень, согласно неравенству

$$r\beta\mathcal{H} < N < (r + 1)\beta\mathcal{H} \quad (108)$$

или

$$N/(r + 1) < \beta\mathcal{H} < N/r \quad (109)$$

При этом предполагается, что

$$\beta\mathcal{H}/N < 1. \quad (110)$$

Напомним, что уровню с номером r отвечает $l = r - 1$ в (106). Энергия электронов целиком, заполняющих r первых уровней, равна

$$g_l \sum_{l=0}^{r-1} \mu_B \mathcal{H} (2l + 1) = \beta \mu_B \mathcal{H}^2 r^2 \quad (111)$$

Энергия остальных $(N - rg_l)$ электронов частично заполняющих $r + 1$ уровень равна

$$(N - rg_l) \mu_B \mathcal{H} (2r + 1) \quad (112)$$

Полная энергия

$$\mathcal{E} = N \mu_B \mathcal{H} (2r + 1) - \beta \mu_B \mathcal{H}^2 r (r + 1) \quad (113)$$

В интервале значений поля, определенных неравенством (109), имеем

$$\mathcal{M} = -\partial \mathcal{E} (\mathcal{H}, r) / \partial \mathcal{H} = -N \mu_B [(2r + 1) - 2r (r + 1) \beta \mathcal{H} / N] \quad (114)$$

Вывод этой формулы справедлив при условии, когда уровень с $r = 1$ ($l = 0$) заполнен полностью, то есть при выполнении условия (110).

Итак, намагниченность как функция магнитного поля ведет себя следующим образом. Если $\beta \mathcal{H} / N > 1$, то первый уровень Ландау заполнен частично, намагниченность $\mathcal{M} = -N \mu_B$, а восприимчивость не зависит от температуры. В области магнитных полей

$$N/2 < \beta \mathcal{H} < N \quad (115)$$

намагниченность имеет вид

$$\mathcal{M} = -N \mu_B [3 - 4\beta \mathcal{H} / N] \quad (116)$$

и с уменьшением поля падает по закону $4\mu_B \beta \mathcal{H}$, изменяясь от значения $N \mu_B$ до значения $-N \mu_B$. Таким образом, при достижении полем значения $\mathcal{H} = N/\beta$ начинает заполняться второй уровень Ландау, что сопровождается скачком намагниченности от значения $-N \mu_B$ до значения $N \mu_B$. Далее, после того, как магнитное поле станет меньше значения $\mathcal{H} = N/2\beta$, начнется заполнение третьего уровня Ландау, а намагниченность опять скачком возрастет от значения $-N \mu_B$ до значения $N \mu_B$ с последующим изменением по закону $12\beta \mathcal{H} / N$ до достижения значения $-N \mu_B$ и т.д. Этот результат был получен Пайерлсом в 1933 гду

Выведем формулу суммирования Пуассона.

Рассмотрим интеграл от "хорошей функции"

$$\int_{1/2}^{l+1/2} f(x) dx \quad (117)$$

Аппроксимируем функцию $f(x)$ на интервале $k - 1/2, k + 1/2, k = 1, 2, 3 \dots l$ следующим образом

$$f(x) = f(k) + f'(k)(x - k) + \frac{1}{2} f''(k)(x - k)^2 \quad (118)$$

Подставляя (86) в (41), и вычисляя интеграл получим (интеграл от первой производной обращается в нуль)

$$\int_{1/2}^{l+1/2} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^l \left[f(k) + \frac{1}{2} f''(k) \int_{k-1/2}^{k+1/2} (x - k)^2 dx \right] = \sum_{k=1}^l \left[f(k) + \frac{1}{24} f''(k) \right] \quad (119)$$

Перепишем (83) в виде

$$\sum_{k=1}^l f(k) = \int_{1/2}^{l+1/2} f(x) dx - \frac{1}{24} \sum_{k=1}^l f''(k) \quad (120)$$

Применим эту формулу к сумме $\sum_{k=1}^l f''(k)$. С требуемой точностью можно ограничиться только интегралом

$$\sum_{k=1}^l f''(k) \approx \int_{1/2}^{l+1/2} f''(x) dx = f'(l+1/2) - f'(1/2) \quad (121)$$

В результате получим

$$\sum_{k=1}^l f(k) = \int_{1/2}^{l+1/2} f(x) dx - \frac{1}{24} [f'(l+1/2) - f'(1/2)] \quad (122)$$

8.3 Электрон в периодической кристаллической решетке

Одной из причин того, что металлы являются хорошими проводниками, является перекрытие электронных оболочек валентных электронов атомов, составляющих кристаллическую решетку. Это перекрытие приводит к тому, что упомянутые электроны уже не принадлежат каким либо определенным атомам - происходит их коллективизация. Во многих случаях хорошим приближением является неизменность внутренних оболочек атомов вследствие малости их перекрытия с аналогичными оболочками соседних атомов.

Таким образом, металл представляет собой кристаллическую решетку из положительных ионов, в поле которых движутся коллективизированные электроны валентных оболочек. Хотя эти электроны и принято называть свободными, они сильно взаимодействуют как между собой, так и с ионами решетки, причем потенциальная энергия этих взаимодействий порядка кинетической энергии.

Построение теории такой системы все же оказывается возможным, главным образом, по следующим двум обстоятельствам. Во первых, поведение системы сильно взаимодействующих электронов (как говорят, электронной жидкости) во многом аналогично поведению невзаимодействующих между собой частиц в некотором внешнем поле, представляющем собой усредненное поле ионов решетки и остальных электронов. Во вторых, это усредненное поле обладает симметрией кристаллической решетки, в частности, периодичностью.

Поэтому начнем с изучения поведения электрона в периодическом потенциале

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = U(\mathbf{r}), \quad (123)$$

где \mathbf{a}_n — произвольный период решетки, который в общем виде может быть представлен в виде линейной комбинации базисных векторов \mathbf{a}_i :

$$\mathbf{a}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (124)$$

причем n_i — произвольные целые числа.

Уравнение Шредингера для движения электрона в таком поле имеет вид

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}) \quad (125)$$

Вследствие периодичности потенциала, $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n)$ тоже является решением этого уравнения с тем же собственным значением ε . Если этот уровень не вырожден, то должно быть

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = C\psi(\mathbf{r}) \quad (126)$$

Вследствие условия нормировки волновой функции, имеем

$$C^2 = 1 \quad (127)$$

Таким образом, можно написать

$$C = e^{i\varphi(\mathbf{a}_n)} \quad (128)$$

$\varphi(\mathbf{a}_n)$ — вещественная функция смещения. Рассмотрим два последовательных смещения: \mathbf{a} и \mathbf{a}' , которым отвечают, соответственно функции $C(\mathbf{a})$ и $C(\mathbf{a}')$. Два последовательных смещения \mathbf{a} и \mathbf{a}' эквивалентны одному $\mathbf{a} + \mathbf{a}'$. Следовательно

$$C(\mathbf{a}) + C(\mathbf{a}') = C(\mathbf{a} + \mathbf{a}') \quad (129)$$

Удовлетворить одновременно свойствам (128), (129) можно только если потребовать, чтобы φ представлялось в следующем виде

$$\varphi(\mathbf{a}_n) = \mathbf{p}\mathbf{a}_n/\hbar, \quad (130)$$

где \mathbf{p} — некоторый векторный коэффициент. Легко убедиться, что вектор \mathbf{p} определен неоднозначно, точнее с точностью до вектора \mathbf{K} , такого, что $\mathbf{K}\mathbf{a}_n = 2\pi m$, где m — целое число, а \mathbf{a}_n — произвольный период решетки. Уравнению $\mathbf{K}\mathbf{a}_n = 2\pi m$ удовлетворяет бесконечное множество векторов, которые могут быть записаны в следующем виде

$$\mathbf{K}_n = q_1\mathbf{K}_1 + q_2\mathbf{K}_2 + q_3\mathbf{K}_3, \quad (131)$$

где

$$\mathbf{K}_1 = \frac{2\pi[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]}{(\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3])}, \mathbf{K}_2 = \frac{2\pi[\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1]}{(\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3])}, \mathbf{K}_3 = \frac{2\pi[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]}{(\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3])} \quad (132)$$

— векторы, называемые векторами обратной решетки. Векторы обратной решетки \mathbf{K}_i образуют ортонормированный базис, при этом

$$\mathbf{K}_i\mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (133)$$

Поскольку решение уравнения Шредингера определяется вектором \mathbf{p} , то, в частности, энергия электрона является функцией вектора \mathbf{p} . Поскольку \mathbf{p} и $\mathbf{p} + \hbar\mathbf{K}$ физически эквивалентны, то энергия ε есть периодическая функция с периодами $\hbar\mathbf{K}_i$.

Волновая функция, описывающая движение электрона в периодическом поле и обладающая свойством

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{a}_n/\hbar}\psi(\mathbf{r}), \quad (134)$$

может быть представлена в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}u(\mathbf{r}), \quad (135)$$

где $u(\mathbf{r})$ — периодическая функция:

$$u(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) \quad (136)$$

Формулы (135) и (136) есть теорема Блоха.

Введенный выше вектор \mathbf{p} называют квазиимпульсом. Вследствие физической эквивалентности векторов \mathbf{p} и $\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}$ можно считать, что вектор \mathbf{p} лежит внутри элементарной ячейки, построенной на векторах (132). Для определенности будем считать, что вектор \mathbf{p} принадлежит первой зоне Бриллюэна, то есть

$$-K_i/2 < p_i \leq K_i/2 \quad (137)$$

Объем области однозначного определения \mathbf{p} равен

$$(\mathbf{K}_1 [\mathbf{K}_2 \mathbf{K}_3]) = (2\pi\hbar)^3 / V, \quad (138)$$

где $V = (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])$ — объем элементарной ячейки исходной кристаллической решетки.

Для решения уравнения Шредингера надо задать граничные условия. В бесконечно большом объеме последовательные состояния бесконечно близки друг к другу. Фактически нас будет интересовать вопрос о плотности состояний, т.е. какое число состояний приходится на интервал энергий или заданный элемент объема в пространстве квазиимпульса.

Плотность состояний не зависит от конкретного вида граничных условий. Поэтому, для простоты выберем периодические граничные условия

$$\psi(x + L_x, y, z) = \psi(x, y + L_y, z) = \psi(x, y, z + L_z) = \psi(x, y, z). \quad (139)$$

Считая, что каждый из размеров L_i содержит целое число периодов, используя (135) и (136), получим

$$e^{ip_x L_x/\hbar} = e^{ip_y L_y/\hbar} = e^{ip_z L_z/\hbar} = 1. \quad (140)$$

Откуда следует

$$p_x = \frac{2\pi\hbar n_x}{L_x}, p_y = \frac{2\pi\hbar n_y}{L_y}, p_z = \frac{2\pi\hbar n_z}{L_z}, \quad (141)$$

где n_i — целые числа. Чтобы векторы p_i были определены однозначно, будем считать, что

$$-L_i/2a_i < n_i \leq L_i/2a_i. \quad (142)$$

Говорят, что определенные таким образом векторы \mathbf{p} принадлежат первой зоне Бриллюэна. При достаточно больших L_i вектор \mathbf{p} является квазинепрерывной переменной, что позволяет суммирование по состояниям заменить интегрированием. Число состояний в некотором объеме \mathbf{p} -пространства определяется как

$$\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = \frac{L_x L_y L_z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (143)$$

Поэтому плотность состояний в элементе фазового объема d^3p равна (с учетом наличия у электрона двух проекций спина)

$$\frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \quad (144)$$

Приближение сильной связи

Рассмотрим вначале движение электрона в одномерной периодической цепочке из одинаковых N ионов. Если считать, что ионы расположены на очень большом расстоянии так что они не чувствуют потенциал друг друга, то вблизи каждого иона j уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_j}{dx^2} + U_j(x) \varphi_j = E_0 \varphi_j, \quad (145)$$

где U_j — потенциал j -го иона. Для определенности будем считать, что E_0 — энергия основного состояния атома. В приближении изолированных ионов в рассматриваемой цепочке этот уровень N -кратно вырожден. Фактически электрон движется в потенциале

$$V(x) = \sum_{j=1}^N U_j = \sum_{j=1}^N U(x - jd), \quad (146)$$

d — расстояние между ионами. Поэтому поведение электрона определяется уравнением Шредингера для электрона в потенциале (146)

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \sum_{j=1}^N U(x - jd) \psi = E\psi \quad (147)$$

Решение этого уравнения Шредингера будем искать в виде

$$\psi(x) = \sum_{j=1}^N a_j \varphi_j(x) = \sum_{j=1}^N a_j \varphi(x - jd) \quad (148)$$

Если бы система функций $\varphi_j(x)$ была полна, то разложение (148) было бы точным. Вблизи каждого иона j потенциал V практически совпадает с потенциалом U_j . В этой же области пространства только часть волновой функции $\varphi_j(x)$ заметно отлична от нуля. Поэтому, вследствие (145), можно ожидать, что разумно искать решение уравнения Шредингера (147) в виде (148).

Учет слабого взаимодействия между атомами приводит к снятию упомянутого выше N -кратного вырождения. При этом электрон с конечной вероятностью может находиться вблизи любого узла цепочки. Как мы увидим ниже, снятие вырождения приводит к тому, что энергия электрона может находиться в некотором интервале вблизи E_0 . Если ширина этого интервала меньше расстояния между E_0 и ближайшим атомным уровнем, то разложение (148) является хорошим приближением. Волновые функции являются нормированными

$$\int_0^{Nd} dx |\psi(x)|^2 = 1 \quad (149)$$

Подставим (148) в (147)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \sum_{j=1}^N U(x - jd) \right) \left(\sum_{j=1}^N a_j \varphi_j(x) \right) = E \left(\sum_{j=1}^N a_j \varphi_j(x) \right). \quad (150)$$

Используя (145), получим

$$\sum_{i=1}^N a_i \{E - E_0 - [V(x) - U_i(x)]\} \varphi_i(x) = 0 \quad (151)$$

Домножим последнее уравнение на $\varphi_j^*(x)$ и проинтегрировав результат по x . В результате получим

$$\sum_{i=1}^N ((E - E_0) J_{ij} - h_{ij}) a_i = 0 \quad (152)$$

где

$$J_{i-j} = \int dx \varphi_j^*(x) \varphi_i(x), \quad h_{i-j} = \int dx \varphi_j^*(x) [V(x) - U_i(x)] \varphi_i(x) \quad (153)$$

Используя теорему Блоха, будем искать решение уравнения (152) виде

$$a_n = a e^{iqn}, \quad (154)$$

причем

$$q = \frac{2\pi}{N} m, \quad (155)$$

где целое значение m принадлежит интервалу

$$-N/2 < m \leq N/2. \quad (156)$$

Определенный таким образом набор волновых векторов q принадлежит 1-й зоне Бриллюэна. Тогда получим

$$E - E_0 = \frac{\sum_{-N/2-1}^{N/2} h_n e^{iqn}}{\sum_{-N/2-1}^{N/2} J_n e^{iqn}} \quad (157)$$

Параметры h_n и J_n вследствие экспоненциально малого перекрытия функций $\varphi_j(x)$ очень быстро убывают с ростом n . Поэтому в дальнейшем мы ограничимся *приближением ближайших соседей*, полагая отличными от нуля только h_0 , и h_1 и $J_0 = 1$, если φ нормировано. Откуда

$$E_k = E_0 + h_0 + 2h_1 \cos(q). \quad (158)$$

В соответствии с общим правилом квантовой механики вероятность обнаружить электрон вблизи j -го атома цепочки, или в состоянии $\varphi_i(x)$, равна $|a_j|^2 = |a|^2$. Откуда, в силу условия нормировки $\sum_{j=1}^N |a_j|^2 = 1$, получим

$$a_j^2 = N^{-1}. \quad (159)$$

Таким образом, электрон с равной вероятностью находится вблизи любого узла решетки. При этом разрешенные значения энергии определяются выражением (158) и лежат в энергетическом интервале шириной 4β , где введено обозначение $\beta = h_1$

Значение β зависит от того, какие оболочки перекрываются. Так например, в случае натрия для внешних $3s$ электронов имеем

$$\beta^{3s} \sim 10^{-12} \text{erg}, \quad (160)$$

а для внутренних $1s$ электронов

$$\beta^{1s} \sim 10^{-20} \text{erg}, \quad (161)$$

Параметр h_0 характеризует изменение энергии атомного электрона за счет взаимодействия с соседними атомами. Коэффициент β ответственен за перескок электрона между узлами. Это время можно оценить как $\tau \sim \hbar/\beta \approx 10^{-15} \div 10^{-7} \text{s}$. Таким образом для внешних электронов время перескока сравнимо с временем обращения электрона внутри ядра $\sim 10^{-15} \text{s}$. Что же касается внутренних электронов, то они успевают много раз обернуться вокруг ядра прежде, чем прыгнут на соседний узел.

В центре зоны Бриллюэна, $k = 0$, производная $\partial E_k / \partial k = 0$ и $E_k = E_0 + h_0 + 2\beta - (\beta d) k^2$ - закон дисперсии квадратичен. Независящую от квазиволнового вектора часть E_k можно назвать потенциальной энергией, а оставшуюся часть кинетической энергией элементарного возбуждения. Если ввести обозначение $(\beta d) = \frac{\hbar^2}{2m_*}$, то кинетическую энергию можно записать в виде $\frac{\hbar^2 k^2}{2m_*}$. В зависимости от знака параметра β масса квазичастицы может быть как отрицательной так и положительной. Это обстоятельство выявляет необычную связь энергии и скорости электрона в решетке. Оказывается, что во внешнем поле электрон в решетке может не ускоряться, а замедляться, что в известных условиях приводит к кажущемуся появлению положительных зарядов, участвующих в электрическом токе кристалла.

Приближение почти свободных электронов

Задачу об энергетическом спектре электронов в периодическом потенциале можно решить в другом предельном случае, т.е. в случае почти свободных электронов. Примем, что потенциал $V(R)$ является слабым, так что следует начать рассмотрение со свободных электронов, а потенциал $V(R)$ рассматривать как возмущение. Для простоты опять же рассмотрим одномерный случай.

Итак, невозмущенные волновые функции имеют вид

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ipx/\hbar}, \quad (162)$$

здесь p — импульс электрона, L — длина цепочки. Напомним, что разрешенные значения импульса пробегают ряд квазинепрерывных значений

$$p = \frac{2\pi\hbar}{L} n \quad (163)$$

$p = \frac{2\pi\hbar}{L} n$, где n — целое значение. В этом состоянии энергия равна

$$E_p = \frac{p^2}{2m}. \quad (164)$$

Матричные элементы потенциала для состояний p и p' имеют вид

$$V_{pp'} = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-i(p-p')x/\hbar} V(x) \quad (165)$$

Периодический потенциал $V(x)$ разлагается в ряд в ряд Фурье следующим образом

$$V(x) = \sum_n e^{2\pi i n x/d} V_n, \quad (166)$$

причем d — минимальный период обратной решетки.

Интеграл

$$\frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{ipx/\hbar} = \delta_{0p} \quad (167)$$

для всех p из множества (163). Вектор обратной решетки $2\pi n/d$, очевидно, принадлежит этому множеству, так как L содержит целое число периодов. Поэтому матричный элемент $V_{pp'}$ отличен от нуля, если

$$p - p' = 2\pi\hbar n/d \quad (168)$$

В первом порядке теории возмущений поправка к энергии $V_{pp} = V_0$ не зависит от импульса и определяет лишь начало отсчета энергии. Во втором порядке теории возмущений

$$\varepsilon^{(2)}(p) = \sum_n \frac{|V_{pp'}|^2}{\varepsilon^{(0)}(p) - \varepsilon^{(0)}(p - 2\pi\hbar n/d)}. \quad (169)$$

Условие применимости теории возмущений является малость этой поправки по сравнению с V_0 . Это условие очевидно нарушается, когда p приближается к значению $\pi\hbar n/d$. Для таких значений p необходимо использовать теорию возмущений для вырожденного спектра.

Пусть $p = \pi\hbar n/d - \Delta p$, тогда $p' = \Delta p - \pi\hbar n/d$. Тогда им соответствуют волновые функции ψ_1 и ψ_2 и соответственно энергии ε_1 и ε_2 . Ищем решение уравнения Шредингера в виде

$$\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 \quad (170)$$

Подставим это выражение в уравнение Шредингера $H\psi = \varepsilon\psi$. В результате имеем

$$a_1(\varepsilon_1 - \varepsilon)\psi_1 + a_2(\varepsilon_2 - \varepsilon)\psi_2 + V(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = 0 \quad (171)$$

Умножая это уравнение на ψ_1^* и ψ_2^* , и используя ортогональность этих функций получим систему уравнений

$$\begin{aligned} (\varepsilon_1 - \varepsilon + V_0)a_1 + V_n a_2 &= 0 \\ V_n^* a_1 + a_2(\varepsilon_2 - \varepsilon + V_0) &= 0 \end{aligned} \quad (172)$$

Равенство нулю детерминанта этой системы есть условие ее разрешимости

$$(\varepsilon_1 - \varepsilon + V_0)(\varepsilon_2 - \varepsilon + V_0) = |V_n|^2 \quad (173)$$

Если включить V_0 в ε , то (173) можно переписать в виде

$$\varepsilon^2 - \varepsilon(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + \varepsilon_1\varepsilon_2 - |V_n|^2 = 0 \quad (174)$$

Отсюда

$$\varepsilon = \frac{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2}{4} + |V_n|^2} \quad (175)$$

9 Лекция 9. Неидеальный бозе-газ при нулевой температуре

9.1 Неидеальный бозе-газ при нулевой температуре

0. В идеальном бозе-газе при низкой температуре имеет место замечательное явление накопления макроскопического числа частиц на нижнем уровне - конденсация Бозе-Эйнштейна. Это свойство существует и в неидеальном бозе-газе с парным взаимодействием частиц. Более того, оно сохраняется в конденсированной среде из бозе-частиц, т.е. в бозе-жидкости. Такой жидкостью является низкотемпературный гелий. (Все другие плотные вещества при температуре, близкой к нулю, находятся в твердом состоянии.) Но взаимодействие атомов в жидкости велико, и теория жидкости является чрезвычайно сложной. Поэтому мы ограничимся построением теории разреженного слабо неидеального бозе-газа. До последнего времени такая теория имела чисто модельный смысл как простая демонстрация происхождения основных свойств жидкого гелия. Но в 1995 г. сумели получить методом лазерного охлаждения небольшие порции ($\sim 10^6$ атомов) газообразного рубидия в магнитных ловушках с рекордно низкой температурой порядка $10^{-9} K$. Атом щелочного металла ^{85}Rb имеет нечетное число электронов (37) и нечетное число нуклонов (85) и является бозе-частицей. Было экспериментально показано, что в газе рубидия действительно имеется бозе-конденсация.

А наличие в нем незатухающих колебаний указывает на наличие второго удивительного свойства бозе-систем - на сверхтекучесть. Вначале изложим теорию Боголюбова, а затем теорию сверхтекучести изложим на современном языке.

1. Рассмотрим неидеальный бозе-газ. В основном состоянии неидеального бозе-газа и при температуре, малой по сравнению с температурой бозе-конденсации идеального газа ($T_c = 3.31n^{2/3}/m$), большинство атомов находится на уровне с нулевым импульсом ($N_0 \simeq N_{tot}$), т.е. образуют бозе-конденсат. Термодинамические свойства этого газа будем описывать в простейшей модели с локальным парным взаимодействием (отталкиванием, $U > 0$) Эффективный гамильтониан модели в импульсном представлении имеет вид

$$\hat{\Omega} = \hat{H} - \mu\hat{N} = \sum_{k \neq 0} \left(\frac{k^2}{2m} - \mu \right) \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} U \sum_{k_1+k_2=k_3+k_4} \hat{a}_{k_1}^+ \hat{a}_{k_2}^+ \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} \quad (1)$$

Чтобы не следить за размерностью, принято $V = 1$ и $\hbar = 1$. В первой сумме кинетическая энергия частицы отсчитывается от химического потенциала. Каждый член второй суммы описывает s -рассеяние двух частиц с сохранением суммарного импульса.

Здесь и в дальнейшем для краткости опускаем стрелки над векторами. Как и в случае газа фононов, операторы поглощения и рождения бозе-частиц с волновым вектором (импульсом) k удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^+] = \delta_{k,k'}, \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = [\hat{a}_k^+, \hat{a}_{k'}^+] = 0, \quad (2)$$

и оператор $\hat{N}_k = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k$ имеет смысл оператора числа частиц в этом состоянии. Квантовомеханическое среднее от (1) есть термодинамический потенциал Ω , в котором задан химический потенциал μ , а не полное число частиц

. Из теории одномерного осциллятора и квантовой электродинамики известно, что большое число частиц в одном квантовом состоянии можно рассматривать как классическое поле и заменять оператор поля на классическую амплитуду поля: $\hat{a}_0 \rightarrow a_0 = \sqrt{N_0}$. Все операторы поглощения и рождения с не равным нулю импульсом будем учитывать точно.

Пренебрегая (1) надконденсатными частицами ($N_0 \simeq N$), будем иметь

$$\Omega_0 = -\mu N + \frac{1}{2} U N^2 \quad (3)$$

Минимизируя это выражение по N_0 при фиксированном μ , получаем

$$\mu = U N \quad (4)$$

Отсюда сразу находим давление неидеального газа при нулевой температуре

$$P = -\Omega_0 = \frac{1}{2} U N^2 \quad (5)$$

и скорость звука

$$c^2 = \frac{\partial P}{\partial \rho} = \frac{\partial P}{\partial m N} = \frac{1}{m} U N = \frac{\mu}{m} \quad (6)$$

Учитывая в (1) члены, содержащие a_0^4 и a_0^2 , и пренебрегая взаимодействием надконденсатных частиц, будем иметь

$$\begin{aligned}\hat{H} - \mu\hat{N} &= \Omega_0 + \sum_{k \neq 0} \left(\frac{k^2}{2m} - \mu \right) \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} U N_0 \sum_{k \neq 0} [4\hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \hat{a}_{-k} \hat{a}_k + \hat{a}_k^+ \hat{a}_{-k}^+] \\ &= \Omega_0 + \sum_{k \neq 0} [\xi_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \mu (\hat{a}_{-k} \hat{a}_k + \hat{a}_k^+ \hat{a}_{-k}^+)], \quad \xi_k = \left(\frac{k^2}{2m} + \mu \right)\end{aligned}$$

В этом выражении перепутываются бозе-операторы с противоположными импульсами

$$\Omega_{k>0} = \xi_k (\hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^+ \hat{a}_{-k}) + \mu (\hat{a}_{-k} \hat{a}_k + \hat{a}_k^+ \hat{a}_{-k}^+)$$

Эта квадратичная форма диагонализуется каноническим преобразованием Боголюбова-Тябликова

$$\hat{a}_k = u_k \hat{b}_k - v_{-k} \hat{b}_{-k}^+ \quad (7)$$

и его эрмитово сопряженного выражения (с заменой знака импульса)

$$\hat{a}_{-k}^+ = u_{-k}^* \hat{b}_{-k}^+ - v_k^* \hat{b}_k. \quad (8)$$

Здесь введены операторы поглощения \hat{b}_k и рождения \hat{b}_k^+ квазичастиц, которые должны удовлетворять таким же правилам коммутации, что и исходные операторы голых частиц (2)

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^+] = \delta_{k,k'}, \quad [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] = [\hat{b}_k^+, \hat{b}_{k'}^+] = 0. \quad (9)$$

$$u_k^2 - v_k^2 = 1$$

$$\begin{aligned}\Omega_k &= \xi_k (u_k^* \hat{b}_k^+ - v_{-k}^* \hat{b}_{-k}) (u_k \hat{b}_k - v_{-k} \hat{b}_{-k}^+) + \xi_k (u_{-k}^* \hat{b}_{-k}^+ - v_k^* \hat{b}_k) \hat{a}_{-k}^+ (u_{-k} \hat{b}_{-k} - v_k \hat{b}_k^+) \\ &+ \mu (u_{-k} \hat{b}_{-k} - v_k \hat{b}_k^+) (u_k \hat{b}_k - v_{-k} \hat{b}_{-k}^+) + \mu (u_k^* \hat{b}_k^+ - v_{-k}^* \hat{b}_{-k}) (u_{-k}^* \hat{b}_{-k}^+ - v_k^* \hat{b}_k)\end{aligned}$$

Приравнивая нулю множитель перед $\hat{b}_{-k} \hat{b}_k$ и $\hat{b}_k^+ \hat{b}_{-k}^+$, находим

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

$$\Omega_k = (\varepsilon_k - \xi_k) + \varepsilon_k (\hat{b}_k^+ \hat{b}_k + \hat{b}_{-k}^+ \hat{b}_{-k})$$

$$\hat{H} - \mu\hat{N} = \sum \Omega_k = \sum (\varepsilon_k - \xi_k) + \sum \varepsilon_k \hat{b}_k^+ \hat{b}_k$$

Таким образом, с помощью преобразования Боголюбова гамильтониан неидеального газа представлен как сумма независимых возбуждений, энергия которых есть ε_k .

2. Нелинейное уравнение Шредингера. Итак, рассмотрим неидеальный бозе-газ. Для простоты ограничимся температурой, близкой к нулю, когда тепловых возбуждений очень мало. В классической механике гамильтониан взаимодействия частиц имеет вид

$$H_{int} = \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 \rho(\vec{r}_1) U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho(\vec{r}_2), \quad (10)$$

где $\rho(\vec{r}_1)$ - плотность числа частиц. Следует считать, что потенциал взаимодействия двух частиц V имеет характер отталкивания

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \geq 0. \quad (11)$$

В случае притяжения частиц газ неустойчив относительно перехода в жидкую фазу.

В квантовой механике в представлении чисел заполнения плотность числа частиц следует заменить на оператор $\rho(\vec{r}_1) = \hat{\psi}^+(\vec{r}_1)\hat{\psi}(\vec{r}_1)$ и расположить операторные волновые функции в "нормальном порядке" - справа две частицы исчезают и слева - возникают:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &= \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 \hat{\psi}^+(\vec{r}_1)\hat{\psi}(\vec{r}_1) U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \hat{\psi}^+(\vec{r}_2)\hat{\psi}(\vec{r}_2) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 \hat{\psi}^+(\vec{r}_1)\hat{\psi}^+(\vec{r}_2) U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \hat{\psi}(\vec{r}_2)\hat{\psi}(\vec{r}_1). \end{aligned} \quad (12)$$

Волновые функции в разных точках коммутируют друг с другом:

$$[\hat{\psi}(\vec{r}_1), \hat{\psi}^+(\vec{r}_2)] = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (13)$$

и полный гамильтониан системы можно получить, добавив к (12) гамильтониан кинетической энергии

$$\hat{H} = \int d^3r \hat{\psi}^+(\vec{r}) \frac{\hat{p}^2}{2m} \hat{\psi}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 \hat{\psi}^+(\vec{r}_1)\hat{\psi}^+(\vec{r}_2) U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \hat{\psi}(\vec{r}_2)\hat{\psi}(\vec{r}_1). \quad (14)$$

Выпишем также оператор полного числа частиц

$$\hat{N} = \int d^3r \hat{\psi}^+(\vec{r})\hat{\psi}(\vec{r}). \quad (15)$$

Согласно общим законам квантовой механики операторы бозе-поля в представлении Гейзенберга имеют вид

$$\hat{\Psi}(t, \vec{r}) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\psi}(\vec{r}) e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad (16)$$

$$\hat{\Psi}^+(t, \vec{r}) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\psi}^+(\vec{r}) e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \quad (17)$$

Гамильтониан системы в представлении Гейзенберга имеет вид (14), но с заменой $\hat{\psi}$ на $\hat{\Psi}$.

Дифференцируя выражение (16), получаем стандартное выражение для производной любого оператора по времени

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(t, \vec{r}) = [\hat{\Psi}(t, \vec{r}), \hat{H}]. \quad (18)$$

Производим коммутацию оператора поля с гамильтонианом, с учетом того, что

$$[\hat{\Psi}(t, \vec{r}_1), \hat{\Psi}^+(t, \vec{r}_2) \hat{\Psi}(t, \vec{r}_2)] = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \hat{\Psi}(t, \vec{r}_2) \quad (19)$$

и приходим к нелинейному интегро-дифференциальному "уравнению Шредингера"

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(t, \vec{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \hat{\Psi}(t, \vec{r}) + \int d^3r_1 \hat{\Psi}^+(t, \vec{r}_1) U(\vec{r} - \vec{r}_1) \hat{\Psi}(t, \vec{r}_1) \hat{\Psi}(t, \vec{r}). \quad (20)$$

При низких температурах существуют только низкоэнергетические длинноволновые возбуждения. Поэтому короткодействующий парный потенциал можно заменить на локальный

$$U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = U_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \quad (21)$$

Параметр U_0 имеет размерность энергия*объем и может быть записан в виде

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (22)$$

Величина a называется длиной рассеяния. В результате "уравнение Шредингера" принимает локальную форму

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(t, \vec{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \hat{\Psi}(t, \vec{r}) + U_0 \hat{\Psi}^+(t, \vec{r}) \hat{\Psi}(t, \vec{r}) \hat{\Psi}(t, \vec{r}). \quad (23)$$

Разложим функцию бозе-поля $\hat{\Psi}$ по плоским волнам $V^{-1/2} e^{ikr}$ (V - объем системы):

$$\hat{\Psi} = \sum_k \hat{a}_k(t) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr}. \quad (24)$$

Здесь и в дальнейшем для краткости опускаем стрелки над векторами. Как и в случае газа фононов, операторы поглощения и рождения бозе-частиц с волновым вектором (импульсом) удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^+] = \delta_{k,k'}, \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = [\hat{a}_k^+, \hat{a}_{k'}^+] = 0. \quad (25)$$

и оператор $\hat{N}_k = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k$ имеет смысл оператора числа частиц в этом состоянии.

В идеальном бозе-газе при нулевой температуре все частицы находятся в конденсате, т.е. имеют нулевой импульс. В неидеальном газе большинство частиц N_0 остаются в конденсате, но из-за отталкивания небольшая доля частиц имеют ненулевые импульсы даже при нулевой температуре. Ниже соответствующее число надконденсатных частиц N_k будет вычислено.

2. Частицы, принадлежащие конденсату, находятся в так называемом когерентном состоянии. Когерентным состоянием называется собственное состояние оператора поглощения

$$\hat{a}_0 |A\rangle = A |A\rangle. \quad (26)$$

Это состояние есть суперпозиция состояний с разным числом n частиц с нулевым импульсом вида

$$|A\rangle = e^{-\frac{1}{2}|A|^2} \sum_n \frac{A^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad \langle A | A \rangle = 1. \quad (27)$$

Среднее число частиц в этом состоянии и соответствующая дисперсия равны

$$N_0 = \langle A | \hat{a}_0^+ \hat{a}_0 |A\rangle = e^{-|A|^2} \sum_n \frac{|A|^{2n}}{n!} n = |A|^2, \quad (28)$$

$$(\delta n_0)^2 = \langle A | (\hat{a}_0^+ \hat{a}_0 - N_0)^2 |A\rangle = \langle A | (\hat{a}_0^+ \hat{a}_0)^2 |A\rangle - N_0^2 = \quad (29)$$

$$e^{-|A|^2} \sum_n \frac{|A|^{2n}}{n!} n^2 - |A|^4 = |A|^2, \quad (30)$$

$$\frac{\langle (\delta n_0)^2 \rangle}{\langle n_0 \rangle^2} = \frac{1}{N_0}. \quad (31)$$

Обратим внимание на качественное отличие когерентного состояния от состояния частиц с нулевым импульсом в идеальном газе с фиксированным химическим потенциалом, которое описывается не волновой функцией, а диагональной матрицей плотности (см. конец предыдущей лекции (47))

$$\hat{\rho}_0 = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} e^{\beta n \mu} |n\rangle \langle n|. \quad (32)$$

В этом состоянии, как было вычислено в задаче 2 предыдущей лекции, имеем

$$\langle n_0 \rangle = N_0 = \frac{1}{e^{\beta|\mu|} - 1}, \quad \langle (\delta n_0)^2 \rangle = N_0 (1 + N_0), \quad \frac{\langle (\delta n_0)^2 \rangle}{\langle n_0 \rangle^2} = \frac{1 + N_0}{N_0} = e^{\beta|\mu|}.$$

Различие обусловлено тем, что в состоянии идеального газа с исчезающе малым химическим потенциалом вероятность обнаружить заданное число частиц в конденсате очень слабо зависит от числа частиц. Наоборот в макроскопическом ($N_0 \rightarrow \infty$) когерентном состоянии относительная флуктуация числа частиц в конденсате, так же как и относительная флуктуация полного числа частиц, стремятся к нулю.

Таким образом, число частиц (и корень из него) в когерентном состоянии конденсата неидеального бозе-газа практически не флуктуируют. Поэтому из операторной функции (24) целесообразно выделить волновую функцию конденсата

$$\hat{\Psi} = \Psi_0 + \hat{\Psi}_1, \quad \hat{\Psi}_1 = \sum_{k \neq 0} \hat{a}_k(t) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} \quad (33)$$

и рассматривать Ψ_0 как классическое поле, аналогичное потенциалу классического электрического поля. Подставим эту формулу в (23) и пренебрежем операторной частью поля, описывающей надконденсатные частицы

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0(t, \vec{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi_0(t, \vec{r}) + U_0 \Psi_0^+(t, \vec{r}) \Psi_0(t, \vec{r}) \Psi_0(t, \vec{r}). \quad (34)$$

Хотя это уравнение нелинейно, но его коэффициенты постоянны, и оно имеет простое однородное решение

$$\begin{aligned} \Psi_0(t, \vec{r}) &= \Psi_c \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_0 t\right], \\ \varepsilon_0 &= U_0 \Psi_c^2, \quad \Psi_c^* = \Psi_c. \end{aligned} \quad (35)$$

Волновая функция Ψ_c имеет постоянную фазу (равную нулю) и, следовательно, описывает неподвижный конденсат. Переходя в движущуюся систему координат, можно получить состояние неидеального бозе-газа с отличным от нуля потоком конденсатных частиц. Как мы увидим ниже, при определенных условиях такое состояние устойчиво. Это будет означать, что неидеальный бозе-газ является сверхтекучим.

Число конденсатных частиц и энергия конденсата (см. (14)) связаны с амплитудой конденсата Ψ_c формулами

$$N_0 = \int d^3r \Psi_0^+(t, \vec{r}) \Psi_0(t, \vec{r}) = \Psi_c^2 V, \quad (36)$$

$$E_0 = \frac{1}{2} U_0 \int d^3r \Psi_0^+(t, \vec{r}) \Psi_0^+(t, \vec{r}) \Psi_0(t, \vec{r}) \Psi_0(t, \vec{r}) = \frac{1}{2} U_0 \Psi_c^4 V = \frac{U_0 N_0^2}{2V}. \quad (37)$$

Дифференцируя энергию по числу частиц, находим химический потенциал

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N_0} = \frac{U_0 N_0}{V} = U_0 \Psi_c^2. \quad (38)$$

Согласно (35) волновая функция конденсата $\Psi_0(t)$ имеет фазу, зависящую от времени ($\varphi = -\mu t/\hbar$). Это неудобно, т.к. множитель $e^{-i\mu t/\hbar}$ усложняет последующие формулы, но не дает вклада в физические величины. От этого множителя легко избавиться, перейдя с самого начала в (23) от оператора $\hat{\Psi}(t, \vec{r})$ к оператору $\tilde{\Psi}(t, \vec{r}) = e^{i\mu t/\hbar} \hat{\Psi}(t, \vec{r})$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}(t, \vec{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \tilde{\Psi}(t, \vec{r}) + U_0 \tilde{\Psi}^+(t, \vec{r}) \tilde{\Psi}(t, \vec{r}) \tilde{\Psi}(t, \vec{r}) - \mu \tilde{\Psi}(t, \vec{r}). \quad (39)$$

Стационарным решением этого уравнения является действительная амплитуда конденсата Ψ_c .

3. Теперь найдем элементарные возбуждения неидеального бозе-газа. Будем считать, что система находится в состоянии, близком к основному и $\tilde{\Psi}(t, \vec{r})$ слабо отличается от Ψ_c :

$$\tilde{\Psi}(t, \vec{r}) = \Psi_c + \hat{\Psi}_1(t, \vec{r}), \quad \left| \hat{\Psi}_1(t, \vec{r}) \right| \ll \Psi_c. \quad (40)$$

Подставим это выражение в (39), и удержим линейные по $\hat{\Psi}_1$ члены:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_1(t, \vec{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \hat{\Psi}_1(t, \vec{r}) + 2U_0 \Psi_c^2 \hat{\Psi}_1(t, \vec{r}) + U_0 \Psi_c^2 \hat{\Psi}_1^+(t, \vec{r}) - \mu \hat{\Psi}_1(t, \vec{r}). \quad (41)$$

с учетом (38) приводим это уравнение к компактному виду

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_1 = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \mu \right) \hat{\Psi}_1 + \mu \hat{\Psi}_1^+. \quad (42)$$

Для каждого члена разложения (33) имеем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}_k(t) = \left[\frac{(\hbar k)^2}{2m} + 2\mu \right] \hat{a}_k(t) + \mu \hat{a}_{-k}^+(t). \quad (43)$$

В этом уравнении перемешаны бозе-операторы $\hat{a}_k(t)$ и $\hat{a}_{-k}^+(t)$. Диагонализуем это уравнение с помощью преобразования Боголюбова

$$\hat{a}_k(t) = \left[u_k \hat{b}_k e^{-i\varepsilon_k t/\hbar} - v_k \hat{b}_{-k}^+ e^{i\varepsilon_k t/\hbar} \right] \quad (44)$$

и его эрмитово сопряженного выражения (с заменой знака импульса)

$$\hat{a}_{-k}^+(t) = \left[u_k \hat{b}_{-k}^+ e^{+i\varepsilon_k t/\hbar} - v_k \hat{b}_k e^{-i\varepsilon_k t/\hbar} \right]. \quad (45)$$

Здесь введены операторы поглощения \hat{b}_k и рождения \hat{b}_k^+ новых квазичастиц, которые удовлетворяют таким же правилам коммутации, что и исходные операторы "голых частиц" (25)

$$\left[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^+ \right] = \delta_{k,k'}, \quad \left[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'} \right] = \left[\hat{b}_k^+, \hat{b}_{k'}^+ \right] = 0. \quad (46)$$

Коэффициенты преобразования u_k, v_k предполагаются действительными, четными функциями вектора k . Нас не будет интересовать проблема однозначности. Требуется найти хотя бы одно преобразование, диагонализующее уравнение Шредингера и соответствующий гамильтониан. Такие преобразования называются каноническими, и их, как известно из квантовой механики, бесконечно много.

Смысл формулы (44) состоит в том, что скачок бозе-частицы, например благодаря поглощению фотона, из состояния с импульсом k в высоко возбужденное состояние ("на бесконечность") эквивалентен с вероятностью u_k^2 поглощению конденсатом одного кванта элементарного возбуждения и с вероятностью v_k^2 - рождению из конденсата кванта с противоположным импульсом.

Подставив (44),(45) в (43), получаем

$$\varepsilon_k \left[u_k \hat{b}_k e^{-i\varepsilon_k t/\hbar} + v_k \hat{b}_{-k}^+ e^{i\varepsilon_k t/\hbar} \right] = \left[\frac{(\hbar k)^2}{2m} + \mu \right] \left[u_k \hat{b}_k e^{-i\varepsilon_k t/\hbar} - v_k \hat{b}_{-k}^+ e^{i\varepsilon_k t/\hbar} \right] \quad (47)$$

$$+ \mu \left[u_k \hat{b}_{-k}^+ e^{+i\varepsilon_k t/\hbar} - v_k \hat{b}_k e^{-i\varepsilon_k t/\hbar} \right]. \quad (48)$$

Это уравнение выполняется тождественно, если приравнять по-отдельности коэффициенты при \hat{b}_k и \hat{b}_{-k}^+ :

$$(\varepsilon_k - \xi_k) u_k + \mu v_k = 0, \quad (49)$$

$$\mu u_k - (\varepsilon_k + \xi_k) v_k = 0, \quad (50)$$

где $\xi_k = \frac{(\hbar k)^2}{2m} + \mu$. Отсюда легко находим

$$\varepsilon_k = \sqrt{\xi_k^2 - \mu^2} = \sqrt{\frac{(\hbar k)^2}{m} \mu + \left(\frac{(\hbar k)^2}{2m}\right)^2}. \quad (51)$$

Подставив преобразования Боголюбова в первый коммутатор (25), устанавливаем нормировку

$$u_k^2 - v_k^2 = 1. \quad (52)$$

и находим коэффициенты преобразования

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\xi_k}{\varepsilon_k} + 1 \right)}, \quad v_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\xi_k}{\varepsilon_k} - 1 \right)}, \quad (53)$$

$$u_k^2 + v_k^2 = \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}, \quad 2u_k v_k = \frac{\mu}{\varepsilon_k}. \quad (54)$$

Фактически, это коэффициенты поворота в пространстве с гиперболической метрикой (52).

Чтобы наглядно выявить свойства возбужденных состояний бозе-газа, выразим гамильтониан системы (04) в квадратичном приближении по операторам \hat{a}_k .

$$\hat{H} = E_0 + \sum_k \left[\frac{(\hbar k)^2}{2m} \hat{a}_k^+(t) \hat{a}_k(t) + \mu \hat{a}_k^+(t) \hat{a}_k(t) + \frac{1}{2} \mu \hat{a}_k(t) \hat{a}_{-k}(t) + \frac{1}{2} \mu \hat{a}_{-k}^+(t) \hat{a}_k^+(t) \right]. \quad (55)$$

Это выражение после подстановки (44),(45) принимает диагональную форму

$$\hat{H} = E_0 + \frac{1}{2} \sum_k (\varepsilon_k - \xi_k) + \sum_k \varepsilon_k \hat{b}_k^+ \hat{b}_k. \quad (56)$$

Наиболее важным для нас является последний член, описывающий суммарную энергию возбуждений. Поскольку оператор $\hat{b}_k^+ \hat{b}_k$ есть оператор числа квазичастиц, то величина ε_k (51) имеет смысл энергии элементарного возбуждения с импульсом $\hbar k$. При больших импульсах ε_k совпадает с энергией свободной частицы

$$\varepsilon_k \simeq \frac{(\hbar k)^2}{2m}, \quad \varepsilon_k \gg \mu, \quad (57)$$

а длинноволновая часть спектра имеет форму звукового спектра, т.е. линейно зависит от импульса.

$$\varepsilon_k = c\hbar k, \quad c = \sqrt{\frac{\mu}{m}} = \sqrt{\frac{U_0 N_0}{mV}}, \quad \varepsilon_k \ll \mu. \quad (58)$$

Энергия конденсата E_0 была вычислена выше (37). Второй член в (56) определяет вклад надконденсатных частиц в величину энергии основного состояния. По порядку величины $E_2 \simeq \mu\Gamma$, где Γ - число состояний свободных частиц с импульсами меньше $\sqrt{2m\mu}$ (при бóльших импульсах разность $(\varepsilon_k - \xi_k)$ быстро стремится к нулю). Поскольку это число равно $\Gamma \simeq V(2m\mu)^{3/2}/\hbar^3$, то $E_2 \simeq \mu V(2m\mu)^{3/2}/\hbar^3$. Газ можно считать слабо неидеальным, пока эта часть энергии мала по сравнению с E_0 .

$$\frac{E_2}{E_0} \simeq \frac{\mu V^2 (2m\mu)^{3/2}}{\hbar^3 U_0 N_0^2} \simeq \frac{N^{1/2}}{V^{1/2}} a^{3/2} \ll 1. \quad (59)$$

Отсюда находим оценку максимальной плотности

$$\max \frac{N}{V} \simeq \frac{1}{a^3}, \quad (60)$$

выше которой излагаемая теория неприменима. Получили естественный результат: газ можно считать разреженным, если среднее расстояние между частицами велико по сравнению с длиной рассеяния.

Найдем среднее число частиц с ненулевым импульсом при нулевой температуре, когда система находится в основном состоянии.

$$N_k = \langle \hat{a}_k^+(t) \hat{a}_k(t) \rangle \quad (61)$$

$$= \left\langle [u_k \hat{b}_k^+ e^{i\varepsilon_k t/\hbar} - v_k \hat{b}_{-k} e^{-i\varepsilon_k t/\hbar}] [u_k \hat{b}_k e^{-i\varepsilon_k t/\hbar} - v_k \hat{b}_{-k}^+ e^{i\varepsilon_k t/\hbar}] \right\rangle \quad (62)$$

$$= u_k^2 \langle \hat{b}_k^+ \hat{b}_k \rangle + v_k^2 \langle \hat{b}_{-k} \hat{b}_{-k}^+ \rangle - u_k v_k e^{2i\varepsilon_k t/\hbar} \langle \hat{b}_k^+ \hat{b}_{-k}^+ \rangle - v_k u_k e^{-2i\varepsilon_k t/\hbar} \langle \hat{b}_{-k} \hat{b}_k \rangle. \quad (63)$$

Под знаком последнего среднего стоит произведение двух операторов уничтожения квазичастиц, среднее от которого по любому состоянию равно нулю. По аналогичной причине равен нулю и предпоследний член. Оператор $\hat{b}_k^+ \hat{b}_k$ имеет смысл числа квазичастиц в состоянии с импульсом k . Но при нулевой температуре квазичастицы отсутствуют, и первый член в (63) тоже равен нулю. Наконец, второй член дает

$$N_k = v_k^2 \langle 1 + \hat{b}_{-k}^+ \hat{b}_{-k} \rangle = v_k^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\xi_k}{\varepsilon_k} - 1 \right). \quad (64)$$

При $\varepsilon_k \ll \mu$ это число весьма велико, но при $\varepsilon_k \gg \mu$ быстро падает. Полное число надконденсатных частиц по порядку величины равно, очевидно, Γ . Отношение этого числа к полному числу частиц равно (59)

$$\frac{\Gamma}{N} \simeq \left(\frac{Na^3}{V} \right)^{1/2}. \quad (65)$$

Скорость гидродинамического звука определяется формулой

$$c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho}, \quad (66)$$

где p - давление, а $\rho = mN/V$ - плотность газа. Давление при нулевой температуре определяется производной от энергии газа по объему и в первом приближении равно

$$p = -\frac{\partial E_0}{\partial V} = \frac{U_0 N_0^2}{2V^2} = \frac{U_0 \rho^2}{2m^2}. \quad (67)$$

Дифференцируя это выражение по плотности, получаем

$$c = \sqrt{\frac{U_0 \rho}{m^2}}. \quad (68)$$

Это выражение совпадает со скоростью распространения длинноволновых возбуждений газа (58). Следовательно, эти возбуждения играют роль звуковых квантов - фононов.

Тяжелая частица, движущаяся сквозь неподвижный бозе-газ, в принципе, может генерировать фононы и терять свою энергию. Процесс генерации фонона должен удовлетворять законам сохранения энергии и импульса

$$\frac{1}{2}MV^2 = \frac{1}{2}M\vec{V}_1^2 + \varepsilon_k, \quad (69)$$

$$M\vec{V} = M\vec{V}_1 + \hbar\vec{k}. \quad (70)$$

Подставим \vec{V}_1 из нижнего уравнения в верхнее и раскроем скобки

$$\frac{1}{2}MV^2 = \frac{1}{2}M \left(\vec{V} - \frac{\hbar\vec{k}}{M} \right)^2 + \varepsilon_k, \quad (71)$$

$$\varepsilon_k = \hbar\vec{k}\vec{V} - \frac{\hbar^2}{2M}k^2. \quad (72)$$

Излучение фонона возможно, только если

$$\varepsilon_k \leq \hbar\vec{k}\vec{V} = \hbar kV \cos \theta, \quad (73)$$

где θ - угол между направлением излучения фонона и скоростью. Отсюда получаем критерий Ландау возможности генерации

$$V > \frac{\varepsilon_k}{\hbar k}. \quad (74)$$

Если спектр квадратичный, как в идеальном газе, то при достаточно малом k это неравенство выполняется, и частица тормозится, испуская длинноволновые возбуждения. Если же длинноволновая часть спектра имеет форму звукового спектра, то

$$\min \frac{\varepsilon_k}{\hbar k} = c, \quad (75)$$

и частица, имеющая скорость меньше скорости звука, не может испустить фонон и, следовательно, движется без трения. Перейдем в систему координат, в которой частица покоится, а газ движется со скоростью $-\vec{V}$. В этом случае частица играет роль примеси, которую газ обтекает без трения, если скорость газового потока меньше скорости звука. Это означает, что медленный поток бозе-газа является сверхтекучим.

4. Нелинейное уравнение Шредингера (34) для волновой функции бозе-конденсата, кроме однородного стационарного решения (35), вообще говоря, имеет неоднородные нестационарные решения, отвечающие эволюции конденсата без потери когерентности. В частности, малые отклонения конденсата от основного состояния (35) описываются линеаризованным уравнением вида (41), но вместо операторной волновой функции следует писать классическую функцию $\Psi_1(t, \vec{r})$. При выводе спектра возбуждений (51) из (41) мы не использовали коммутационные свойства оператора $\hat{\Psi}_1(t, \vec{r})$. Поэтому решение линеаризованного уравнения Шредингера для $\Psi_1(t, \vec{r})$ снова приведет к спектру (51), но теперь он будет описывать не энергию квантовых квазичастиц, а спектр колебаний классического поля. Поэтому многие свойства возбуждений бозе-газа можно понять, не переходя к вторичному квантованию. В частности, интенсивность генерации возбуждений движущейся тяжелой частицей можно вычислить, исходя из квантомеханической вероятности излучения фононов, или, по аналогии с черенковским излучением, опираясь на описание излучения в рамках классического уравнения поля для волновой функции конденсата. Имея это в виду, выведем уравнения непрерывности плотности числа частиц и плотности энергии.

Будем исходить из нелинейного уравнения Шредингера (39), в котором поле будем считать классическим и опустим тильду над волновой функцией поля

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi + U_0 \Psi^* \Psi \Psi + (V(r) - \mu) \Psi. \quad (76)$$

Чтобы полученные ниже формулы можно было применять к газу в магнитных ловушках, здесь введен член с внешним потенциалом $V(r)$. Правая часть этого уравнения есть вариационная производная по комплексно сопряженному полю Ψ^* (при фиксированном виде Ψ) от гамильтониана

$$H = \int d^3r E, \quad E = \text{Re} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \Psi)^* (\nabla \Psi) + \frac{1}{2} U_0 |\Psi|^4 + (V(\vec{r}) - \mu) |\Psi|^2 \right\}. \quad (77)$$

Согласно "Теории поля" плотность энергии поля E определена с точностью до полной производной, и в этом смысле первый член в (77) эквивалентен плотности кинетической энергии $\Psi^* \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi$.

В определении плотности (77) явно подчеркнута действительность величины E , чтобы при дифференцировании по времени можно было функцию Ψ^* считать постоянной, но ответ умножить на 2:

$$\dot{E} = 2 \text{Re} \left\{ \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \Psi)^* \nabla + U_0 \Psi^* |\Psi|^2 + \Psi^* (V(r) - \mu) \right] \dot{\Psi} \right\}. \quad (78)$$

Из первого члена справа выделим дивергенцию

$$\dot{E} - 2Re\nabla \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\Psi)^* \dot{\Psi} \right] = 2Re \left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2\Psi)^* + U_0\Psi^* |\Psi|^2 + \Psi^* (V(r) - \mu) \right] \dot{\Psi} \right\}. \quad (79)$$

Сравним выражение в квадратных скобках справа с правой частью уравнения Шредингера для Ψ^* , которое получается комплексным сопряжением уравнения (76):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi^* + U_0 |\Psi|^2 \Psi^* + (V(r) - \mu) \Psi^*. \quad (80)$$

Выражения тождественно совпадают. Поэтому правая часть (79) равна

$$2Re \{ (-i\hbar \dot{\Psi}^*) \dot{\Psi} \}. \quad (81)$$

Под знаком Re стоит чисто мнимая величина, и правая часть (79) тождественно исчезает. В результате возникает уравнение непрерывности энергии

$$\dot{E} + \nabla Q = 0 \quad (82)$$

с плотностью потока энергии, равной

$$Q = -Re \left\{ \frac{\hbar^2}{m} (\nabla\Psi)^* \dot{\Psi} \right\} = Re \left\{ \left(-i\frac{\hbar}{m} \nabla\Psi \right)^* (i\hbar \dot{\Psi}) \right\}. \quad (83)$$

Запишем уравнение Шредингера (76) в стандартной форме

$$i\hbar \dot{\Psi} = H_{loc} \Psi, \quad (84)$$

где введен локальный нелинейный гамильтониан

$$H_{loc} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U_0 |\Psi|^2 + (V(r) - \mu). \quad (85)$$

Тогда величина Q принимает почти классический вид произведения скорости на плотность энергии

$$Q = Re \left\{ \left(\frac{\hat{p}}{m} \Psi \right)^* (H_{loc} \Psi) \right\}. \quad (86)$$

Для полноты выведем уравнение непрерывности плотности конденсата $n = \Psi^* \Psi$

$$\dot{n} = 2Re (\Psi^* \dot{\Psi}) = 2Re \left\{ \Psi^* \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U_0 \Psi^* \Psi \Psi + (V(r) - \mu) \Psi \right] \right\}. \quad (87)$$

Опять справа под знаком Re последние члены являются мнимыми величинами, а из первого члена легко выделить дивергенцию

$$\dot{n} + \nabla Re \left\{ \Psi^* \left(\frac{1}{i} \frac{\hbar}{m} \nabla \Psi \right) \right\} = 2Re \left\{ \frac{1}{i\hbar} (\nabla\Psi)^* \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\Psi) \right\}. \quad (88)$$

Справа снова ноль, и мы приходим к выражению, по виду совпадающему с потоком вероятности одной частицы

$$j = \text{Re} \left\{ \Psi^* \left(\frac{\hat{p}}{m} \Psi \right) \right\}, \quad (89)$$

но здесь Ψ - волновая функция конденсата. Формулы (86) и (89) справедливы и для операторных полей.

Наконец, для справок приведем соответствующие выражения в импульсном представлении для числа надконденсатных частиц, их энергии и соответствующие потоки

$$N = \sum_k n_k, \quad E = \sum_k n_k \varepsilon_k, \quad (90)$$

$$j = \sum_k n_k \frac{\hbar k}{m}, \quad Q = \sum_k n_k \varepsilon_k \frac{\hbar k}{m}. \quad (91)$$

9.2 Теория Кастина-Дума

Стандартный гамильтониан

$$\hat{H} = \int d^d r \hat{\Psi}^\dagger [H(t) + \frac{1}{2} g \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}] \hat{\Psi}, \quad H(t) = \frac{p^2}{2m} + U(r) - \mu, \quad g = 4\pi \hbar^2 a_s / m \quad (92)$$

приводит к уравнению движения квантового бозе-поля

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(t, \vec{r}) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) - \mu \right) \hat{\Psi}(t, \vec{r}) + g \hat{\Psi}^\dagger(t, \vec{r}) \hat{\Psi}(t, \vec{r}) \hat{\Psi}(t, \vec{r}) \quad (93)$$

Пусть $|\Phi_{ex}\rangle$ - точное состояние конденсата, $\langle \Phi_{ex} | \Phi_{ex} \rangle = 1$. Конденсат либо имеет фиксированное макроскопическое число N_{ex} частиц в одночастичном состоянии Φ_{ex} (в свободном пространстве для неподвижного конденсата $\Phi_{ex} = V^{-1/2}$, в ловушке это основное одночастичное состояние, перенормированное взаимодействием.)

$$|\Phi_{ex}\rangle = |N_{ex}\rangle, \quad N_{ex} = \langle \hat{a}_{ex}^\dagger(t) \hat{a}_{ex}(t) \rangle$$

$$|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{a}_{ex}^\dagger)^N |0\rangle$$

(оператор \hat{a}_{ex} аннигилирует одну частицу в $|\Phi_{ex}\rangle$); либо есть когерентное состояние

$$\hat{a}_{ex} |\Phi_{ex}\rangle = \sqrt{N_{ex}} |\Phi_{ex}\rangle \quad (94)$$

$$|\Phi_{ex}\rangle_{coh} = e^{-\frac{1}{2} N_{ex}} \sum \frac{N_{ex}^{N/2}}{\sqrt{N!}} |N\rangle \quad (95)$$

В макроскопическом пределе оба состояния конденсата эквивалентны.

Сложность теории Боголюбова - в том, что основные операторы меняют число частиц в системе, а наиболее естественные операторы возбуждения не должны

менять числа частиц в замкнутой системе. Кроме того выглядит противоестественно выделение c -числа из оператора поглощения частицы в точке

$$\hat{\Psi}(r, t) = \Psi_0(r, t) + \delta\hat{\Psi}(r, t) \quad (96)$$

Кастин-Дум предлагают исходить из обычного определения оператора поля

$$\hat{\Psi}(r, t) = \sum_p \Phi_p(r, t) \hat{a}_p(t)$$

Выделяют основное одночастичное состояние, которое описывается волновой функцией $\Phi_{ex}(r, t)$

$$\hat{\Psi}(r, t) = \Phi_{ex}(r, t) \hat{a}_{ex}(t) + \delta\hat{\Psi}(r, t), \quad (97)$$

$$\int d^3r \Phi_{ex}^*(r, t) \Phi_{ex}(r, t) = 1, \quad \hat{a}_{ex}(t) = \int d^3r \Phi_{ex}^*(r, t) \hat{\Psi}(r, t) \quad (98)$$

$$\delta\hat{\Psi}(r, t) = \sum_{p \neq ex} \Phi_p(r, t) \hat{a}_p(t), \quad \int d^3r \Phi_{ex}^*(r, t) \delta\hat{\Psi}(r, t) = 0, \quad (99)$$

Подставим (97) в (93). В нулевом приближении по $\delta\hat{\Psi}$ будем иметь

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{ex} \hat{a}_{ex} = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) - \mu \right) \Phi_{ex} \hat{a}_{ex} + g |\Phi_{ex}|^2 \Phi_{ex} \hat{a}_{ex}^+ \hat{a}_{ex} \hat{a}_{ex}$$

Сократим на \hat{a}_{ex} и пренебрежем флуктуацией числа частиц в конденсате ($\hat{a}_{ex}^+ \hat{a}_{ex} \simeq N_{ex}$)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{ex} = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) - \mu \right) \Phi_{ex} + g N_{ex} |\Phi_{ex}|^2 \Phi_{ex}$$

Обозначая $\Psi_0(r, t) = \Phi_{ex}(r, t) \sqrt{N_{ex}}$, получаем обычное уравнение Гр-Пит

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0(r, t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) - \mu \right) \Psi_0(r, t) + g |\Psi_0(r, t)|^2 \Psi_0(r, t)$$

Стационарное решение в приближении Томаса-Ферми равно

$$|\Phi_{ex}|^2 = \frac{\mu - U(r)}{g N_{ex}} \quad (100)$$

Уравнение для надконденсаной части имеет в линейном приближении вид

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta\hat{\Psi} = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) - \mu \right) \delta\hat{\Psi} + 2g |\Phi_{ex}|^2 \hat{a}_{ex}^+ \hat{a}_{ex} \delta\hat{\Psi} + g \Phi_{ex}^2 \hat{a}_{ex}^2 \delta\hat{\Psi}^+$$

домножаем на \hat{a}_{ex}^+ , и заменяем $\hat{a}_{ex}^+ \hat{a}_{ex} \simeq N_{ex}$

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}_{ex}^+ \delta\hat{\Psi} = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) - \mu \right) \hat{a}_{ex}^+ \delta\hat{\Psi} + 2g N_{ex} |\Phi_{ex}|^2 \hat{a}_{ex}^+ \delta\hat{\Psi} + g N_{ex} \Phi_{ex}^2 \hat{a}_{ex} \delta\hat{\Psi}^+$$

Отсюда видно, что в качестве оператора возбуждения частицы в точке следует принять

$$\hat{F} = \frac{1}{\sqrt{N_{ex}}} \hat{a}_{ex}^+ \delta\hat{\Psi}$$

Этот оператор не меняет число частиц в замкнутой системе и изображает скачок частицы из возбужденного состояния в состояние конденсата.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{F} = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) - \mu \right) \hat{F} + 2gN_{ex} |\Phi_{ex}|^2 \hat{F} + gN_{ex} \Phi_{ex}^2 \hat{F}^+$$

Подставим сюда стационарное решение (100)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{F} = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \tilde{\mu} \right) \hat{F} + \tilde{\mu} \hat{F}^+ \\ \tilde{\mu} = (\mu - U(r))$$

Это - уравнение Боголюбова-де Жена. Далее - по накатанной колее. В частности, найдем в случае свободного пространства число надконденсатных частиц

$$\delta N = \int d^3r \langle \delta\hat{\Psi}^+(r, t) \delta\hat{\Psi}(r, t) \rangle \\ \simeq \frac{1}{N_{ex}} \int d^3r \langle \delta\hat{\Psi}^+(r, t) \hat{a}_{ex} \hat{a}_{ex}^+ \delta\hat{\Psi}(r, t) \rangle \\ \simeq \int d^3r \langle \hat{F}^+ \hat{F} \rangle = \sum [v_p^2 + (u_p^2 + v_p^2) \langle \hat{b}_p^+ \hat{b}_p \rangle] \quad (101)$$

По логике Кастина-Дума числа надконденсатных частиц должны быть "хорошо определенными". Вместо когерентного состояния можно формально написать

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{k \neq 0} \frac{1}{v_k^2!} (\hat{a}_k^+ \hat{a}_{-k}^+)^{v_k^2} |\Psi_{ex}\rangle \quad (102)$$

Однако это выражение содержит операторы рождения в дробной степени. Функция $|\Psi_0\rangle$ должна быть собственной функцией гамильтониана (92), который в квадратичном приближении по операторам $\hat{a}_k(t)$ имеет вид

$$\hat{H} = E_0 + \sum_k \left[\left(\frac{(\hbar k)^2}{2m} + \mu \right) \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \mu \hat{a}_k \hat{a}_{-k} + \frac{1}{2} \mu \hat{a}_{-k}^+ \hat{a}_k^+ \right]. \quad (103)$$

. Найдем энергию Кастина-Дума

$$\langle H \rangle = \sum_k \left\langle \left[\left(\frac{(\hbar k)^2}{2m} + \mu \right) \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \mu \hat{a}_k \hat{a}_{-k} + \frac{1}{2} \mu \hat{a}_{-k}^+ \hat{a}_k^+ \right] \right\rangle = \sum_k v_k^2 \xi_k > 0$$

Эта энергия выше результата когерентной теории.

9.3 Сверхтекучий газ при нулевой температуре в ловушках

9.3.1 Введение

В идеальном бозе-газе при низкой температуре имеет место явление накапливания макроскопического числа частиц на нижнем уровне - конденсация, предсказанная в 1924 г. Бозе и Эйнштейном. Она наступает, когда тепловая длина волны де-Бройля частиц ($\lambda \simeq \hbar / (mT)^{1/2}$) с понижением температуры начинает превышать межатомное расстояние $1/n^{1/3}$. Конденсация существует и в неидеальном бозе-газе. Конденсат в неидеальном газе обладает замечательным свойством - сверхтекучестью. Сверхтекучесть была открыта Петром Капицей в конденсированной среде - в бозе-жидкости. Такой жидкостью является низкотемпературный гелий. Все другие плотные вещества при температуре, близкой к нулю, находятся в твердом состоянии. Сверхтекучий жидкий гелий имеет нулевую вязкость и его течение по капиллярам не затухает.

В двадцатом веке Россия подарила миру двух великих физиков-теоретиков, внесших выдающийся вклад в развитие этой области. Это - Лев Ландау и Николай Боголюбов. Ландау дал принципиальное объяснение явления и построил феноменологическую теорию сверхтекучей жидкости (1941). Боголюбов создал микроскопическую теорию сверхтекучести, основанную на модели слабонеидеального бозе-газа (1947). Эта модельная теория превратилась в теорию, адекватную физическому явлению, после открытия сверхтекучести газов щелочных металлов.

В 1995 г. Кеттерли, Корнелл и Виман поместили в магнитную ловушку газ рубидия и понизили температуру до рекордно низкой величины порядка 10^{-6} . Атом щелочного металла ^{85}Rb имеет нечетное число электронов (37) и нечетное число нуклонов (85) и является бозе-частицей. Было экспериментально показано, что при достигнутых температурах в газе образуется бозе-эйнштейновская конденсация. А наличие в нем незатухающих колебаний указывает на наличие второго удивительного свойства бозе-систем - на сверхтекучесть. Позже сверхтекучесть была наблюдаема у других газов щелочных металлов (Li, Na, ...), а также у поляризованного атомарного водорода и метастабильного газа гелия. В прошлом году Кеттерли, Корнелл и Виман стали лауреатами Нобелевской премии.

Бурное развитие экспериментальных исследований газов в магнитных ловушках привлекло внимание к этому явлению большого числа теоретиков. Настоящая лекция посвящена краткому и далеко не полному обзору теоретических работ, которые опубликованы в последнее время. Кроме того, хотя большинство слушателей Школы знакомо с предметом в рамках девятого тома курса "Теоретической физики", мы в нескольких словах напомним теорию Боголюбова.

План лекции.

А Газ в однородном пространстве.

A1. Нелинейное уравнение Шредингера, конденсат, уравнение Гросса-Питаевского.

A2 Элементарные возбуждения неидеального бозе-газа. Сверхтекучесть.

A3. Энергия и волновая функция основного состояния.

A4. Солитоны и стационарный эффект Джозефсона.

A5. Решеточный газ.

- А6. Прямое наблюдение коэффициентов боголюбовского преобразования.
 В. Газ в ловушках.
 В1. Уравнение Гросса-Питаевского в магнитной ловушке. Основное состояние в приближении Томаса-Ферми.
 В2. "Гидродинамические уравнения" бозе-газа при нулевой температуре. Возбуждения конденсата в ловушках.
 В3. Осцилляции основного состояния.
 В4. Излучение боголюбовских возбуждений в осциллирующем газе, обусловленное статическим дефектом.
 В5. "Черенковское излучение"
 В6. Параметрический резонанс как механизм релаксации осцилляций.

9.3.2 А1. Нелинейное уравнение Шредингера, конденсат, уравнение Гросса-Питаевского

Итак, рассмотрим неидеальный бозе-газ в ловушке $V(\vec{r})$, которая создается внешним магнитным полем. Для простоты ограничимся температурой, близкой к нулю, когда тепловых возбуждений очень мало $T \ll T_c \simeq (\hbar^2/m)n^{2/3}$. Полный гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H}_{tot} = \int d^3r [\hat{\Psi}^\dagger(t, \vec{r}) (\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) - \mu_0) \hat{\Psi}(t, \vec{r}) + \frac{1}{2} U_0 \hat{\Psi}^\dagger(t, \vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(t, \vec{r}) \hat{\Psi}(t, \vec{r}) \hat{\Psi}(t, \vec{r})]. \quad (104)$$

Величина постоянной μ_0 произвольна и, фактически, фиксирует начало отсчета энергии. Ниже ее значение будет выбрано так, чтобы функция основного состояния не зависела от времени. Имея ввиду описание явлений, слабо меняющихся на масштабах парного взаимодействия атомов, потенциальная энергия взаимодействия записана в локальной форме. Параметр U_0 имеет размерность энергия×объем и записывается в виде

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (105)$$

Величина a называется длиной рассеяния. Производная по времени от гайзенберговских операторов равна

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(t, \vec{r}) = [\hat{\Psi}(t, \vec{r}), \hat{H}]. \quad (106)$$

Приходим к нелинейному "уравнению Шредингера"

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(t, \vec{r}) = (\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) - \mu_0) \hat{\Psi}(t, \vec{r}) + U_0 \hat{\Psi}^\dagger(t, \vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(t, \vec{r}) \hat{\Psi}(t, \vec{r}). \quad (107)$$

Разложим функцию бозе-поля $\hat{\Psi}$ по собственным функциям одночастичной задачи

$$(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) - \mu_0) \varphi_k(\vec{r}) = \xi_k \varphi_k(\vec{r}) \quad (108)$$

:

$$\hat{\Psi} = \sum_k \hat{a}_k(t) \varphi_k(\vec{r}). \quad (109)$$

В первой части лекции для простоты будем рассматривать газ в отсутствии потенциала ловушки, когда функции $\varphi_k(\vec{r}) = V^{-1/2} \exp(i\vec{k}\vec{r})$ суть плоские волны в ящике $V = L^3$ с периодическими граничными условиями $\varphi_k(\vec{r}) = \varphi_k(\vec{r} + \vec{L})$.

В основном состоянии (при нулевой температуре) все частицы идеального бозе-газа находятся в конденсате, т.е. имеют нулевой импульс. В неидеальном газе при $T = 0$ большинство частиц N_0 остаются в конденсате, но из-за отталкивания небольшая доля частиц имеют ненулевые импульсы. Поэтому из операторной функции (109) целесообразно выделить оператор с нулевым импульсом

$$\hat{\Psi} = \varphi_0(\vec{r})\hat{a}_0 + \hat{\Psi}_1, \quad \langle \hat{\Psi}_1 \rangle = 0, \quad (110)$$

$$\hat{\Psi}_1 = \sum_{k \neq 0} \hat{a}_k(t) \varphi_k(\vec{r}) \quad (111)$$

В представлении вторичного квантования конденсат из N_0 частиц с нулевым импульсом описывается вектором состояния, образованном многократным действием на состояние вакуума оператора рождения

$$|N_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_0!}} (\hat{a}_0^+)^{N_0} |0\rangle, \quad \langle N_0 | N_0 \rangle = 1 \quad (112)$$

Когерентным состоянием называется собственное состояние оператора поглощения

$$\hat{a}_0 |A\rangle = A |A\rangle. \quad (113)$$

Это состояние есть суперпозиция состояний с разным числом n частиц с нулевым импульсом.

$$|\Psi_{00}\rangle = |A\rangle = e^{-\frac{1}{2}|A|^2} \sum_n \frac{A^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad \langle A | A \rangle = 1, \quad N_0 = \langle A | \hat{a}_0^+ \hat{a}_0 | A \rangle = |A|^2. \quad (114)$$

В макроскопическом ($N_0 \rightarrow \infty$) когерентном состоянии относительная флуктуация числа частиц в конденсате, стремится к нулю. Поэтому в макроскопическом пределе векторы состояния (112) и (114) эквивалентны. Ниже, мы будем считать, что вектор основного состояния конденсата имеет форму (114).

Все наблюдаемые величины при низких температурах являются средними по состоянию конденсата. Поэтому, имея ввиду (113), можно в (110) первый член заменить на классическую функцию конденсата

$$\hat{\Psi} = \Psi + \hat{\Psi}_1 \quad (115)$$

Амплитуда плотности конденсата Ψ в слабо неравновесном случае есть классическое бозе-поле $\Psi(t, \vec{r})$, аналогичное скалярному потенциалу классического электрического поля. Чтобы найти эволюцию конденсата, следует подставить (115) в (107) и пренебречь операторной частью поля, описывающей надконденсатные частицы $\hat{\Psi}_1$. Имеем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \vec{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi(t, \vec{r}) + U_0 \Psi^*(t, \vec{r}) \Psi(t, \vec{r}) \Psi(t, \vec{r}) - \mu_0 \Psi(t, \vec{r}). \quad (116)$$

Это есть нелинейное уравнение Шредингера. В физике сверхтекучего бозе-газа оно называется уравнением Гросса-Питаевского (1961), которые первые обосновали возможность описания движения конденсата уравнением (116). Основное состояние этого уравнения однородно и не зависит от времени

$$\Psi(t, \vec{r}) = \Psi, \quad (117)$$

если введенная выше константа равна

$$\mu_0 = U_0 \Psi^2. \quad (118)$$

Число частиц и энергия однородного конденсата (см. (104)) связаны с амплитудой конденсата Ψ формулами

$$N_0 = \int d^3r \Psi^\dagger \Psi = \Psi^2 V, \quad E_{00} = \frac{1}{2} U_0 \int d^3r \Psi^\dagger \Psi^\dagger \Psi \Psi = \frac{U_0 N_0^2}{2V} \quad (119)$$

Дифференцируя энергию по числу частиц, находим химический потенциал

$$\mu = \frac{\partial E_{00}}{\partial N_0} = \frac{U_0 N_0}{V} = U_0 \Psi^2. \quad (120)$$

Сравнивая это выражение с (118), мы убеждаемся, что постоянная μ_0 есть химический потенциал. При этом $E_{00} = \frac{1}{2} \mu_0 N_0$. В отличие от идеального газа, неидеальный бозе-газ в основном состоянии обладает отличным от нуля давлением

$$P = - \frac{\partial E_{00}}{\partial V} = \frac{U_0 N_0^2}{2V^2} \quad (121)$$

и гидродинамической скоростью звука

$$c = \sqrt{\frac{\partial P}{\partial \rho}} = \sqrt{\frac{U_0 \rho}{m^2}} = \sqrt{\frac{\mu_0}{m}}. \quad (122)$$

($\rho = mN_0/V$ - плотность газа). Здесь мы пренебрегаем отличием N_0 от полного числа частиц N .

Одним из первых доказательств появления бозе-конденсации в ультрахолодном газе было обнаружение в 1997 г. уменьшения в шесть раз трехчастичной рекомбинации, ранее предсказанного Каганом и Шляпниковым. В том же году Кеттерли продемонстрировал когерентные свойства газа, наблюдая интерференцию при слиянии двух конденсатов.

9.3.3 А2 Элементарные возбуждения неидеального бозе-газа. Сверхтекучесть

Даже при нулевой температуре небольшая часть частиц не принадлежит конденсату и имеет отличные от нуля импульсы. Свойства этих частиц описываются операторной функцией $\hat{\Psi}_1$ в (115). Эволюция этого оператора описывается линейной по $\hat{\Psi}_1$ частью основного уравнения (107).

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_1(t, \vec{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \hat{\Psi}_1(t, \vec{r}) + 2U_0 \Psi^2 \hat{\Psi}_1(t, \vec{r}) + U_0 \Psi^2 \hat{\Psi}_1^\dagger(t, \vec{r}) - \mu \hat{\Psi}_1(t, \vec{r}). \quad (123)$$

С учетом (120) приводим это уравнение к компактному виду

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_1 = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \mu \right) \hat{\Psi}_1 + \mu \hat{\Psi}_1^+. \quad (124)$$

Для каждого члена разложения (111) имеем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}_k(t) = \xi_k \hat{a}_k(t) + \mu \hat{a}_{-k}^+(t). \quad (125)$$

В этом уравнении удивительным образом перемешаны бозе-операторы $\hat{a}_k(t)$ и $\hat{a}_{-k}^+(t)$. Первый член справа описывает свободное движение частицы, а последний член в приближении самосогласованного поля отражает виртуальное поглощение частицы конденсатом.

Для диагонализации уравнения (125) применим каноническое преобразование Боголюбова

$$\hat{a}_k(t) = [u_k \hat{b}_k e^{-i\varepsilon_k t/\hbar} - v_k \hat{b}_{-k}^+ e^{i\varepsilon_k t/\hbar}] \quad (126)$$

и его эрмитово сопряженное выражение (с заменой знака импульса)

$$\hat{a}_{-k}^+(t) = [u_k \hat{b}_{-k}^+ e^{+i\varepsilon_k t/\hbar} - v_k \hat{b}_k e^{-i\varepsilon_k t/\hbar}]. \quad (127)$$

Здесь введены операторы поглощения \hat{b}_k и рождения \hat{b}_k^+ квазичастиц, которые удовлетворяют таким же правилам коммутации, что и исходные операторы "голых частиц".

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^+] = \delta_{k,k'}, \quad [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] = [\hat{b}_k^+, \hat{b}_{k'}^+] = 0. \quad (128)$$

Отсюда

$$u_k^2 - v_k^2 = 1 \quad (129)$$

В рассматриваемом приближении квазичастицы ведут себя как частицы идеального газа, и соответствующие операторы являются собственными "функциями" оператора энергии

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{b}_k = \varepsilon_k \hat{b}_k, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{b}_k^+ = -\varepsilon_k \hat{b}_k^+. \quad (130)$$

с неизвестными пока собственными значениями $\pm\varepsilon_k$. Коэффициенты преобразования u_k, v_k полагаются действительными, четными функциями вектора k . Это всегда можно сделать удачным выбором фаз у операторов \hat{b}_k .

Смысл формулы (126) состоит в том, что поглощение бозе-частицы, из состояния с импульсом k эквивалентно поглощению с вероятностью u_k^2 конденсатом одного кванта элементарного возбуждения и рождению с вероятностью v_k^2 из конденсата кванта с противоположным импульсом.

Подставив (126), (127) и (130) в (125), находим энергию квазичастицы

$$\varepsilon_k = \sqrt{\xi_k^2 - \mu^2} = \sqrt{\frac{(\hbar k)^2}{m} \mu + \left(\frac{(\hbar k)^2}{2m} \right)^2}. \quad (131)$$

и коэффициенты преобразования

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\xi_k}{\varepsilon_k} + 1 \right)}, \quad v_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\xi_k}{\varepsilon_k} - 1 \right)}, \quad u_k^2 + v_k^2 = \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}, \quad 2u_k v_k = \frac{\mu}{\varepsilon_k}. \quad (132)$$

Фактически, это коэффициенты поворота в пространстве с гиперболической метрикой (129).

При больших импульсах ε_k совпадает с энергией свободной частицы

$$\varepsilon_k \simeq \frac{(\hbar k)^2}{2m}, \quad \varepsilon_k \gg \mu, \quad (133)$$

а длинноволновая часть спектра имеет форму звукового спектра, т.е. линейно зависит от импульса.

$$\varepsilon_k = c\hbar k, \quad c = \sqrt{\frac{\mu}{m}} = \sqrt{\frac{U_0 N_0}{mV}}, \quad \varepsilon_k \ll \mu. \quad (134)$$

Величина c численно равна гидродинамической скорости звука (122). Таким образом, квазичастицы играют в бозе-газе роль звуковых квантов - фононов. Фазовая скорость квазичастиц равна

$$c(k) = \frac{\varepsilon_k}{\hbar k} = c \sqrt{1 + \frac{(\hbar k)^2}{4\mu m}} \quad (135)$$

и ее минимальное значение равно c .

В неидеальном бозе газе нет других низколежащих мод возбуждений. Следовательно, согласно критерию Ландау неидеальный газ при низких температурах является сверхтекучим, пока скорость потока меньше скорости звука

$$v \leq c$$

Одним из прямых доказательств сверхтекучести является наблюдение незатухающих осцилляций газа в магнитной ловушке (см. раздел В).

Из преобразований Боголюбова следует, что среднее по состоянию газа число частиц с импульсом k равно

$$N_k = \langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle = v_k^2 + u_k^2 \langle \hat{b}_k^+ \hat{b}_k \rangle + v_k^2 \langle \hat{b}_{-k}^+ \hat{b}_{-k} \rangle. \quad (136)$$

При нулевой температуре квазичастицы отсутствуют, и первый член (136) дает

$$N_k^{(0)} = v_k^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\xi_k}{\varepsilon_k} - 1 \right). \quad (137)$$

При $\varepsilon_k \ll \mu$ это число весьма велико, но при $\varepsilon_k \gg \mu$ быстро падает. Полное число надконденсатных частиц по порядку величины равно, очевидно, числу состояний свободных частиц с импульсами меньше $p_{\max} = \sqrt{2m\mu}$. Это число равно

$$n_1^{(0)} = \frac{1}{V} \sum N_k^{(0)} \simeq \frac{p_{\max}^3}{(2\pi\hbar)^3} \simeq n_0 \sqrt{n_0 a^3}. \quad (138)$$

Теория Боголюбова опирается на предположение, что в основном состоянии большинство частиц находится в конденсате, и $n_1^{(0)} \ll n_0$. Отсюда находим оценку максимальной плотности газа

$$\max n_0 \simeq a^{-3}, \quad (139)$$

Получили естественный результат: газ можно считать разреженным, пока среднее расстояние между частицами велико по сравнению с длиной рассеяния. Отметим, что при этом

$$\frac{\mu}{T_c} \simeq an^{1/3} \ll 1.$$

Это означает что температура, имеющая порядок величины μ , много ниже температуры фазового перехода, и существует широкая область температур ($\mu \leq T \leq T_c$), в которой можно пренебрегать отличием квазичастиц от частиц.

Плотность частиц, возбужденных температурой согласно (136) равна

$$n_1^{(T)} = \sum \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} n_{bk}, \quad n_{bk} = \langle \hat{b}_k^+ \hat{b}_k \rangle.$$

Число квазичастиц определяется температурой и, следовательно, описывается распределением Планка-Бозе-Эйнштейна с нулевым химическим потенциалом

$$n_{bk} = \frac{1}{\exp(\beta\varepsilon_k) - 1}.$$

В зависимости от рассматриваемой области температур плотность возужденных частиц по порядку величины равна

$$n_1^{(T)} \simeq \frac{\mu}{T} \left(\frac{T}{c} \right)^3, \quad 0 < T < \mu, \quad (140)$$

$$n_1^{(T)} \simeq \sum N_k \simeq (mT)^{3/2}, \quad \mu < T \ll T_c \quad \frac{\mu}{T_c} = an^{1/3}. \quad (141)$$

Подчеркнем, что энтропия конденсата равна нулю, и при $T \ll T_c$ вклад в энтропию и теплоемкость дают только надконденсатные частицы.

Важной характеристикой бозе-газа при низких температурах является аномальное среднее

$$A = \frac{1}{V} \langle \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_1 \rangle = -\frac{1}{V} \sum \frac{\mu}{2\varepsilon_k} (1 + 2n_{bk}). \quad (142)$$

Абсолютная величина этого аномального среднего по порядку величины совпадает с числом надконденсатных частиц. Отличие этого аномального среднего от нуля явным образом показывает, что сверхтекучий бозе-газ в замкнутом объеме принципиально не описывается волновой функцией или матрицей плотности с фиксированным числом частиц.

Применим выражение (136) к случаю, когда газ, находящийся в основном состоянии, возбужден с образованием n_q квазичастиц с импульсом q . Тогда число частиц с импульсами q и $-q$ увеличивается:

$$N_q = v_q^2 + u_q^2 n_q, \quad N_{-q} = v_q^2 + v_q^2 n_q.$$

Такое возбуждение недавно было реализовано, соответствующее увеличение частиц с противоположными импульсами было измерено и, тем самым, экспериментально доказана реальность боголюбовского преобразования.

9.3.4 3А. Энергия и волновая функция основного состояния

Из теории Боголюбова следует, что в неидеальном газе при нулевой температуре небольшая часть ($\sqrt{n_0 a^3}$) частиц имеет отличные от нуля импульсы. Поэтому при вычислении полной энергии и построении полной функции основного состояния газа следует учесть вклад надконденсатных частиц.

В гамильтониане системы (104) члены второго порядка по операторам $\hat{a}_k(t)$ равны

$$\hat{H} = \sum_{k \neq 0} [\xi_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2V} U_0 \hat{a}_0^+ \hat{a}_0^+ \hat{a}_k \hat{a}_{-k} + \frac{1}{2V} U_0 \hat{a}_{-k}^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_0 \hat{a}_0], \quad (143)$$

Мы будем пренебрегать членом четвертого порядка $\sum_{k_i \neq 0} \frac{1}{2V} U_0 \hat{a}_{k_1}^+ \hat{a}_{k_2}^+ \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4}$, который при $T \ll T_c$ не играет роли.

Полагая, что конденсат находится в когерентном состоянии, заменим оператор \hat{a}_0 на $\sqrt{N_0}$ и учтем (120). Тогда гамильтониан (143) принимает форму

$$\hat{H} = \sum_{k \neq 0} [\xi_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \mu \hat{a}_k \hat{a}_{-k} + \frac{1}{2} \mu \hat{a}_{-k}^+ \hat{a}_k^+]. \quad (144)$$

Выражение (144) после подстановки (126), (127) принимает диагональную форму

$$\hat{H} = E_1 + \hat{H}_b \quad (145)$$

$$E_1 = \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} (\varepsilon_k - \xi_k), \quad \hat{H}_b = \sum_{k \neq 0} \varepsilon_k \hat{b}_k^+ \hat{b}_k \quad (146)$$

Заметим, что определение коэффициентов боголюбовского преобразования путем непосредственной диагонализации квадратичной формы (144) является более утомительным способом, чем метод диагонализации линейного уравнения (125).

Гамильтониан \hat{H}_b описывает суммарную энергию возбуждений. Величина E_1 есть энергия надконденсатных частиц при нулевой температуре. Если обрезать ее на импульсах порядка $\sqrt{m\mu}$, она равна небольшой отрицательной величине порядка $-(a^3 N_0/V)^{1/2} E_{00}$. При больших импульсах энергия E_1 расходится. Эта расходимость ликвидируется уточнением выражения для U_0 во втором порядке теории возмущений (Хуанг, Янг, Ли, 1957). В результате полная энергия основного состояния газа равна

$$E_0 = \frac{2\pi \hbar^2 a N^2}{mV} \left[1 + \frac{128}{15} \sqrt{\frac{a^3 N}{\pi V}} \right].$$

Волновая функция основного состояния газа с учетом частиц с ненулевым импульсом должна содержать нулевое число квазичастиц, и удовлетворять при всех $k \neq 0$ уравнению

$$\hat{b}_k |\Psi_0\rangle = 0. \quad (147)$$

Волновая функция основного состояния газа имеет очень интересную структуру (Хуанг)

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{k>0} Q_k |\Psi_{00}\rangle, \quad (148)$$

$$Q_k = \sum_{j=0} B_k A_k^j \frac{1}{j!} (\hat{a}_k^+ \hat{a}_{-k}^+)^j \quad (149)$$

$$A_k = -\frac{\xi_k - \varepsilon_k}{\mu}, \quad B_k = 1/\sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\xi_k}{\varepsilon_k} + 1 \right)} \quad (150)$$

Здесь $|\Psi_{00}\rangle$ - вектор состояния конденсата частиц с нулевым импульсом. Согласно выражению (149) в основном состоянии $|\Psi_0\rangle$ частицы разбиваются на пары с противоположными импульсами, которые группируются в квазикогерентные состояния, аналогичные (114).

Из (145) и (147) следует, что $|\Psi_0\rangle$ есть точное решение ур-ия Шредингера

$$\hat{H} |\Psi_0\rangle = E_1 |\Psi_0\rangle \quad (151)$$

Теперь рассмотрим неоднородные состояния конденсата.

9.3.5 А4. Солитоны и стационарный эффект Джозефсона

Уравнение (116) кроме тривиального однородного решения (117) имеет точное решение Захарова-Шабата в форме плоской уединенной бегущей волны (кинк или солитон)

$$\Psi(t, x) = \sqrt{n_c} [\sin \theta \tanh(\sin \theta (x - vt) / \lambda) + i \cos \theta], \quad (152)$$

где v - скорость солитона, которая всегда меньше скорости звука c , $\cos \theta = v/c$, $\lambda = \hbar/\sqrt{m\mu}$ - корреляционная длина, $n_c = \mu/U_0$ - плотность вдали от центра. Покоящийся солитон

$$\Psi(t, x) = \sqrt{n_c} \tanh(x/\lambda) \quad (153)$$

имеет толщину 2λ , а плотность газа в начале координат обращается в нуль. Длина солитона и плотность газа в центре с увеличением его скорости растут:

$$L = \frac{2\lambda}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}, \quad |\Psi(t, vt)|^2 = n_c (v/c)^2.$$

Обратим внимание, что вдали от центра движущегося солитона газ неподвижен.

$$\Psi(t, x) = \sqrt{n_c} [\pm \sin \theta - i \cos \theta] = -i\sqrt{n_c} \exp(\pm i\theta), \quad x = \pm\infty$$

и имеет разность фаз

$$\delta\varphi = 2\theta, \quad 0 < \delta\varphi < \pi$$

В работе Хакима /1998/ солитонная функция (в другой форме) была использована при решении задачи о движении одномерной примеси в среде, описываемой нелинейным уравнением Шредингера. Результаты этой работы можно применить для построения модели стационарного эффекта Джозефсона в бозе-газе.

Уравнение Гросса-Питаевского инвариантно относительно перехода в движущуюся систему координат, если кроме преобразования пространственных координат $\vec{r}' = \vec{r} - \vec{v}t$, произвести калибровочное преобразование

$$\Psi(t, \vec{r}) = e^{i\varphi(t, \vec{r}')} \tilde{\Psi}(t, \vec{r}'),$$

$$\dot{\varphi} = \frac{mv^2}{2\hbar}, \quad \nabla' \varphi = \frac{m\vec{v}}{\hbar}.$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \vec{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi(t, \vec{r}) + U_0 \Psi^*(t, \vec{r}) \Psi(t, \vec{r}) \Psi(t, \vec{r}) - \mu \Psi(t, \vec{r}). \quad (154)$$

Это позволяет из (152) найти вид неподвижного солитона в поле конденсата, который движется со скоростью v . Такой солитон описывается функцией

$$\Psi(t, x) = e^{i\varphi(t, x)} \sqrt{n_c} \{ \sin \theta \tanh[\sin \theta (x + b)] - i \cos \theta \}, \quad (155)$$

$$\varphi(t, x) = \frac{mv}{\hbar} x - \frac{mv^2}{2\hbar} t + \varphi_0, \quad (156)$$

$$\Psi(t, x \rightarrow \pm\infty) = -i\sqrt{n_c} \exp(\pm i\theta) \exp i\varphi(t, x). \quad (157)$$

Прямой проверкой можно убедиться, что (134) удовлетворяет уравнению Гросса-Питаевского (116).

Вводим бесконечно узкий барьер, неподвижный относительно солитона $V(x) = g\delta(x)$. Решение задачи о туннелировании сверхтекучего потока сквозь этот барьер дается функциями, которые слева и справа от барьера имеют вид (155) и отличаются друг от друга только значениями фаз φ_0 и положениями центров солитонов. Разные значения $\cos \theta$ справа и слева невозможны, поскольку справа и слева поток частиц должен быть одинаковым. При $x > 0$ будем использовать (155), (156), а при $x < 0$ - функцию

$$\Psi(t, x) = e^{i\varphi(t, x)} \sqrt{n_c} \{ \sin \theta \tanh(\sin \theta (x - b)) - i \cos \theta \}. \quad (158)$$

$$\varphi(t, x) = \frac{mv}{\hbar} x - \frac{mv^2}{2\hbar} t + \varphi_-, \quad (159)$$

$$\Psi(t, x \rightarrow -\infty) = -i \exp(-i\theta) \sqrt{n_c} \exp\left(i \left(\frac{mv}{\hbar} x - \frac{mv^2}{2\hbar} t + \varphi_- \right)\right) \quad (160)$$

На больших расстояниях от начала координат фазы функции имеют вид слева $(-\frac{1}{2}\pi + \frac{mv}{\hbar} x - \frac{mv^2}{2\hbar} t + \varphi_- - \theta)$ и справа $(-\frac{1}{2}\pi + \frac{mv}{\hbar} x - \frac{mv^2}{2\hbar} t + \varphi_0 + \theta)$ Следовательно, асимптотический скачок фазы, обусловленный барьером, характеризуется величиной $\delta\varphi = 2\theta + \varphi_0 - \varphi_-$.

На дельтаобразном потенциале функции непрерывны, а их логарифмические производные претерпевают скачок

$$\tilde{\Psi}(t, +0) = \tilde{\Psi}(t, -0)$$

$$\frac{\partial}{\tilde{\Psi}(t, +0)\partial x'} \tilde{\Psi}(t, +0) - \frac{\partial}{\tilde{\Psi}(t, -0)\partial x'} \tilde{\Psi}(t, -0) = 2g$$

Отсюда находим уравнения, задающие величину параметра b и разность фаз

$$\exp(i\varphi_0)\{A \sin \theta - i \cos \theta\} = \exp(i\varphi_-)\{-A \sin \theta - i \cos \theta\}$$

$$\frac{(1 - A^2) \sin^2 \theta}{\{A \sin \theta - i \cos \theta\}} - \frac{(1 - A^2) \sin^2 \theta}{\{-A \sin \theta - i \cos \theta\}} = 2g, \quad A = \tanh[b \sin \theta]$$

Приведем эти уравнения к виду

$$\frac{A(1 - A^2) \sin^3 \theta}{\cos^2 \theta + A^2 \sin^2 \theta} = g, \quad \sin(\varphi_0 - \varphi_-) = -\frac{2A \sin \theta \cos \theta}{\cos^2 \theta + A^2 \sin^2 \theta} \quad (161)$$

В случае высокого барьера ($g \gg 1, A \ll 1, \cos \theta \ll 1, 2\theta = \pi - 2v/c$) эти уравнения принимают вид

$$g = \frac{A}{v^2 + A^2}, \quad \sin(\varphi_0 - \varphi_-) = -gv.$$

Первое равенство имеет решение только при $v \leq v = c/2g$. Последнее равенство можно выразить через скачок фазы (за вычетом mvx/\hbar) на больших расстояниях от барьера

$$v = v_c \sin \delta\varphi.$$

Мы видим, что при туннелировании конденсата через высокий барьер сверхтекучий поток связан с максимальным потоком, зависящим от высоты барьера, соотношением того же вида, что и в стационарном эффекте Джозефсона в сверхпроводниках.

9.3.6 А5. Решеточный газ

Недавно появилось новое направление исследований бозе-конденсата в ловушках. Газ помещается в поле стоячей волны лазера, которая образуют периодическую потенциальную решетку. У частиц в решетке квантовым числом является не импульс, а квазиимпульс, и конденсат в решетке принимает ряд новых своеобразных свойств. Чтобы определить, в каком состоянии находился газ в решетке, был выполнен эксперимент (Педри и др., 2001) по разлету частиц газа после выключения потенциала. На эксперименте в каждой ячейке находилось около 100 частиц, а число ячеек - 200.

Рассмотрим простую модель волновой функции конденсата Ψ в одномерном периодическом потенциале в сигарообразной ловушке конечной длины L .

В этой модели функция Ψ имеет вид блоховской волны, модулированной огибающей функцией Гаусса

$$\Psi(x, t) \sim (1 + 2 \cos Bx) \exp(-x^2/4L^2), \quad B = 2\pi/d \quad (162)$$

Зависимость волновой функции Ψ от расстояния до оси x выписывать не будем.

Чтобы понять, результат эксперимента, найдем вид этой функции в импульсном пространстве с точностью до нормировки

$$\begin{aligned}\psi_0(p) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-x^2/4L^2) e^{-ipx} (1 + e^{iBx} + e^{-iBx}) \\ &= e^{-p^2 L^2} + e^{-(p-B)^2 L^2} + e^{-(p+B)^2 L^2}\end{aligned}$$

Функция имеет вид трех узких пиков: первый расположен в начале координат, а два других в точках обратных векторов решетки $\pm B$.

В ходе мгновенного снятия потенциала в момент времени $t = 0$ каждая частица не успевает изменить свой импульс, и $[\psi(p)]_{t=0} = \psi_0(p)$. Пренебрегая взаимодействием частиц в процессе разлета, можно считать, что частицы разлетаются как свободные частицы с сохранением импульса, и написать волновую функцию частиц в реальном пространстве в момент времени $0 < t \ll mL^2$ в виде функции $\psi_0(p)$, умноженной на бегущую волну:

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \psi_0(p) e^{ipx - i\frac{1}{2m} p^2 t} = \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ipx - i\frac{1}{2m} p^2 t} \left(e^{-p^2 L^2} + e^{-(p-B)^2 L^2} + e^{-(p+B)^2 L^2} \right) \\ &\sim \exp(-x^2/4L^2) + e^{iBx - i\frac{1}{2m} B^2 t} \exp\left(-\left(x - \frac{B}{m}t\right)^2/4L^2\right) + e^{-iBx - i\frac{1}{2m} B^2 t} \exp\left(-\left(x + \frac{B}{m}t\right)^2/4L^2\right)\end{aligned}$$

Вклад от $p \simeq 0$ состоит из неподвижных частиц и остается около начала координат. Частицы с $p \simeq \pm B$ разлетаются со скоростями $\pm B/m$. Такой распад частиц на три облака наблюдался на эксперименте. Это - прямое доказательство существования единой когерентной волновой функции бозе-конденсата. Легко понять, что состояние в решетке, в котором волновые функции конденсата в соседних ячейках имеют случайную разность фаз, после снятия удерживающего потенциала приводит к одному облаку около начала координат, поскольку для образования волновой функции с векторами обратной решетки должно существовать туннелирование конденсата между ячейками с сохранением общей фазы, как у (162)

9.3.7 А6. Прямое наблюдение коэффициентов боголюбовского преобразования

Метод разлета решеточного газа недавно (Вогелс и др., 2002) был использован для прямого наблюдения коэффициентов боголюбовского преобразования.

Применим выражение (136)

$$N_k = \langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle = v_k^2 + u_k^2 \langle \hat{b}_k^+ \hat{b}_k \rangle + v_k^2 \langle \hat{b}_{-k}^+ \hat{b}_{-k} \rangle. \quad (163)$$

к случаю, когда газ, находящийся в основном состоянии в решетке, возбужден с образованием n_q квазичастиц с импульсом q . Тогда число частиц с импульсами q и $-q$ увеличивается:

$$N_q = v_q^2 + u_q^2 n_q, \quad N_{-q} = v_q^2 + v_q^2 n_q.$$

Такое возбуждение недавно было реализовано. В результате около частиц с нулевым импульсом появляются два сателлита, которые, после выключения ловушечного поля, разлетаются со скоростями $\pm q/m$. Кроме того, около частиц с импульсами $p \simeq \pm B$ возникают две пары сателлитов с импульсами $p' \simeq \pm B \pm q$. Измерение интенсивностей этих шести сателлитов явилось наглядной демонстрацией преобразования Боголюбова.

9.3.8 В1 Уравнение Гросса-Питаевского для газа в магнитной ловушке. Основное состояние в приближении Томаса-Ферми

Бозе-конденсат экспериментально исследуют в магнитных ловушках. Введем в уравнение Гросса-Питаевского (116) член с внешним потенциалом $V(r)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \vec{r}) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) - \mu \right) \Psi(t, \vec{r}) + U_0 \Psi^+(t, \vec{r}) \Psi(t, \vec{r}) \Psi(t, \vec{r}). \quad (164)$$

Для определенности, будем считать, что ловушка имеет форму сигары длины L , потенциал которой имеет цилиндрическую симметрию с параболической зависимостью от расстояния до оси цилиндра

$$V(\rho) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 \rho^2 \quad (165)$$

Рассмотрим свойства основного состояния газа в ловушке. Оно описывается стационарным решением уравнения (164)

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) - \mu \right) \Psi_0 + U_0 \Psi_0^* \Psi_0 \Psi_0 = 0. \quad (166)$$

Если частота ловушки достаточно велика, то потенциал (165) играет определяющую роль, и в первом приближении в уравнении (166) можно отбросить нелинейный член. Уравнение принимает вид обычного уравнения Шредингера для двумерного осциллятора, решение которого имеет вид

$$\Psi_0(\rho) = \sqrt{n} e^{-\rho^2/2R_0^2}, \quad R_0^2 = \hbar/m\omega_0.$$

В этом разделе n есть плотность частиц на оси цилиндра. При этом химический потенциал имеет смысл энергии нулевых колебаний

$$\mu = \hbar\omega_0. \quad (167)$$

Это приближение справедливо, когда последний член (166) мал по сравнению с $\mu\Psi_0$

$$U_0 n \ll \hbar\omega_0. \quad (168)$$

В противоположном пределе большой плотности можно в (166) пренебречь кинетической энергией и получить

$$\Psi_0(\rho) = \sqrt{\frac{1}{U_0} \left(\mu - \frac{1}{2} m \omega_0^2 \rho^2 \right)} = \sqrt{n} \sqrt{\left(1 - \frac{\rho^2}{R^2} \right)}, \quad n = \frac{\mu}{U_0}. \quad (169)$$

В этом приближении, называемом приближением Томаса-Ферми, плотность газа на оси ловушки связана с химическим потенциалом формулой

$$\mu = U_0 n \quad (170)$$

Газ в ловушке имеет вид газового шнура, радиус которого равен

$$R^2 = 2\mu/m\omega_0^2, \quad (171)$$

Волновой функции (169) отвечает кинетическая энергия порядка величины \hbar^2/mR^2 , и последняя мала по сравнению с μ при условии малости корреляционной длины по сравнению с размером системы

$$\lambda = \hbar(m\mu)^{-1/2} \ll R \quad (172)$$

9.3.9 В2. "Гидродинамические уравнения" бозе-газа при нулевой температуре. Возбуждения конденсата в ловушках

Еще раз обсудим роль волновой функции конденсата. Нелинейное уравнение Шредингера (164) для волновой функции бозе-конденсата в ловушке, кроме стационарного решения $\Psi_0(\rho)$, имеет неоднородные нестационарные решения $\Psi(t, \vec{r}) = \Psi_0(\rho) + \Psi_1(t, \vec{r})$, отвечающие эволюции конденсата без потери когерентности. При выводе спектра боголюбовских возбуждений мы не использовали коммутационные свойства оператора $\Psi_1(t, \vec{r})$. Поэтому решение линеаризованного уравнения Шредингера для классической функции $\Psi_1(t, \vec{r})$ снова приводит к звуковому спектру, но теперь он описывает не энергию квантовых квазичастиц, а спектр колебаний конденсата, описываемого классическим комплексным полем. Это означает, что многие свойства возбуждений бозе-газа можно понять, не переходя к вторичному квантованию, подобно тому как о квантовой природе колебаний в твердом теле вспоминают только при рассмотрении элементарных процессов с участием фононов. В частности, интенсивность генерации возбуждений движущейся тяжелой частицей можно вычислить, как мы уже обсуждали в первой части лекции, не только из квантомеханической вероятности излучения фононов, но и, по аналогии с черенковским излучением, как излучение классического поля - колебаний волновой функции конденсата. Подчеркнем, что при рассмотрении нестационарных состояний бозе-газа, фактически, используется обобщенное понимание бозе-конденсата. Теперь это не совокупность частиц с нулевым импульсом или в основном состоянии осциллятора, а когерентное состояние из макроскопического числа частиц, образующих единое целое, и описание индивидуального движения каждой частицы теряет смысл.

Подставим в уравнение (164) волновую функцию конденсата в форме $\Psi = \sqrt{n}e^{i\varphi}$, и получим выражение, мнимая часть которого дает уравнение непрерывности конденсата

$$\frac{\partial}{\partial t} n = -\nabla \vec{j} \quad (173)$$

где

$$\vec{j} = n\vec{v}, \quad \vec{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi$$

Действительная часть дает

$$-\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}} \nabla^2 \sqrt{n} + \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \varphi)^2 + U_0 n + V(r) - \mu$$

Отсюда с помощью операции ∇ находим точное уравнение движения сверхтекучей жидкости

$$m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \nabla \left[\frac{mv^2}{2} + U_0 n + V(r) - \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}} \nabla^2 \sqrt{n} \right] = 0 \quad (174)$$

Для описания волн, длина которых много больше корреляционной длины $\lambda = \hbar/\sqrt{m\mu}$,

последним членом можно пренебречь, и описывать волны уравнением

$$m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \nabla \left[\frac{mv^2}{2} + U_0 n + V(r) \right] = 0 \quad (175)$$

Это уравнение не содержит явно постоянной Планка, и имеет вид феноменологического уравнения для скорости сверхтекучей компоненты ((139.6) ГИДРОДИНАМИКА). При этом роль локального химического потенциала $\tilde{\mu}$ играет выражение

$$\tilde{\mu}(r, t) = U_0 n(r, t). \quad (176)$$

Применим уравнения (173), (175), чтобы определить спектр длинноволновых колебаний конденсата в цилиндрической ловушке ($L \gg R$). Для этого линеаризуем уравнения (173), (175) с учетом (169):

$$\frac{\partial}{\partial t} n_1 = -\nabla(n_0 \vec{v}), \quad m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + U_0 \nabla n_1 = 0, \quad n_0 = n \left(1 - \frac{\rho^2}{R^2}\right) \quad (177)$$

Исключая скорость, получаем, следуя Зарембе (1998)

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} n_1 = \nabla(c^2(\rho) \nabla n_1), \quad c^2(\rho) = \frac{\mu}{m} \left(1 - \frac{\rho^2}{R^2}\right)$$

Для волны, не зависящей от азимутального угла ($n_1 \sim y(\rho) \exp(ikz - i\omega t)$) имеем

$$-\omega^2 y = \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left[c^2(\rho) \rho \frac{dy}{d\rho} \right] - k^2 c^2(\rho) y \quad (178)$$

В длинноволновом пределе нижняя ветвь возбуждений эквивалентна продольному сдвигу газа как целого. Энергия такого возбуждения, очевидно, стремится при $k \rightarrow 0$ к нулю. Это означает, что нижняя продольная ветвь возбуждений является безщелевой. При малом продольном волновом векторе она имеет характер звукового спектра со скоростью звука

$$c = \frac{1}{2} \omega_0 R = \sqrt{\frac{\mu}{2m}} \quad (179)$$

Эта скорость в $\sqrt{2}$ раз меньше гидродинамической скорости звука.

Остальные ветви описывают моды с колебаниями поперечного радиуса газового облака. Характерное расстояние между этими модами задается спектром двумерного осциллятора.

Анализ Зарембы привел к набору мод

$$\omega^2 = \omega_0^2 \left[2q(q+1) + \frac{1}{4} (kR)^2 + (k^4) \right], \quad q = 0, 1, 2, \dots \quad (180)$$

9.3.10 ВЗ. Осцилляции основного состояния

Новые возможности демонстрации свойств сверхтекучего газа возникают, когда частота параболического потенциала $\omega(t)$ магнитной ловушки зависит от времени. Это приводит к осцилляциям конденсата как целого, которые, как показано ниже, описываются преобразованиями подобия. При этом локальная скорость газа $\vec{v}(\vec{r}, t)$ в некоторых точках и некоторые моменты времени может стать большей локальной скорости звука $c(\vec{r}, t)$. При наличии внешнего неподвижного возмущения, такого как лазерный луч, это может привести к диссипации и затуханию осцилляций.

Рассмотрим бозе-газ в цилиндрической ловушке с переменной частотой параболического поперечного потенциала.

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(t)r^2 - \mu\right]\Psi + U_0\Psi^+\Psi\Psi, \quad (181)$$

$$(\hbar = 1, \vec{r} = (r, \varphi, z).)$$

Следуя работе Кагана и др. (1996) проведем преобразование подобия, выявляющее внутреннюю симметрию газа:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{b}\chi(\rho, \tau, \varphi, z) \exp[i\Phi], \quad \rho = r/b, \quad (182)$$

Подставим это выражение в (??) и выберем параметры этого преобразования b, Φ таким образом, чтобы уравнение для оператора поля χ в сопутствующей системе координат $\{\rho, \tau\}$ приобрело вид:

$$i\frac{\partial\chi}{\partial\tau} = \left[-\frac{1}{2m}\nabla_\rho^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2\rho^2 - \mu\right]\chi + U\chi^+\chi\chi - \frac{1}{2m}b^2\frac{\partial^2\chi}{\partial z^2}, \quad (183)$$

Для этого необходимо положить

$$\Phi = r^2\frac{1}{2b}\frac{db}{dt}, \quad b^2\frac{d\tau}{dt} = 1, \quad \frac{d^2b}{dt^2} + \omega^2(t)b = \omega_0^2b^{-3}. \quad (184)$$

Вид $\Phi(r, t)$ сокращает члены, содержащие $\nabla_\rho\chi$, параметр растяжения $b(t)$ и ход собственного времени $\tau(t)$ связаны с лабораторным временем так, что потенциальная энергия и энергия взаимодействия атомов не зависят от времени. Благодаря каноническому преобразованию (182), (184), все члены уравнения (183), кроме последнего, от времени не зависят. Отсюда следует важный вывод: состояние газа, однородное относительно продольной оси в переменных $\{\rho, \tau\}$ стационарно, а в лабораторной системе координат осциллирует неограниченно долго. Только учет состояний, неоднородных вдоль оси z , может дать описание затухания когерентных колебаний. Подчеркнем, что скэйлинговое преобразование (182) играет гораздо ббольшую роль, чем способ получения осциллирующего состояния конденсата, в которое система переходит из начального основного состояния. Оно позволяет описывать эволюцию произвольного состояния газа в ловушке с переменной частотой с помощью уравнения (105) с постоянной частотой. Замечательно, что это относится не только к когерентной квазиклассической части волновой функции газа, но и к ее операторной части, которая описывает элементарные

возбуждения газа. Единственное, но существенное ограничение - потенциал ловушки должен обладать цилиндрической симметрией и иметь параболическую зависимость от r .

Будем считать, что в начальный момент времени частота $\omega(t)$ мгновенно уменьшается от ω_0 до ω_1 . Тогда до начала вст ряхивания $b = 1$. При $t > 0$ имеем

$$b^2 = \frac{1}{2} (\beta^2 + 1) (1 - g \cos 2\omega_1 t) = \frac{2}{\beta^{-2} + 1} (1 + g \cos 2\omega_0 \tau)^{-1}, \quad (185)$$

где $\beta = \omega_0/\omega_1 > 1$, $g = (\beta^2 - 1) / (\beta^2 + 1)$. Отсюда

$$b \frac{db}{dt} = \frac{1}{2} \omega_1 (\beta^2 - 1) \sin 2\omega_1 t, \quad b^{-1} \frac{db^{-1}}{d\tau} = -\frac{1}{2} \omega_0 (1 - \beta^{-2}) \sin 2\omega_0 \tau, \quad (186)$$

$$\frac{db^{-1}}{d\tau} = \pm \frac{\omega_0}{b} \sqrt{(b^2 - 1) (1 - b^2 \beta^{-2})}. \quad (187)$$

Пусть при отрицательных временах, предшествующих переходу параметра ловушки $\omega(t)$ от ω_0 к ω_1 , газ имел нулевую температуру, т.е. находился в основном конденсатном состоянии, однородном вдоль оси z . В соответствии с уравнением (183), при положительных временах в переменных $(\rho\tau)$ это состояние сохраняется

$$n(\rho) = \chi_0^2 \cong n(0) \left(1 - \frac{\rho^2}{R_0^2}\right) \theta \left(1 - \frac{\rho^2}{R_0^2}\right), \quad n(0) = \frac{\mu}{U_0} \quad R_0^2 = \frac{2\mu}{m\omega_0^2} \quad (188)$$

причем параметр μ приобретает смысл исходного химического потенциала.

Существенно, что в лабораторной системе координат конденсатная волновая функция χ_0 явно зависит от времени и осциллирует с частотой $2\omega_1$:

$$\chi_0(r, t) = \sqrt{n(0) \left(1 - \frac{r^2}{R^2(t)}\right)}, \quad R(t) = b(t)R_0 \quad (189)$$

Следовательно, при положительных временах газ находится в сильно возбужденном состоянии, энергия которого в β раз больше энергии основного состояния в ловушке с частотой потенциала ω_1 .

Заметим, что в случае $\beta - 1 \ll 1$ осцилляции конденсата можно интерпретировать как крупномасштабную звуковую волну (с частотой $2\omega_1$) на фоне неподвижного конденсата.

9.3.11 В4. Излучение боголюбовских возбуждений в осциллирующем газе, обусловленное статическим дефектом

Описанные выше осцилляции конденсата в магнитной ловушке не затухают, что является одним из доказательств сверхтекучести системы. Нетривиальной проблемой становится нахождение механизма релаксации конденсата при нулевой температуре, когда нет тепловых возбуждений, которые могли бы стать источником диссипации.

В настоящем разделе в качестве механизма релаксации осциллирующего конденсата рассмотрим спонтанное излучение поперечных фононов, возникающее

при взаимодействии газа с продольным лазерным лучом, который в поперечном сечении выглядит как точечный статический дефект (Каган, Максимов, 2000).

Удобнее задачу рассматривать в системе координат K_* , в которой газ покоится, а дефект ($\vec{\rho}_d(\tau) = \vec{r}_d/b(\tau)$) движется со скоростью (см. (187))

$$\vec{V} = \frac{d\vec{\rho}_d}{d\tau} = \frac{db^{-1}}{d\tau} \vec{r}_d = \pm \vec{r}_d \frac{\omega_0}{b} \sqrt{(b^2 - 1)(1 - b^2\beta^{-2})} \quad (190)$$

Эта скорость может оказаться бóльшей локальной скорости звука около дефекта

$$c(\vec{\rho}_d) = c_0 \left(1 - \frac{\rho^2}{R_0^2}\right)^{1/2}, \quad c_0 = \sqrt{\frac{\mu}{m}}, \quad (191)$$

и, согласно критерию Ландау, газ становится неустойчивым относительно спонтанного излучения фононов. Обратим внимание, что у края ловушки скорость звука c стремится к нулю.

Для решения поставленной задачи можно выбрать один из двух подходов: либо вычислить с помощью золотого правила Ферми интенсивность испускания фононов, либо оценить энергетические потери частицы из-за трения в поляризованном дефектом квазиклассическом поле конденсата., аналогичные потерям релятивистской заряженной частицы при черенковском излучении классического электромагнитного поля в конденсированной среде. Оба подхода должны привести к одинаковым результатам.

В первую очередь разовьем квантовомеханический подход. Задача имеет чисто двумерный характер и описывается операторной формой уравнения (183), в которой отброшен последний член, поскольку рассматриваются состояния, однородные относительно продольной оси.

Линеаризуем это уравнение относительно возмущения $\hat{\chi}' = \hat{\chi} - \chi_0$

$$i \frac{\partial \hat{\chi}'}{\partial \tau} = \left[\frac{1}{2} (m\omega_0^2 \rho^2) \hat{\chi}' - \frac{1}{2m} \nabla_\rho^2 \hat{\chi}' - \mu \hat{\chi}' + 2U_0 \chi_0^2 \hat{\chi}' + U_0 \hat{\chi}'^+ \chi_0^2 \right]. \quad (192)$$

С учетом (188) уравнение можно переписать в форме

$$i \frac{\partial \hat{\chi}'}{\partial \tau} = -\frac{1}{2m} \nabla_\rho^2 \hat{\chi}' + g[\hat{\chi}' + \hat{\chi}'^+], \quad (193)$$

где введено специальное обозначения для локальной энергии взаимодействия возмущений с конденсатом

$$g(\rho) = U_0 \chi_0^2 = \mu (1 - \rho^2 R_0^{-2}). \quad (194)$$

Как мы увидим ниже, основной вклад в интенсивность излучения вносят возмущения, которые имеют малую длину волны по сравнению с размером области конденсации бозе-газа:

$$\bar{k} \approx mc_0, \quad \bar{k} R_0 \approx \mu/\omega_0 \gg 1. \quad (195)$$

Это оправдывает применимость локального приближения, в котором координатная зависимость энергии (??) учитывается только параметрически. Тогда элемен

тарные возбуждения описываются обычной теорией однородного слабонеидеального газа.

Оператор поперечных возбуждений $\hat{\chi}'(\vec{\rho}, \tau)$ раскладывается на элементарные операторы поглощения b_k и рождения b_{-k}^+ фононов

$$\hat{\chi}'(\rho, \tau) = \sum_k \chi_k \hat{a}_k(\tau), \quad \chi_k(\vec{\rho}) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi R_0^2 L}} e^{i\vec{k}\vec{\rho}}, \quad (196)$$

$$\hat{a}_k = u_k \hat{b}_k e^{-i\varepsilon_k \tau} - v_k \hat{b}_{-k}^+ e^{i\varepsilon_k \tau}. \quad (197)$$

Энергия возбуждений и коэффициенты канонического преобразования равны

$$\varepsilon_k = \sqrt{\eta_k^2 - g^2} = \sqrt{c^2 k^2 + \frac{k^4}{4m^2}}, \quad \eta_k = \frac{k^2}{2m} + g, \quad c^2 = \frac{g}{m} = c_0^2 (1 - \rho^2 R_0^{-2}) \quad (198)$$

$$u = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\eta}{\varepsilon} + 1 \right)}, \quad v = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\eta}{\varepsilon} - 1 \right)}, \quad (u - v)^2 = \frac{k^2}{2m\varepsilon}. \quad (199)$$

Теперь дополним исходное уравнение (193) потенциалом взаимодействия газа с дефектом $B_d(\vec{r} - \vec{r}_d, t)$, радиус действия которого мал по сравнению с радиусом ловушки $d \ll R_0$.

Будем предполагать изменение функции конденсата χ_0 в поле дефекта малым. Это позволяет рассматривать процесс генерации фононов в борновском приближении. На последнем этапе борновскую амплитуду следует заменить на эффективную амплитуду генерации, которая должна учитывать все соответствующие графики техники Беляева.

Уравнение (193) принимает вид

$$i \frac{\partial \hat{\chi}'}{\partial \tau} = -\frac{1}{2m} \nabla_\rho^2 \hat{\chi}' + g(\vec{\rho}) (\hat{\chi}' + \hat{\chi}'^+) + b^2 B_d(b\vec{\rho} - \vec{r}_d) \chi_0(\vec{\rho}). \quad (200)$$

Множитель b^2 возникает из-за перехода к новому времени согласно (184).

Уравнению (200) соответствует гамильтониан

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_d, \\ H_0 &= L \int d^2 \rho \left[\frac{1}{2m} \nabla_\rho \hat{\chi}'^+ \nabla_\rho \hat{\chi}' + \frac{1}{2} g (\hat{\chi}' \hat{\chi}' + \hat{\chi}'^+ \hat{\chi}'^+) \right] = \sum_k \varepsilon_k \hat{b}_k^+ \hat{b}_k, \\ H_d &= L \int d^2 \rho [\chi_0(\vec{\rho}) \theta(\tau) b^2 B_d(b\vec{\rho} - \vec{r}_d) \hat{\chi}'(\vec{\rho}) + h.c.]. \end{aligned} \quad (201)$$

Имея ввиду локальный характер потенциала, вынесем $\chi_0(\vec{\rho})$ из-под знака интеграла и используем разложение

$$(196) \quad H_d = \sqrt{\frac{L}{\pi R_0^2}} \chi_0(\vec{r}_d/b) \sum_k [B_{k/b} (\hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^+) e^{i\vec{k}\vec{r}_d/b} + h.c.]. \quad (202)$$

Здесь использовано соотношение

$$\int d^2 \rho b^2 B_d(b\vec{\rho} - \vec{r}_d) \chi_k(\vec{\rho}) = \frac{1}{\sqrt{\pi R_0^2 L}} \int d^2 r B_d(\vec{r} - \vec{r}_d) e^{i\vec{k}\vec{\rho}} = \frac{1}{\sqrt{\pi R_0^2 L}} B_{k/b} e^{i\vec{k}\vec{r}_d/b}$$

Затем проведем каноническое преобразование 197

$$H_d = 2\sqrt{\frac{L}{\pi R_0^2}} \chi_0(\vec{r}_d/b) \sum_k B_{k/b}(u_k - v_k) \left(\hat{b}_{\vec{k}}^- e^{-i\varepsilon_k \tau} + \hat{b}_{-\vec{k}}^+ e^{i\varepsilon_k \tau} \right) e^{i\vec{k}\vec{r}_d/b}. \quad (203)$$

Из-за неоднородности параметра (194), который определяет свойства элементарных возбуждений (198), (199), и осциллирующего характера параметра b (см.(185)) в общем виде получить выражение для генерации фонона не удастся. Для вычисления генерации фонона с частотой порядка μ имеет смысл зафиксировать некоторый момент τ_0 и рассмотреть эту генерацию в течение промежутка времени

$$1/\mu \ll \delta\tau \ll 1/\omega_0. \quad (204)$$

В течение этого времени дефект движется в системе K_* приблизительно равномерно со скоростью (см. (190)):

С учетом этого обстоятельства получаем

$$e^{i\vec{k}\vec{r}_d/b(\tau)} \simeq e^{i\vec{k}\vec{r}_d/b(\tau_0)} e^{i\vec{k}\vec{V}\tau'}, \quad \tau' = \tau - \tau_0. \quad (205)$$

В результате зависимость фазы от времени в гамильтониане возмущений (203) принимает стандартный вид, и можно применить золотое правило Ферми, согласно которому вероятность в единицу времени рождения одного фонона с импульсом \vec{k} равна

$$W_k = 2\pi \left| \langle \vec{k} | H_k | 0 \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_k - \vec{k}\vec{V}), \quad (206)$$

$$H_k = 2\sqrt{\frac{L}{\pi R_0^2}} B_{k/b} \chi_0(\vec{r}_d/b(\tau_0)) (u_k - v_k) \hat{b}_{\vec{k}}^+ + h.c. \quad (207)$$

Здесь под знаком дельта-функции выражен закон сохранения энергии - изменение энергии $\vec{k}\vec{V}$ дефекта в результате излучения фонона равно энергии фонона ε_k .

Далее оценим интенсивность излучения энергии:

$$\dot{E}_\tau = \sum_k W_k \varepsilon_k = \int \frac{(\pi R_0^2) d^2k}{(2\pi)^2} 2\pi \left| 2\sqrt{\frac{L}{\pi R_0^2}} B_{k/b} \chi_0(\vec{r}_d/b(\tau_0)) (u_k - v_k) \right|^2 \delta(\varepsilon_k - \vec{k}\vec{V}) \varepsilon_k$$

С учетом (199) получаем:

$$\begin{aligned} \dot{E}_\tau &= \frac{L\chi_0^2}{\pi m} J \\ J &= \int d^2k |B_{k/b}|^2 k^2 \delta(\varepsilon_k - \vec{k}\vec{V}) \end{aligned} \quad (208)$$

В первую очередь возьмем интеграл по направлениям излучения

$$\int d\varphi \delta(kV \cos \varphi - \varepsilon_k) = \frac{2\theta(1 - c_k/V)}{kV \sqrt{1 - (c_k/V)^2}},$$

где

$$c_k = \varepsilon_k/k = \sqrt{c^2 + \frac{k^2}{4m^2}} \quad (209)$$

Тогда

$$J = \int |B_{k/b}|^2 k^3 dk \frac{2\theta(1 - c_k/V)}{kV\sqrt{1 - (c_k/V)^2}} \quad (210)$$

Как и должно быть, ответ отличен от нуля, только при тех значениях k , при которых скорость дефекта.(??) больше фазовой скорости фонона c_k . Наименьшая фазовая скорость - у звуковых фононов. Дефект генерирует такие фононы, когда больше нуля разность

$$V^2 - c^2 = c_0^2 \Delta^2, \quad (211)$$

$$\Delta^2 = b^{-2}[2z^2(b^2 - 1)(1 - b^2\beta^{-2}) - b^2 + z^2]\theta(b^2 - z^2) \quad (212)$$

Здесь учтено, что $R_0 = \sqrt{2}c_0/\omega_0$ и введено обозначение $z = r_d/R_0$. Это условие можно переписать в форме неравенства

$$\frac{b^2}{2(b^2 - 1)(1 - b^2\beta^{-2}) + 1} < z^2 < b^2 \quad (213)$$

Левая часть неравенства в точке $b = 1$ равна 1, в точке $b = \beta$ имеет максимальное значение β^2 , а в точке $b_\beta = 2^{-1/4}\beta^{1/2}$ принимает минимальное значение $z_\beta^2 = 0.5\beta^2(\beta^2 - \sqrt{2}\beta + 1)^{-1} < 1$.

Из этого следует, что генерации нет, когда дефект находится достаточно близко от оси ловушки, где мала скорость дефекта. Наоборот, если дефект попадает в область внешней границы газа, где скорость звука мала, а скорость дефекта максимальна, неизбежно возникает "черенковское излучение" фононов.

Пусть в начальный момент времени дефект находился вне ловушки, но находится внутри газа в момент его наибольшего расширения, когда $b = \beta$ и в системе K_* дефект приближается на наименьшее расстояние от центра. Тогда $1 < z < \beta$, и согласно (213) газ часть времени во время каждого полупериода излучает. См. ниже (220), (221).

Если дефект с самого начала находился внутри ловушки, то бóльшую часть времени генерация невозможна, и только в моменты времени, когда расширение близко к b_β , возникает излучение, если $z_\beta < z < 1$.

Возьмем интеграл по величине волнового вектора.

Наибольший вклад в интенсивность излучения (210) дают фононы с максимально возможными волновыми векторами, которые ограничены сверху значением (см.209))

$$\bar{k} = 2m\sqrt{(V^2 - c^2)} = 2mc_0\Delta \quad (214)$$

Заметим, что характерная энергия генерируемых фононов имеет порядок величины

$$\varepsilon = \sqrt{c^2\bar{k}^2 + \frac{\bar{k}^4}{4m^2}} \simeq \mu\sqrt{\Delta^2 + \Delta^4} \quad (215)$$

(см. (198)). Это оправдывает принятое выше локальное приближение для описания поперечных возбуждений, если $\Delta \gtrsim 1$. Кроме того, это позволяет приближенно вынести из под знака интеграла фактор $|B_k|^2$ и получить

$$J = 2 |B_{k/b}|^2 \int_0^{\bar{k}} dk \frac{k^2}{\sqrt{V^2 - c_k^2}} \quad (216)$$

Элементарное вычисление дает

$$J = \frac{2 |B_{k/b}|^2}{c_0 \Delta} \int_0^{\bar{k}} k^2 dk \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{k^2}{\bar{k}^2}}} \quad (217)$$

$$= \frac{2 |B_{k/b}|^2 \bar{k}^3}{c_0 \Delta} \int_0^1 \frac{x^2 dx}{\sqrt{1 - x^2}} = \frac{\pi \bar{k}^3 |B_{k/b}|^2}{2c_0 \Delta} \quad (218)$$

$$= 4\pi m_0^3 |B_{k/b}|^2 \Delta^2 \quad (219)$$

Подставляя это значение в (208) и используя зависимости (109) и (198), находим:

$$\dot{E}_\tau = 4Ln_0\mu m |B_{\bar{k}/b}|^2 (1 - z^2/b^2) \Delta^2 \theta(\Delta^2) \quad (220)$$

Оценим интенсивность δE излучения за один период осцилляций газа в случае $1 < z \ll \beta$.

В отличие от (220), величина δE инвариантна относительно перехода от сопутствующей системы координат к лабораторной. Начинается излучение в момент τ_1 касания поверхности газа дефектом, когда $b(\tau_1) = z$, а кончается в момент τ_2 , когда $b(\tau_2) \simeq \beta$.

$$\delta E = 2 \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \dot{E}_\tau \simeq 2 \int_z^\beta \frac{db}{\left| \frac{db}{d\tau} \right|} 4Ln_0\mu m |B_{\bar{k}/b}|^2 (1 - z^2/b^2) \Delta^2 \quad (221)$$

Подробно

$$\delta E = 2 \int_z^\beta \frac{db}{\omega_0 b \sqrt{(b^2 - 1)(1 - b^2 \beta^{-2})}} 4Ln_0\mu m |B_{\bar{k}/b}|^2 \quad (222)$$

$$(1 - z^2/b^2) b^{-2} [2z^2 (b^2 - 1)(1 - b^2 \beta^{-2}) - b^2 + z^2] \quad (223)$$

Определяющий вклад в интеграл дает начальный этап излучения, когда скорость V максимальна и, соответственно, имеет максимальное значение величина $\Delta \simeq z$. Отсюда получаем оценку интенсивности излучения за период

$$\delta E \simeq Ln_0\mu m |B_{\bar{k}/b}|^2 \frac{z}{\omega_0} \quad (224)$$

Интересно, что на пике генерации характерная энергия фононов имеет порядок величины (215)

$$\varepsilon \simeq \mu \sqrt{z^2 + z^4}$$

(Это объясняет, почему $\delta E \simeq \mu z^2 I$, где I - число фононов)

В случае, когда источником радиации является продольная трубка (луч лазера) малого сечения $d \ll R_0$, эффективная вершина 2D-возмущения равна

$$B_k = \frac{B_k^{(0)}}{1 + \left(m B_k^{(0)} / \pi\right) \ln(1/kd)} \simeq \frac{\pi}{m \ln(1/kd)}, \quad (225)$$

где $B_k^{(0)}$ - компонента Фурье голого потенциала. Приведем оценку отношения интенсивности излучения к энергии осцилляций газа E_{osc} :

$$E_{osc} = E' - E_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{\beta - 1}{\beta} \right)^2 E_0 \quad (226)$$

$$\frac{\delta E}{E_{osc}} = \frac{n_0 m |B_{\bar{k}/b}|^2 z a \omega_0}{\mu^2} \simeq \frac{z \omega_0}{\mu \ln^2(b/\bar{k}d)}$$

Поскольку $\omega_0 \ll \mu$, то это отношение мало, и осцилляции затухнут только после большого числа периодов

9.3.12 В5. Черенковское излучение

Рассмотрим тот же процесс как "черенковское излучение" возбуждений классического бозе-поля. Заменяем операторную функцию в линеаризованном уравнении (200) на амплитуду классического поля

$$i \frac{\partial \chi'}{\partial \tau} = -\frac{1}{2m} \nabla_\rho^2 \chi' + g(\chi' + \chi'^*) + b^2 B_d(b\vec{\rho} - \vec{r}_d) \chi_0(r_d/b). \quad (227)$$

Для простоты, взаимодействие с 2D-дефектом будем описывать локальным потенциалом:

$$B_d(b\vec{\rho} - \vec{r}_d) = B_0 \delta(b\vec{\rho} - \vec{r}_d) = B_0 \frac{1}{b^2} \delta(\vec{\rho} - \vec{r}_d/b) \simeq B_0 \frac{1}{b^2} \delta(\vec{\rho} - \vec{r}_d/b(\tau_0) - \vec{V}\tau') \quad (228)$$

(Опять рассматриваем излучение в окрестности некоторого момента τ_0). Для амплитуды с импульсом k имеем

$$i \frac{\partial a_k}{\partial \tau} = \eta_k a_k + g(\vec{\rho}) a_{-k}^* + A_k e^{-i\omega\tau' + s\tau'}, \quad A_k = \sqrt{\frac{L}{\pi R_0^2}} B_0 \chi_0(r_d/b) e^{-i\vec{k}\vec{r}_d/b(\tau_0)}, \quad \omega = \vec{k}\vec{V} \quad (229)$$

Здесь формально введено адиабатическое включение взаимодействия, чтобы автоматически получить правило обхода при вычислении излучения энергии в единицу времени. Ищем решение в виде

$$a_k = \tilde{a}_k e^{-i\omega\tau' + s\tau'}, \quad \tilde{a}_{-k}^* = \tilde{a}_{-k}^* e^{-i\omega\tau' + s\tau'}$$

$$\begin{aligned} (\omega + is - \eta) \tilde{a}_k &= g \tilde{a}_{-k}^* + A_k \\ (-\omega - is - \eta) \tilde{a}_{-k}^* &= g \tilde{a}_k + A_k \end{aligned}$$

Отсюда

$$a_k = \frac{SA_k}{(\omega + is)^2 - \varepsilon^2} e^{-i\omega\tau' + s\tau'}, \quad S = \omega + \frac{k^2}{2m}. \quad (230)$$

Квазиклассический аналог гамильтониана взаимодействия (201) равен

$$H_d = 2 \operatorname{Re} LB_0 [\chi_0(\vec{\rho}) \chi'(\vec{\rho})]_{\vec{\rho}=(\vec{r}_d/b)}. \quad (231)$$

Это выражение можно рассматривать как потенциал, действующий на дефект со стороны возмущенного дефектом конденсата. Этот потенциал создает силу трения

$$\vec{F} = - \left[\frac{\partial_d}{\partial \vec{\rho}} \right]_{\vec{\rho}=(\vec{r}_d/b)} \quad (232)$$

которая приводит к потерям энергии

$$\dot{E}_\tau = -\vec{V}\vec{F} = 2LB_0\chi_0(\vec{\rho}) \operatorname{Re} \left[\vec{V} \frac{\partial \chi'(\vec{\rho})}{\partial \vec{\rho}} \right]_{\vec{\rho}=(\vec{r}_d/b)}$$

(Производной от $\chi_0(\vec{\rho})$ можно пренебречь). Подставим в эту формулу, только что найденное выражение (230):

$$\dot{E}_\tau = 2LB_0\chi_0(\vec{\rho}) \operatorname{Re} \sum_k \frac{i\vec{k}\vec{V}}{\sqrt{\pi R_0^2 L}} \left[e^{i\vec{k}\vec{\rho}} \right]_{\vec{\rho}=(\vec{r}_d/b)} \frac{SA_k}{(\omega + is)^2 - \varepsilon^2} e^{-i\omega\tau' + s\tau'}$$

С учетом (205), (229) все фазы сокращаются, и возникает формула, аналогичная той, которая описывает электромагнитное излучение быстрой частицы в среде

$$\dot{E}_\tau = 2 |A_k|^2 \operatorname{Re} \sum_k \frac{i\omega S}{(\omega + is)^2 - \varepsilon^2}$$

Как и должно быть, интеграл в смысле главного значения вклада в потери не дает. Потери связаны с черенковскими полюсами

$$\omega = kV \cos \varphi = \varepsilon$$

Таким образом

$$\begin{aligned} \dot{E}_\tau &= \pi |A_k|^2 \frac{\pi R_0^2}{(2\pi)^2} \int_0^\infty k dk \int_0^{2\pi} d\varphi [\delta(kV \cos \varphi - \varepsilon) + \delta(kV \cos \varphi + \varepsilon)] \left(kV \cos \varphi + \frac{k^2}{2m} \right) \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{L}{m} (B_0\chi_0(r_d/b))^2 \int_0^{\bar{k}} k^2 dk \frac{1}{\sqrt{V^2 - c_k^2}} \end{aligned}$$

Это выражение с точностью до численного множителя совпадает с квантовомеханической формулой (216).

9.3.13 В6. Параметрический резонанс

Оказывается, у газа в сигарообразной ловушке при нулевой температуре существует механизм распада осциллирующего конденсата даже в отсутствии внешних дефектов. Чтобы показать это, линеаризуем квазиклассическое уравнение (183)

$$i \frac{\partial \chi}{\partial \tau} = \left[-\frac{1}{2m} \nabla_{\rho}^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \rho^2 - \mu \right] \chi + U \chi^+ \chi - \frac{1}{2m} b^2 \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2}, \quad (233)$$

относительно слабого отклонения функции $\chi = \chi_0 + \chi'$ от конденсатного состояния χ_0 :

$$i \frac{\partial \chi'}{\partial \tau} = \left[-\frac{1}{2m} \nabla_{\rho}^2 + G(\rho) \right] \chi' + G(\rho) \chi'^* - \frac{1}{2m} b^2 \frac{\partial^2 \chi'}{\partial z^2}, \quad G(\rho) = U_0 \chi_0^2(\rho) \quad (234)$$

Для поперечных мод в этом уравнении нет последнего члена с зависящим от времени коэффициентом, и его решения дают дискретный спектр с расстоянием между уровнями порядка ω_0 (см. (180)). При $T \ll \omega_0$ самовозбуждение поперечных волн невозможно.

Продольная мода с волновым вектором k_z удовлетворяет уравнению

$$i \frac{\partial \chi'_{k_z}}{\partial \tau} = \bar{G} (\chi'_{k_z} - \chi'^*_{-k_z}) + \frac{1}{2m} b^2 k_z^2 \chi'_{k_z}, \quad (235)$$

в котором мы пренебрегаем зависимостью решения от радиуса ρ и заменяем эффективное поле $G(\rho)$ на среднее \bar{G} . Роль осцилляций конденсата в системе координат (ρ, τ) сводится к колебаниям эффективной продольной массы ($m^* = m b^{-2}(\tau)$).

Искомый механизм распада конденсата является параметрический резонанс, обусловленный колебаниями эффективной продольной массы. Этот резонанс приводит к генерации безщелевых продольных возбуждений.

Разложим продольное поле на действительную и мнимую части:

$$\chi'_{k_z} = f + iF, \quad (236)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} = \frac{1}{2m} b^2 k_z^2 F, \quad -\frac{\partial F}{\partial \tau} = \left(\frac{1}{2m} b^2 k_z^2 + 2\bar{G} \right) f \quad (237)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{2m}{b^2 k_z^2} \frac{\partial f}{\partial \tau} \right) = \left(\frac{1}{2m} b^2 k_z^2 + 2\bar{G} \right) f \quad (238)$$

Для малых волновых векторов имеем

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{1}{b^2} \frac{\partial f}{\partial \tau} \right) = \Omega^2 f, \quad \Omega = c k_z, \quad c = \sqrt{\frac{\bar{G}}{m}} \quad (239)$$

Это уравнение удобно анализировать в смешанной системе координат $\{\rho, t\}$. Поскольку

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \tau} \right)_{\rho} = b^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\rho}$$

то

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + \Omega^2(t) f = 0, \quad \Omega(t) = c(t) k, \quad c(t) = \frac{\bar{c}}{b(t)} \quad (240)$$

Это есть классическая форма уравнения параметрического резонанса (см. напр. МЕХАНИКА)

Ограничимся случаем малого изменения радиуса ловушки. Из формулы (185) получаем

$$b^{-2} = 1 + g \cos 2\omega_1 t, \quad g \approx \beta - 1 \ll 1 \quad (241)$$

В этом приближении уравнение (240) имеет вид уравнения Матъе:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + \omega^2 (1 + g \cos 2\omega_1 t) f = 0 \quad (242)$$

Ищем решение этого уравнения в форме

$$f = a \cos \omega_1 t + b \sin \omega_1 t, \quad a \sim b \sim e^{st} \quad (243)$$

Подставляя эту формулу в уравнение Матъе, находим показатель роста амплитуды:

$$s = \left[\left(\frac{1}{4} g \omega_0 \right)^2 - (\omega - \omega_0)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (244)$$

Таким образом, параметрический резонанс реализуется в полосе ширины

$$\delta\omega = t_1^{-1} = \frac{1}{2} g \omega_1, \quad (245)$$

причем в центре резонанса

$$\omega = ck_z = \omega_1$$

инкремент роста равен

$$s = \frac{1}{4} g \omega_1 \quad (246)$$

Заметим, что волновой вектор принимает близкие, но дискретные значения $k_z = (2\pi/L) * number$. Поэтому, для того чтобы хотя бы одно значение энергии фонона ck_z попало внутрь резонансной полосы, расстояние между уровнями $\delta(ck_z) = (2\pi c/L)$ должно быть меньше ширины полосы (246). Для этого необходимо выполнение неравенства

$$(4\pi c/g\omega_1) < L \quad (247)$$

Параметрический резонанс развивается с момента $t = 0$ и только в том случае, когда с самого начала имеется ненулевая амплитуда продольной волны. При конечной температуре - это амплитуда тепловых колебаний. При нулевой температуре, строго говоря, необходимо квантовомеханическое рассмотрение начального этапа, вычисляя интенсивность генерации продольных пар возбуждений с импульсами k_z и $-k_z$. Однако, к тому же результату приводит квазиклассическое описание процесса, если в качестве начального условия принять нулевые продольные колебания.

Благодаря параметрическому резонансу амплитуда продольной волны, принадлежащая резонансной полосе (244), растет как $\exp(st)$, а энергия, переходящая от конденсата в продольные возбуждения, равна

$$E(t) \simeq \sum_k \frac{1}{2} \hbar \omega_k (e^{2st} - 1) \theta \left(\frac{1}{2} \delta \omega - |\omega_k - \omega_1| \right). \quad (248)$$

Если неравенство (247) выполняется с большим запасом, то сумму можно заменить на интеграл и получить

$$E(t) = \frac{gL\hbar\omega_1^2}{16\pi\bar{c}} J(t), \quad J(t) = \int_{-1}^1 dx (\exp \left[\frac{t}{t_1} \sqrt{1-x^2} \right] - 1) \quad (249)$$

При быстром уменьшении частоты ловушки от ω_0 до ω_1 конфигурация конденсата не успевает измениться, и энергия конденсата падает от значения $E_0 = \frac{2}{3}\mu N_0$ до

$$E' = \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_1^2}{\omega_0^2} + 1 \right) E_0.$$

Вычитая из этой энергии энергию основного состояния, отвечающего конечной частоте $E_1 = \frac{\omega_1}{\omega_0} E_0$, получаем начальную энергию осцилляций конденсата

$$E_c = E' - E_1 = \frac{1}{2} g^2 E_0 \quad (250)$$

Таким образом, затухание осцилляций конденсата описывается отношением

$$\frac{E(t)}{E_c} = \frac{3a\omega_0}{4\pi g\bar{c}} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\mu} \right)^3 J(t) \simeq \frac{a}{gR_0} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\mu} \right)^3 J(t).$$

При малых временах $J(t) \simeq t/t_1$, ($t_1 = 2/g\omega_0$) это отношение равно

$$\frac{E(t)}{E_c} \simeq \frac{3}{16} \frac{a\omega_0^2}{\bar{c}} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\mu} \right)^3 t. \quad (251)$$

Когда $t \gg t_1$, демпинг растет экспоненциально

$$\frac{E(t)}{E_c} \simeq \frac{3}{2\pi} \frac{a}{gR_0} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\mu} \right)^3 \left(\frac{2\pi t_1}{t} \right)^{1/2} \exp \frac{t}{t_1}. \quad (252)$$

Из этой формулы следует, что время затухания осцилляций конденсата с логарифмической точностью равно

$$t_* = \frac{2}{g\omega_1} \ln \left\{ \frac{gR_0}{a} \left(\frac{\mu}{\hbar\omega_0} \right)^3 \left(\frac{t_*}{2\pi t_1} \right)^{1/2} \right\}. \quad (253)$$

Переход энергии осцилляций конденсата в некогерентные продольные возбуждения приводит к нагреванию газа. Однако энергия (250) в пересчете на одну

частицу, равная $\frac{1}{3}g^2\mu$, много меньше температуры бозе-конденсации T_c , и тепловой эффект мал ($E_c/T_c N_0 \simeq g^2(an^{1/3}) \ll 1$).

Таким образом, совокупность свойств бозе-газа в ловушке доказывает, что при температуре, близкой к нулю, газ частиц эквивалентен классическому нелинейному комплексному полю. Бозе-конденсат по своей природе аналогичен полю лазера, а тепловые надконденсатные частицы напоминают кванты черного излучения. И те, и другие описываются распределением Планка-Бозе-Эйнштейна с нулевым химическим потенциалом.

10 Лекция 10. Коллективные возбуждения в твердых телах

10.1 Модель желе – коллективные возбуждения в металлах

Опишем коллективные возбуждения в металлах в простейшей модели, в которой металл рассматривается как холодная плазма, представляющая из себя квазинейтральную смесь двух противоположно заряженных жидкостей - электронов и ионов. Это - модель "желе". Для этой модели следует вычислить диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(k, \omega)$, полюса которой определяют спектр собственных колебаний плазмы.

Внесем в плазму (или около нее) небольшой внешний (сторонний) заряд с плотностью заряда $\rho_{cm}(r, t)$. Этот заряд создаст внутри плазмы электрическое поле E . Это поле в свою очередь индуцирует возмущение плотности электронов $\delta\rho_e(r, t)$ и $\delta\rho_i(r, t)$ ионов. Величина этого поля задается уравнениями Максвелла:

$$\operatorname{div}E = 4\pi(\rho_{cm} + \delta\rho_e + \delta\rho_i), \quad \operatorname{rot}E = 0. \quad (1)$$

Полезно сопоставить эти микроскопические уравнения с макроскопическими уравнениями Максвелла:

$$\operatorname{div}D = 4\pi\rho_{cm}, \quad \operatorname{rot}D = 0, \quad D = \varepsilon E. \quad (2)$$

Мы будем предполагать движение зарядов нерелятивистским и пренебрегать индуцированным магнитным полем в правой части второго уравнения ($-\frac{1}{c}\frac{\partial B}{\partial t}$). В этом приближении электрическое поле является потенциальным ($E = -\operatorname{grad}\varphi$). Электрический потенциал, согласно (1), (2) удовлетворяет уравнениям

$$-\nabla^2\varphi(r, t) = 4\pi(\rho_{cm}(r, t) + \delta\rho_e(r, t) + \delta\rho_i(r, t)), \quad -\nabla(\varepsilon\nabla\varphi(r, t)) = 4\pi\rho_{cm}(r, t) \quad (3)$$

Разложим все величины в этих уравнениях по плоским волнам:

$$\varphi(r, t) = \int \frac{d^3k d\omega}{(2\pi)^4} \varphi(k, \omega) e^{i(kr - \omega t)}, \quad \varphi(k, \omega) = \int d^3r dt \varphi(r, t) e^{-i(kr - \omega t)}. \quad (4)$$

и получим

$$k^2\varphi(k, \omega) = 4\pi(\rho_{cm}(k, \omega) + \delta\rho_e(k, \omega) + \delta\rho_i(k, \omega)), \quad k^2\varepsilon(k, \omega)\varphi(k, \omega) = 4\pi\rho_{cm}(k, \omega). \quad (5)$$

Если внешнее возмущение задано в виде бегущей волны

$$(\rho_{cm}(r, t) = \rho_{cm}(k, \omega) \exp i(kr - \omega t)) \quad (6)$$

то уравнения (5) описывают "линейный отклик" на это возмущение. Чтобы диэлектрическая проницаемость, которую мы должны вычислить, была (в соответствии с общими законами электродинамики) аналитической функцией комплексной частоты в верхней полуплоскости, следует предполагать, бесконечно медленное ("адиабатическое") включение внешнего возмущения. Следуя Боголюбову, для этого к частоте добавляют бесконечно малую мнимую часть $\delta > 0$, благодаря которой возмущение $\exp(-i(\omega + i\delta)t)$ исчезает при $t \rightarrow -\infty$. Другой способ получения правильного аналитического поведения $\varepsilon(k, \omega)$, - вместо преобразования Фурье по времени использовать в (4) преобразование Лапласа, в котором включение внешнего возмущения происходит в момент времени $t = 0$:

$$\varphi(t) = \int_{-\infty+i\delta}^{\infty+i\delta} \frac{d\omega}{2\pi} \varphi(k, \omega) e^{-i\omega t}, \quad \varphi(\omega) = \int_0^{\infty} dt \varphi(r, t) e^{i\omega t}$$

Ниже эту мнимую добавку мы будем опускать и вспоминать о ней только тогда, когда она становится важной.

Индукцированные полем перераспределение внутренних зарядов принято записывать в форме

$$\delta\rho_e(k, \omega) = \Pi_e(k, \omega)\varphi(k, \omega), \quad \delta\rho_i(k, \omega) = \Pi_i(k, \omega)\varphi(k, \omega). \quad (7)$$

Коэффициенты $\Pi_e(k, \omega)$, $\Pi_i(k, \omega)$ называются поляризационными операторами. Подставляя эти выражения в уравнения (4), получаем

$$\varphi(k, \omega) = \frac{4\pi\rho_{cm}(k, \omega)}{\varepsilon(k, \omega)k^2}. \quad (8)$$

$$\varepsilon(k, \omega) = 1 - \frac{4\pi}{k^2} \Pi_e(k, \omega) + \Pi_i(k, \omega) \quad (9)$$

Таким образом, дисперсия (зависимость от k и ω) диэлектрической проницаемости металла $\varepsilon(k, \omega)$ определяется видом поляризационных операторов.

Коэффициенты $\Pi_e(k, \omega)$, $\Pi_i(k, \omega)$ вычисляются по разному в зависимости от отношения времени релаксации τ_e, τ_i к периоду вынужденных колебаний $1/\omega$. Будем рассматривать случай низких температур

$$T \ll \omega_D \quad (10)$$

где ω_D - дебаевская частота. (Напоминаем, что в теоретической физике часто постоянную Планка явно не выписывают. Это означает, что энергия и импульс делятся на \hbar и измеряются в единицах $\text{сек}^{-1}, \text{см}^{-1}$.)

Обратное время релаксации ионов определяется затуханием фононов. При низких температурах оно определяется процессами переброса (см. соответствующую лекцию) и по порядку величины равно

$$\frac{1}{\tau_i} \approx \omega_D e^{-\omega_D/T} \quad (11)$$

Электроны релаксируют гораздо быстрее.

Отсюда следует, что релаксацией ионов всегда можно пренебречь ($\omega\tau_i \gg 1$), в то время как для электронов следует рассматривать разные случаи.

Амплитуда вынужденных колебаний ионов предполагается достаточно малой. Так что отклонение от равновесия мало, и движение иона можно описывать уравнением Ньютона

$$M \frac{dv_i}{dt} = -e_i \nabla \varphi \quad (12)$$

Используем это уравнение для для вычисления скорости изменения плотности плотности ионного тока $j = e_i v_i n_i$. Здесь n_i - плотность ионов. (для определенности будем считать, что $e_i = -e_e, n_i = n_e$)

$$\frac{\partial j}{\partial t} = -\frac{e_i^2 n_i}{M} \nabla \varphi \quad (13)$$

Возьмем теперь производную по времени от уравнения непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla j = 0, \quad \ddot{\rho} = \frac{e_i^2 n_i}{M} \nabla^2 \varphi \quad (14)$$

Отсюда, произведя преобразование Фурье, находим

$$\delta \rho_i(k, \omega) = \frac{e_i^2 n_i k^2}{M \omega^2} \varphi, \quad \Pi_i = \frac{e_i^2 n_i k^2}{M \omega^2}. \quad (15)$$

Если частота достаточно велика ($\omega\tau_e \gg 1$), то и для электронной подсистемы имеем аналогичный результат:

$$\delta \rho_e(k, \omega) = \frac{e_e^2 n_e k^2}{m \omega^2} \varphi, \quad \Pi_e = \frac{e_e^2 n_e k^2}{m \omega^2}. \quad (16)$$

В этом случае диэлектрическая проницаемость металла (9) имеет тот же вид, что и для разреженной высокотемпературной плазмы:

$$\varepsilon(k, \omega) = 1 - \frac{1}{(\omega + i\delta)^2} (\Omega_e^2 + \Omega_i^2), \quad \Omega_e^2 = \frac{4\pi e_e^2 n_e}{m}, \quad \Omega_i^2 = \frac{4\pi e_i^2 n_i}{M} \quad (17)$$

Здесь к частоте добавлена бесконечно малая положительная добавка к частоте, происхождение которой разъяснялось в начале лекции. Диэлектрическая проницаемость (17) явным образом аналитична в верхней полуплоскости ω .

Из уравнения (8) следует, что сколь угодно малое внешнее возмущение приводит к бесконечно большому отклику, когда

$$\varepsilon(k, \omega) = 0 \quad (18)$$

. Это есть условие резонанса. Резонансные колебания плазмы с частотой

$$\omega = \sqrt{\Omega_e^2 + \Omega_i^2} \cong \Omega_e \quad (19)$$

называются плазменными колебаниями. В рассматриваемом приближении они не зависят от волнового вектора.

При низких частотах $\omega\tau_e \ll 1$ электронную компоненту следует описывать в рамках гидродинамического подхода. В гидродинамике каждый элемент жидкости находится в локальном термодинамическом равновесии и его параметры изменяются вместе с внешними условиями, в данном случае - вместе с полем $\varphi(r, t)$. Это означает, что распределение электронов в точке (r, t) описывается распределением Ферми при наличии внешнего поля:

$$n_e(r, t) = 2 \sum_p \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_p + e_e\varphi - \mu)} + 1} = n_e(\mu - e_e\varphi) = n_e(\mu) - e_e\varphi \frac{\partial n_e(\mu)}{\partial \mu}. \quad (20)$$

Это дает

$$\delta\rho_e(r, t) = e_e\delta n_e = -e_e^2\varphi \frac{\partial n_e(\mu)}{\partial \mu}, \quad \Pi_e = -e_e^2 \frac{\partial n_e(\mu)}{\partial \mu}. \quad (21)$$

Мы рассматриваем электронную компоненту в металле как идеальный ферми-газ, для которого

$$n_e(\mu) = \frac{8\pi}{3} (2m\mu)^{3/2}, \quad \frac{\partial n_e(\mu)}{\partial \mu} = \frac{3n_e(\mu)}{2\mu} \quad (22)$$

Теперь формула (9) принимает вид

$$\varepsilon(k, \omega) = 1 - \frac{\Omega_i^2}{(\omega + i\delta)^2} + \frac{\kappa^2}{k^2} \quad (23)$$

где

$$\kappa^2 = \frac{6\pi e_e^2 n_e}{\varepsilon_F} \quad (24)$$

Заметим, что в горячей плазме, в которой электроны описываются распределением Максвелла-Больцмана, имеет место аналогичная формула, в которой вместо энергии Ферми стоит температура:

$$n_e(\mu) = 2 \sum_p e^{\beta(\mu - \varepsilon_p)}, \quad \kappa^2 = \frac{4\pi e_e^2 n_e}{T}. \quad (25)$$

Диэлектрическая проницаемость (23) обращается в нуль при частоте

$$\omega = \omega_k, \quad \omega_k^2 = \frac{\Omega_i^2 k^2}{k^2 + \kappa^2} \quad (26)$$

Этот спектр существенно зависит от волнового вектора k . В пределе длинных волн собственная частота холодной плазмы ω_k от k зависит линейно:

$$\omega_k = ck, \quad c = \frac{\Omega_i}{\kappa} = \sqrt{\frac{m}{3M}} v_F \quad (27)$$

Таким образом, в модели "желе" металл обладает продольными звуковыми колебаниями, которые пропорциональны скорости электронов на поверхности Ферми $v_F = p_F/m$, причем коэффициент пропорциональности зависит от отношения

массы электрона к массе иона. Поскольку $v_F \simeq 10^8 \text{ cm/s}$, $m/3M \simeq 10^{-4}$, мы получаем разумную оценку скорости звука в металлах - $c \simeq 10^6 \text{ cm/s}$. При $k \gg \kappa$ собственная частота равна плазменной частоте ионов Ω_i , которая в $\sqrt{m/M}$ раз меньше, чем (19). В этой модели нет собственных колебаний с поперечной поляризацией, как и должно быть в любой жидкости.

Интересно посмотреть, как в модели "желе" выглядит поле

$$\varphi(r, t) = \int \frac{d^3 k d\omega}{(2\pi)^4} e^{i(kr - \omega t)} \frac{4\pi \rho_{cm}(k, \omega)}{\varepsilon(k, \omega) k^2}, \quad (28)$$

создаваемое движущимся зарядом. Пусть сторонний заряд движется со скоростью V по направлению оси z :

$$\rho_{cm}(r, t) = e\delta(z - Vt), \quad \rho_{cm}(k, \omega) = 2\pi e\delta(\omega - Vk_z). \quad (29)$$

Интегрирование по частоте дает

$$\varphi(r, t) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\vec{R}} \frac{4\pi e}{\varepsilon(k, \vec{V}\vec{k}) k^2}, \quad \vec{R} = \vec{r} - \vec{V}t. \quad (30)$$

Подставим в интеграл диэлектрическую проницаемость (23):

$$\varphi(r, t) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\vec{R}} \frac{4\pi e}{\left(k^2 + \kappa^2 - \frac{\Omega_i^2}{(\vec{n}\vec{V})^2}\right)}, \quad \vec{n} = \frac{\vec{k}}{k}. \quad (31)$$

Пусть заряд, создающий поле движется достаточно быстро ($V \gg \Omega_i/\kappa = c$), и ионы не успевают подстраиваться к движению заряда. Тогда последним членом в знаменателе можно пренебречь:

$$\varphi(r, t) \cong \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\vec{R}} \frac{4\pi e}{(k^2 + \kappa^2)} = \frac{e}{R} e^{-\kappa R}. \quad (32)$$

Это - экранированное кулоновское поле с радиусом экранирования Дебая $R_D = 1/\kappa$. Оно обычно выводится в модели, в которой экранирование заряда создается электронным газом, движущимся на фоне неподвижной ионной подложки ($\Omega_i = 0$).

В случае медленного движения заряда ($V \ll c$) можно пренебречь экранированием:

$$\varphi(r, t) = \text{Re} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\vec{R}} \frac{4\pi e}{\left(k^2 - \frac{\Omega_i^2}{(\vec{n}\vec{V})^2}\right)}, \quad \vec{n} = \frac{\vec{k}}{k}. \quad (33)$$

Поле $\varphi(r, t)$ действительно, и интеграл по волновым векторам не меняется при комплексном сопряжении. Поэтому удобно ввести знак Re , чтобы при вычислении интеграла не следить за его мнимой частью. Перейдем к сферическим координатам $\vec{n}\vec{V} = V \cos \theta$, $\vec{k}\vec{R} = kR (\sin \theta \cos \varphi + \cos \theta)$ и проинтегрируем по азимутальному углу φ :

$$\varphi(r, t) = Re \int_0^{\infty} \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} \int_{-1}^1 \frac{d \cos \theta}{2} e^{ikR \cos \theta} \frac{4\pi e J_0(kR \cos \theta)}{\left(k^2 - \frac{\Omega_i^2}{(V \cos \theta)^2}\right)}, J_0(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{iz \cos \varphi}.$$

Заменой направлений переменных интегрирования приведем интеграл к виду

$$\varphi(r, t) = \frac{2e}{\pi} Re \int_{-\infty}^{\infty} k^2 dk \int_0^1 d \cos \theta e^{ikR \cos \theta} \frac{J_0(kR \cos \theta)}{\left(k^2 - \frac{\Omega_i^2}{(V \cos \theta)^2}\right)}$$

Проинтегрируем по k , замыкая контур по верхней полуокружности

$$\varphi(r, t) = \frac{2e}{\pi} Re \left[\pi i \int_0^1 d \cos \theta e^{ikR \cos \theta} k J_0(kR \cos \theta) \right], k = \frac{\Omega_i}{V \cos \theta}$$

Подставляя сюда значение волнового вектора в полюсе, получаем

$$\varphi(r, t) = \frac{2e}{\pi} k J_0\left(\frac{R\Omega_i}{V}\right) Re \left[\pi i e^{i\frac{R\Omega_i}{V}} \right] \int_0^1 d \cos \theta \frac{\Omega_i}{V \cos \theta}$$

Последний интеграл расходится, что отвечает нефизическому вкладу очень больших волновых векторов. Как и в теории сверхпроводимости введем обрезание волновых векторов сверху на k_0 .

$$\varphi(r, t) = -2ek \frac{\Omega_i}{V} J_0\left(\frac{R\Omega_i}{V}\right) \sin\left(\frac{R\Omega_i}{V}\right) \ln\left(\frac{\Omega_i}{Vk_0}\right)$$

Энергия взаимодействия движущегося вдоль оси Z заряда e с зарядом той же величины в точке r равно $U = e\varphi(r, t)$. Если заряды находятся близко друг от друга ($z = \frac{R\Omega_i}{V} \ll 1$), то функция Бесселя нулевого порядка близка к единице и потенциальная энергия отрицательна. Для оценки потенциальной энергии на больших расстояниях ($z = \frac{R\Omega_i}{V} \gg 1$) заменим функцию Бесселя на её асимптотику, и у произведения двух осциллирующих функций отбросим быстро осциллирующую часть:

$$J_0(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{\pi}{4}\right), J_0(z) \sin(z) = \sqrt{\frac{1}{2\pi z}} \sin\frac{\pi}{4}$$

Мы видим, что на больших расстояниях энергия тоже отрицательна

$$U(r, t) = -2e^2 k \frac{\Omega_i}{V} \ln\left(\frac{\Omega_i}{Vk_0}\right) \sqrt{\frac{V}{2\pi R\Omega_i}} \sin\frac{\pi}{4}$$

Таким образом, два медленно движущиеся одинаковые заряда в холодной плазме притягиваются друг к другу. Это можно увидеть и в представлении из формул (8), (23). Формально результат (*) можно получить и из плазменной диэлектрической проницаемости (17), но она справедлива только при больших частотах, в то время как главный вклад в притяжение вносят малые частоты.

Рассмотренную задачу хотелось бы использовать для объяснения природы образования куперовских пар в сверхпроводниках. Однако куперовская пара образуется двумя летящими навстречу друг-другу электронами на поверхности Ферми. А в рассмотренной модели притягиваются заряды со скоростями, меньшими скорости звука.

10.2 Экситон Мотта в полупроводниках

Нобелевский лауреат Невилл Мотт был одним из самых замечательных английских физиков двадцатого века. Наиболее известны его исследования в области неупорядоченных сред, но в этой лекции мы обсудим один из первых его результатов в области теории идеальных полупроводников - теорию экситонов большого радиуса.

Напомним, что полупроводник - это вещество, в котором как и металлах, электроны внешних оболочек атомов обобществлены и образуют ферми-жидкость. Но в отличие от металлов, в полупроводниках энергия Ферми расположена посередине между двумя широкими зонами. Все состояния нижней (валентной) зоны заполнены электронами, а в верхней зоне (зоне проводимости) при нулевой температуре нет ни одного электрона. Типичное расстояние между зонами δE имеет порядок величины нескольких электронвольт, и при комнатной температуре ($T \sim 0.0\epsilon V$) только малая доля электронов тепловыми возбуждениями переносится из валентной зоны в зону проводимости, образуя газ электронов. Свободные места в валентной зоне (дырки) ведут себя как частицы с зарядом, противоположным электронному заряду, и образуют газ дырок. Концентрацию этих газов экспериментаторы существенно увеличивают, облучая полупроводник светом, у которого фотоны имеют энергию, превышающую δE .

В полупроводнике оба газа неустойчивы. Во-первых возможна аннигиляция электрона и дырки (т.е. падение электрона из верхней зоны в нижнюю). Но для разреженных газов вероятность этого процесса мала, поскольку мала вероятность электрону и дырке оказаться близко друг от друга. Бюльшую вероятность имеет "химическая реакция" образования связанного состояния частиц противоположных зарядов - электрона и дырки. Это нейтральное связанное состояние двух ферми-частиц аналогично атому водорода и называется экситоном Мотта. Построим количественную теорию экситона.

Гамильтониан системы двух частиц - электрона и дырки только началом отсчета, массами и эффективным зарядом отличается от гамильтониана атома водорода

$$\hat{H} = \delta E + \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_h^2}{2m_h} - \frac{e^2}{\epsilon r} \quad (34)$$

Здесь m_e - эффективная масса электрона в зоне проводимости, m_h - эффективная масса дырки в валентной зоне, ϵ - диэлектрическая проницаемость среды, r - расстояние между электроном и дыркой. В переменных

$$R = \frac{m_e r_e + m_h r_h}{m_e + m_h}, r = r_e - r_h, M = m_e + m_h, m^* = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$$

гамильтониан экситона принимает вид

$$\hat{H} = \delta E + \frac{\hat{P}^2}{2M} + \left(\frac{\hat{p}^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\epsilon r} \right). \quad (35)$$

Из этого гамильтониана находим спектр экситона

$$E_{Pn} = \delta E + \frac{P^2}{2M} - \frac{Ry}{n^2} \frac{m^*}{m\epsilon^2}, \quad Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2}. \quad (36)$$

Основное значение имеет неподвижный экситон в основном состоянии. Его энергия равна

$$E_{Pn} = \delta E - \epsilon_{ex}, \quad \epsilon_{ex} = Ry \frac{m^*}{m\epsilon^2}. \quad (37)$$

По порядку величины δE и ридберг близки друг к другу. Но у типичных полупроводников $m^*/m \simeq 0.1$, а $\epsilon \simeq 10$. В связи с этим последний член в (37) - энергия связи экситона ϵ_{ex} - на два-три порядка меньше ридберга. Наоборот, радиус экситона

$$R = (\hbar^2/m\epsilon^2) m\epsilon/m^* \quad (38)$$

- на два порядка больше радиуса атома водорода. Поэтому экситон Мотта имеет большой размер по сравнению с периодом кристаллической решетки. Это оправдывает модель (34), в которой кристалл заменен на однородную среду.

В принципе, у избранных полупроводников ширина запрещенной зоны может оказаться меньше энергии экситона. Тогда энергия образования экситона (37) отрицательна, и система становится неустойчивой относительно спонтанного рождения электрон-дырочных пар в связанном экситонном состоянии. Образуется своеобразная бозе-жидкость, поскольку рост концентрации экситонов прекращается, когда расстояние между экситонами становится равным их размеру. Это состояние называется экситонным диэлектриком, так как в системе нет свободных носителей заряда. Казалось бы, эта бозе-жидкость должна обладать сверхтекучими свойствами и даже сверхтеплопроводностью. Однако достаточно очень малого количества примесей, чтобы разрушить когерентные связи. Поэтому явление сверхтеплопроводности обнаружить невозможно.

10.3 Экситон Френкеля в молекулярных кристаллах

Яков Френкель, известный ленинградский физик-теоретик первой половины двадцатого века, был полной противоположностью Льву Ландау, который его недолюбливал. В противоположность последнему Френкель мало обращал внимания на обоснованность физических гипотез и предпочитал формулировать свои теории на простых наглядных моделях. В частности, теория Френкеля роста зародышей при фазовых переходах первого рода опиралась на наглядную модель случайного блуждания в пространстве размеров зародышей. Эту теорию мы уже обсуждали на одной из предыдущих лекций.

Экситоны малого радиуса (экситоны Френкеля) - это слабозатухающие возбуждения молекул в молекулярных кристаллах. Пусть диэлектрический молекулярный кристалл облучается светом. Если энергия ω фотона - кванта электромагнитного возбуждения - близка к энергии ϵ возбуждения электрона в молекуле,

то этот фотон может поглотиться и возбудить один из электронов молекулы с основного состояния на возбужденное состояние. Разность энергий $\omega - \varepsilon$ передается "термостату" тепловых фононов.

Газ таких возбуждений в кристалле описывается гамильтонианом

$$\hat{H}_0 = \sum_R \varepsilon \hat{b}_R^+ \hat{b}_R, \quad (39)$$

где \hat{b}_R есть оператор исчезновения возбуждения, а $\hat{b}_R^+ \hat{b}_R$ - оператор числа возбуждений в узле R . Он равен единице на молекулах, которые возбуждены, и равен нулю на невозбужденных молекулах. Возбужденное состояние молекулы можно рассматривать как совокупность электрона на незаполненной оболочке и дырки (отсутствие одного электрона) на заполненной оболочке. Другими словами, экситон - это нейтральная пара ферми-частиц, и, следовательно, экситон есть бозе-частица.

Коллективные состояния двух соседних молекул, одна из которых возбуждена, а другая находится в основном состоянии, вырождены, т. е. имеют одинаковую энергию:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 |0_1, 1_2\rangle &= \varepsilon |0_1, 1_2\rangle \\ \hat{H}_0 |1_1, 0_2\rangle &= \varepsilon |1_1, 0_2\rangle \end{aligned}$$

Как известно из квантовой механики, сколь угодно слабое взаимодействие приводит к качественной перестройке вырожденной системы. Собственными состояниями двух узлов становятся суперпозиции

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|1_1, 0_2\rangle \pm |1_1, 0_2\rangle)$$

Взаимодействие, создающее такие гибридизированные состояния, в представлении вторичного квантования записывается в виде

$$U \hat{b}_1^+ \hat{b}_2 + U \hat{b}_2^+ \hat{b}_1 \quad (40)$$

В первом члене возбуждение исчезает на узле 2 и рождается на узле 1, а второй член переносит возбуждение с узла 1 на узел 2.

Таким образом, гамильтониан коллективных возбуждений в кристалле с учетом резонансного взаимодействия (40) имеет вид

$$\hat{H}_0 = \sum_R \varepsilon \hat{b}_R^+ \hat{b}_R + U \sum_{\langle R_1 R_2 \rangle} \hat{b}_{R_1}^+ \hat{b}_{R_2}. \quad (41)$$

Во второй сумме суммирование идет по ближайшим соседям ($\vec{R}_1 - \vec{R}_2 = \vec{g}$, $|\vec{g}| = a$). Это - однородная квадратичная форма. Она диагонализуется переходом к импульсному представлению

$$\hat{b}_R = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_p \hat{b}_p e^{ipR} \quad (42)$$

,где N_0 - число узлов в кристалле. Подставляя это разложение по плоским волнам в (41), получаем

$$\hat{H}_0 = \sum_p \varepsilon \hat{b}_p^+ \hat{b}_p + \frac{U}{N_0} \sum_{p_1 p_2} \hat{b}_{p_1}^+ \hat{b}_{p_2} \sum_{R_2 g} e^{i(-p_1(R_2+g)+p_2 R_2)} = \sum_p \varepsilon_p \hat{b}_p^+ \hat{b}_p \quad (43)$$

Здесь после суммирования по R_2 возникает равенство $p_1 = p_2$, и коэффициент ε_p равен

$$\varepsilon_p = \varepsilon + U \sum_g e^{-ipg} \quad (44)$$

Для простой кубической решетки сумма по 6 соседям дает

$$\sum_g e^{-ipg} = 4(\cos ap_x + \cos ap_y + \cos ap_z)$$

Итак, гамильтониан (43) описывает газ экситонов. Они свободно движутся по кристаллу, и их спектр энергии имеет вид (44), по форме совпадающий со спектром электронов в узких зонах. Но следует помнить, что экситон есть бозе-частица.

10.4 Полярон в диэлектриках

В этой лекции будет показано, что при медленном электроном в диэлектрическом кристалле вследствие его взаимодействия с колебаниями решетки (фононами) может рассматриваться как частица, также обладающая квадратичным законом дисперсии, но с большей эффективной массой (говорят, что электрон одет "фононной шубой"). Медленность здесь существенна, так как если электрон движется с достаточно большой скоростью, то имеет место черенковское излучение фононов.

Для простоты рассмотрим взаимодействие электронов с оптическими бездисперсионными *продольными* фононами, описываемыми гамильтонианом

$$H_{ph} = \omega \sum_q b_q^+ b_q, \quad (45)$$

ω — частота оптического фонона, b_q^+, b_q — операторы рождения и уничтожения фононов с квазиимпульсом q из зоны Бриллюэна. Анализ показывает, что именно с такими фононами электроны взаимодействуют сильнее всего.

Поле электрической поляризации $P(x)$ в точке x пропорционально смещению узла решетки в этой точке пропорционально. Если F — коэффициент пропорциональности, то

$$P = F \sum_q b_q \exp(iqx) + b_q^+ \exp(-iqx) \quad (46)$$

e_q — вектор поляризации фонона (как всегда, там, где это не приводит к явным недоразумениям, мы опускаем значок вектора и оператора).

Потенциал, соответствующий поляризации (46), может быть записан в виде

$$\varphi(x) = \sum_q \varphi_q \exp(iqx) + \varphi_q^+ \exp(-iqx) \quad (47)$$

связан с полем соотношением

$$\vec{E} = -\nabla\varphi(x) = -i \sum_q q\varphi_q \exp(iqx) - q\varphi_q^+ \exp(-iqx) \quad (48)$$

Поскольку $\text{div}\vec{D} = 0$, то $\vec{E} + 4\pi\vec{P} = 0$ и, следовательно,

$$\varphi_q = -\frac{i4\pi F}{q} b_q \quad (49)$$

Если электроны распределены с плотностью $\rho(x)$, то оператор энергии их взаимодействия с полем поляризации фононов равна

$$e \int \varphi(x) \rho(x) dx \quad (50)$$

Для того, чтобы связать константу F , входящую в теорию, с макроскопическими характеристиками кристалла (диэлектрической проницаемостью) рассмотрим два точечных заряда, находящиеся в точках x_1 и x_2 в электрическом поле фононов. Для этих двух зарядов $\rho(x) = \delta(x_1) + \delta(x_2)$, поэтому искомым оператор 50 равен

$$i4\pi F e \sum_q q^{-1} (b_q \exp(iqx_1) - b_q^+ \exp(-iqx_1) + b_q \exp(iqx_2) - b_q^+ \exp(-iqx_2)) \quad (51)$$

Для простоты ограничимся случаем нулевой температуры. Тогда для электронов взаимодействующих с виртуальными фононами решетки, находящейся в основном состоянии, во втором порядке теории возмущений часть энергии двух электронов, зависящая от их взаимного расстояния, равна

$$H'' = -2 \sum_q \frac{\langle 0 | e\varphi(x_1) | q \rangle \langle q | e\varphi(x_2) | 0 \rangle}{\omega_l} \quad (52)$$

здесь $|0\rangle$ и $|q\rangle$ соответственно основное и возбужденное (однофононное) состояние решетки. или

$$H''(x_1 - x_2) = -\frac{2e^2(4\pi F)^2}{\omega_l} \sum_q \frac{1}{q^2} \exp[iq(x_1 - x_2)] = -\frac{2e^2 4\pi F^2}{\omega_l} \frac{1}{|x_1 - x_2|} \quad (53)$$

Множитель 2 появился за счет того, что x_1 и x_2 можно поменять местами.

Энергия взаимодействия двух "голых" электронов равна $\frac{e^2}{|x_1 - x_2|}$. Изменение энергии $H''(x_1 - x_2)$, зависящее от расстояния, связано с поляризуемостью за счет смещения **ионов**. При этом само состояние иона не изменяется. Внесение внешних зарядов в кристаллическую решетку приводит также к поляризации электронных оболочек. Пусть за счет этого эффекта часть энергии двух электронов, зависящей от взаимного расстояния, равна $H'(x_1 - x_2)$. Тогда полная энергия взаимодействия двух электронов в диэлектрической среде равна

$$E = \frac{e^2}{|x_1 - x_2|} - \frac{8\pi F^2}{\omega_l} \frac{e^2}{|x_1 - x_2|} + H'(x_1 - x_2) \quad (54)$$

С точки зрения макроскопической электродинамики эта энергия равна $\frac{e^2}{\varepsilon_0|x_1-x_2|}$, где ε_0 — статическая диэлектрическая проницаемость среды. С другой стороны, первый и третий члены в сумме отвечали бы диэлектрической проницаемости недеформируемой решетки. Колебания решетки не проявляются в высокочастотном электрическом поле, для которого диэлектрическая проницаемость есть ε_∞ . Поэтому сумма первого и третьего члена в (54) равна $\frac{e^2}{\varepsilon_\infty|x_1-x_2|}$. Следовательно,

$$\frac{8\pi F^2}{\omega_l} = 1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_0 \quad (55)$$

или

$$4\pi F = [\omega_l (1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_0) / 2\pi]^{1/2} \quad (56)$$

Установив физический смысл константы F , обратимся к исследованию свойств электрона, движущегося сквозь решетку. В соответствии с общими правилами записи операторов представления вторичного квантования для электрона в поле фононов получим

$$H_{int} = \int d^3x e\Psi^+(x)\varphi(x)\Psi(x) = -4\pi i F e \sum_{kq} q^{-1} (b_q c_{k+q}^+ c_k - b_q^+ c_{k-q}^+ c_k) \quad (57)$$

Здесь $\Psi^+(x)$ и $\Psi(x)$ — соответственно операторы рождения и уничтожения фононов в точке x , а c_{k+q}^+ и c_k — те же операторы в импульсном представлении. Вычислим матричный элемент для перехода системы электрон-решетка из состояния, когда решетка не возбуждена $|k; 0_q\rangle$ в состояние, когда имеется один фонон $|k; 1_q\rangle$

$$|\langle k-q; 1_q | H_{int} | k; 0_q \rangle| = \frac{4\pi e F}{q} \quad (58)$$

Знание этого матричного элемента позволяет исследовать многие свойства рассматриваемой системы. Оценим, например, число виртуальных фононов, сопровождающих электрон, движущихся по решетке.

В первом порядке теории возмущений волновая функция системы имеет вид

$$|k0\rangle^{(1)} = |k0\rangle^{(0)} + \sum_q |k-q; 1_q\rangle \frac{\langle k-q; 1_q | H' | k; 0_q \rangle}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} - \omega_l} \quad (59)$$

Полное число фононов есть среднее по возмущенному состоянию значение оператора числа фононов $\hat{N} = \sum_q b_q^+ b_q$

$$\langle N \rangle = \sum_q \frac{|\langle k-q; 1_q | H' | k; 0_q \rangle|^2}{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} - \omega_l)^2} \quad (60)$$

Считая закон дисперсии электрона квадратичным и сам электрон медленным $k \ll p$, что позволяет воспользоваться неравенством $kq \ll q^2$, переходя от суммирования к интегрированию по импульсам, получим

$$\langle N \rangle = 8e^2 F^2 (2m)^2 \int_0^\infty dq \frac{1}{(q^2 + q_l^2)^2} \quad (61)$$

ввиду быстрой сходимости верхний предел интеграла заменен на бесконечность. интеграл легко считается вычетами с учетом четности подинтегрального выражения и равен $\pi/(4q_l^3)$ В результате получаем

$$\langle N \rangle = \frac{e^2}{4\omega_l} (2m\omega_l)^{1/2} (1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_0) = \alpha/2 \quad (62)$$

Вычислим поправку к энергии электрона Для вычисления эффективной массы электрона найдем поправку к его энергии за счет взаимодействия с фононами во втором порядке теории возмущений

$$\Delta\varepsilon_k = -2m \sum_q \frac{|\langle k-q; 1_q | H' | k; 0_q \rangle|^2}{q^2 - 2kq + q_l^2} \quad (63)$$

Подставим вместо H' его выражение через F и перейдем от суммирования к интегрированию Тогда

$$\Delta\varepsilon_k = -\frac{2m \cdot (4\pi)^2 \cdot 2\pi \cdot e^2 F^2}{(2\pi)^3} \int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^\infty \frac{dq}{q^2 - 2kq \cos\theta + q_l^2} \quad (64)$$

Введем обозначение

$$q/q_l = x, k/q_l = \mu, \cos\theta = \nu \quad (65)$$

Тогда

$$\Delta\varepsilon_k = -8e^2 F^2 m \frac{1}{q_l} \int_{-1}^1 d\nu \int_0^\infty \frac{dx}{x^2 - 2x\nu\mu + 1} \quad (66)$$

Вычислим интеграл при условии когда импульс электрона k мал по сравнению с импульсом q , то есть $\mu \ll 1$. Разложим в ряд подинтегральное выражение

$$\begin{aligned} \frac{1}{x^2 - 2x\nu\mu + 1} &= \frac{1}{(1+x^2) \left(1 - \frac{2x\nu\mu}{1+x^2}\right)} = \\ &= \frac{1}{(1+x^2)} \left(1 + \frac{2x\nu\mu}{1+x^2} + \frac{4x^2\nu^2\mu^2}{(1+x^2)^2} \dots\right) \end{aligned}$$

Вклад в интеграл дают только первый и третий члены

$$\int_{-1}^1 d\nu \int_0^\infty \frac{dx}{(1+x^2)} = \pi \quad (67)$$

$$\mu^2 \int_{-1}^1 \nu^2 d\nu \int_0^\infty \frac{4x^2 dx}{(1+x^2)^3} = 4 \cdot \frac{2}{3} \mu^2 \nu^2 \frac{\pi}{16} = \mu^2 \frac{\pi}{6} \quad (68)$$

Поэтому

$$\Delta\varepsilon_k = -8e^2 F^2 m \pi \frac{1}{(2\omega_l m)^{1/2}} \left(1 + \frac{k^2}{12\omega_l m}\right) \quad (69)$$

Или

$$\Delta\varepsilon_k = -\frac{8\pi F^2}{\omega_l} (2\omega_l m)^{1/2} \frac{e^2}{2\omega_l} \left(\omega_l + \frac{k^2}{12m}\right) = -\alpha \left(\omega_l + \frac{k^2}{12m}\right) \quad (70)$$

Член $-\alpha\omega_l$ не зависит от импульса электрона и описывает не интересующее нас здесь изменение потенциальной энергии электрона. Второй член $-\alpha\frac{k^2}{12m}$ описывает уменьшение кинетической энергии электрона, при этом полная кинетическая энергия электрона равна

$$\varepsilon_k = \frac{k^2}{2m} + \Delta\varepsilon_k = \frac{k^2}{2m_*} \quad (71)$$

где $m_* = m/(1 + \alpha/6)$. Таким образом вместо движения электрона можно говорить о движении частицы (полярона) с эффективной массой m_* .

11 Лекция 11. Возбуждения ферми-жидкости

1. Тема данной лекции - найти спектры коллективных колебаний ферми-жидкости.

Идеальный ферми-газ есть абстракция, которая позволяет точно вычислить любые термодинамические величины, но встречается редко. Чаще в природе реализуется ферми-жидкость Ландау. Это ферми-система высокой плотности, в которой определяющую роль играет взаимодействие между частицами. В первую очередь - это электроны проводимости в металлах, которые в предыдущих лекциях из соображений простоты рассматривались как идеальный газ. Во вторую очередь - это жидкий изотоп гелия-три.

Чтобы перейти от ферми-газа к ферми жидкости, удобно использовать понятие квазичастиц, с помощью которого строилась теория сверхтекучести и теория сверхпроводимости. (см. л.№?)

Вспомним, что в идеальном газе электронов в основном состоянии заполнены (пусты) все уровни, импульс которых меньше (больше) импульса p_F на поверхности Ферми. Величина p_F задается плотностью электронов

$$\frac{N}{V} = \frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3} \quad (1)$$

При этом возбужденные состояния газа электронов можно описывать как разреженный газ квазичастиц двух сортов. Выше поверхности Ферми роль квазичастицы играет электрон, а под поверхностью Ферми - квазичастица - это одночастичное состояние без электрона - дырка. При этом вблизи поверхности Ферми энергия обоих сортов квазичастиц положительна и равна

$$\xi_p = \left| \frac{p^2}{2m} - \frac{p_F^2}{2m} \right| \simeq v_F |p - p_F|, \quad v_F = \frac{p_F}{m}, \quad (2)$$

Заметим, что электроны и дырки движутся в противоположные стороны

$$v_\alpha = \frac{\partial \xi_p}{\partial p_\alpha} = \frac{p_\alpha}{m} \text{sign}(p - p_F) \quad (3)$$

Число квазичастиц характеризует степень возбуждения и растет с ростом температуры. Поэтому, как у фотонов черного излучения и фононов, химический потенциал квазичастиц тождественно равен нулю.

Равновесная функция распределения квазичастиц есть распределение Ферми с нулевым химическим потенциалом

$$f_0(\vec{p}) = \frac{1}{e^{\xi_p/T} + 1} \quad (4)$$

В отличие от идеального ферми-газа основное состояние ферми-жидкости Ландау есть совокупность сильно связанных друг с другом электронов, лежащих под поверхностью Ферми. Поскольку число электронов от взаимодействия, не зависит, то радиус поверхности Ферми по-прежнему определяется формулой (1). Квазичастицы ферми-жидкости Ландау можно рассматривать как разреженный ферми-газ, свободно распространяющийся сквозь основное состояние ферми-жидкости. Согласно гипотезе Ландау и в соответствии с экспериментом спектр возбуждений квазичастиц имеет вид (2)

$$\xi_p = v_F |p - p_F|, \quad (5)$$

но скорость v_F квазичастиц в среде сильно взаимодействующих электронов имеет другую величину

$$v_F = \frac{p_F}{m^*}, \quad (6)$$

где m^* - эффективная масса. Равновесная функция распределения квазичастиц в ферми-жидкости имеет тот же вид (4), что и в ферми-газе.

Эта функция сосредоточена вблизи поверхности Ферми

$$\frac{\partial f_0(p)}{\partial \xi_p} = -\frac{e^{\xi_p/T}}{T(e^{\xi_p/T} + 1)^2} \simeq -\delta(\xi_p) \quad (7)$$

Поэтому сумма по состояниям квазичастиц с весом $|\partial f_0/\partial \xi_p|$ от любой плавной функции $\varphi(p)$ сводится к усреднению по телесному углу

$$\sum \left| \frac{\partial f_0}{\partial \xi_p} \right| \varphi(p) = g_F \langle \varphi(p) \rangle, \quad \langle \varphi(p) \rangle \equiv \int \frac{d\Omega}{4\pi} \varphi(p) \quad (8)$$

где g_F - перенормированная плотность состояний:

$$g_F = \sum \left| \frac{\partial f_0}{\partial \xi_p} \right| = \int \frac{2 * d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{\xi_p/T}}{T(e^{\xi_p/T} + 1)^2} = \frac{m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} \quad (9)$$

Множитель 2 учитывает вырождение по спину ферми-частиц.

2. Движение разреженного газа квазичастиц описывается уравнением Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{r}_\alpha \frac{\partial}{\partial r_\alpha} f + \dot{p}_\alpha \frac{\partial}{\partial p_\alpha} f = S t f. \quad (10)$$

Прежде всего заметим, что этим уравнением, строго говоря, не имеет смысла описывать обычные звуковые колебания ферми-жидкости. Звуковые колебания удовлетворяют условию

$$\omega \ll \frac{1}{\tau},$$

где τ - время свободного пробега квазичастиц. В этом пределе за время $t \sim \tau \ll 1/\omega$. устанавливается локальное равновесие, и звук - это волна, определяемая гидродинамическими уравнениями, которые описывают движение локально-равновесной ферми-жидкости, скорость которой равна

$$v_{sound} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \sqrt{\frac{\partial P}{\partial \rho}}. \quad (11)$$

(P - давление, ρ - плотность жидкости)

В противоположном пределе, при $\omega\tau \gg 1$ существуют слабозатухающие колебания нового типа. Чтобы их найти, исследуем решения вида бегущих волн $\sim e^{ikr-i\omega t}$ уравнения (10), пренебрегая его правой частью.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{r}_\alpha \frac{\partial}{\partial r_\alpha} f + \dot{p}_\alpha \frac{\partial}{\partial p_\alpha} f = 0. \quad (12)$$

При описании транспортных свойств электронов в металлах электроны рассматривались как идеальный газ и сила - скорость изменения импульса \dot{p}_α - определялась исключительно внешним полем. Теперь учтем ферми-жидкостные эффекты методом самосогласованного поля. В рамках этого метода сила \dot{p}_α , с которой на выделенную частицу действует окружающий газ квазичастиц вычисляется как результат суммарного действия окружающих квазичастиц, величина которого зависит от вида искомой функции f . Вид этой зависимости различен для заряженных и нейтральных ферми-частиц.

Для квазичастиц электронной ферми-жидкости скорость изменения импульса определяется электрической силой

$$\dot{p}_\alpha = e(p) E_\alpha \quad (13)$$

Здесь $e(p) = e \text{sign}(p - p_F)$, принято во внимание, что заряды электрона и дырки имеют противоположные знаки. Электрическое поле найдем из нерелятивистских уравнений Максвелла

$$\text{div} E = 4\pi\rho, \text{rot} E = 0 \quad (14)$$

Для выделенной гармоники уравнения Максвелла (14) принимают вид

$$i\vec{k}\vec{E} = 4\pi\rho, \vec{k} \times \vec{E} = 0$$

Отсюда электрическое поле равно

$$E_\alpha = -4\pi i \frac{k_\alpha}{k^2} \rho \quad (15)$$

Электроны в основном состоянии вместе с ионами образуют электронейтральную систему и вклад в полную плотность заряда не дают. Равновесное распределение квазичастиц электронейтральность не нарушает.

Вклад в плотность заряда вносят неравновесная часть функции распределения квазичастиц $f_1 = f - f_0$:

$$\rho = \sum_p e(p) f = \sum_p e(p) f_1 \quad (16)$$

Представим f_1 в форме

$$f_1 = \left| \frac{\partial f_0}{\partial \xi} \right| \chi \quad (17)$$

и используем обозначения (8):

$$\rho = g_F e(p) \langle \chi \rangle \quad (18)$$

Подставляя (15) и (18) в (13), находим

$$\dot{p}_\alpha = -ik_\alpha \frac{4\pi e^2}{k^2} g_F \langle \chi \rangle \quad (19)$$

Теперь рассмотрим случай диэлектрической ферми-жидкости (жидкость He^3). Потенциальную энергию взаимодействия квазичастицы с остальными квазичастицами в самом общем случае можно представить в форме функционала

$$V(rp) = 2 \int \frac{d^3 r' d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} U(rp, r'p') f(r'p') \quad (20)$$

Взаимодействие нейтральных квазичастиц является короткодействующим и слабо зависящим от угла рассеяния. Поэтому с хорошей точностью можно принять

$$U(rp, r'p') = U_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Тогда

$$\dot{p}_\alpha = -\frac{\partial}{\partial r_\alpha} V(rp) = -U_0 \frac{\partial}{\partial r_\alpha} 2 \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} f_1(rp') \quad (21)$$

Очевидно, равновесная часть распределения квазичастиц вклада в силу не дает.

Используя обозначение (17), получаем для выделенной гармоники выражение

$$\dot{p}_\alpha = -ik_\alpha U_0 g_F \langle \chi \rangle \quad (22)$$

Формула (19) имеет такой же вид, но для электронов эффективный потенциал равен фурье-компоненте кулоновской энергии

$$U_e(k) = \frac{4\pi e^2}{k^2} \quad (23)$$

3. Таким образом, согласно (22) сила \dot{p}_α пропорциональна неравновесной функции распределения, Поэтому в линейном приближении по f_1 в последнем члене (12) в производной по импульсу можно пренебречь неравновесностью, и для выделенной гармоники с частотой ω и волновым вектором \vec{k} из имеем

$$(-i\omega + i\vec{k}\vec{v})f_1(p) + \dot{p}_\alpha \frac{\partial f_0(p)}{\partial p_\alpha} = 0. \quad (24)$$

Используя (17) и (22), получаем

$$(-i\omega + i\vec{k}\vec{v})\chi + i\vec{k}\vec{v}Ug_F \langle \chi \rangle = 0. \quad (25)$$

Отсюда находим

$$\chi = U(k)g_F \frac{\vec{k}\vec{v}}{(\omega - \vec{k}\vec{v})} \langle \chi \rangle$$

После усреднения по углам, получаем

$$1 = U(k)g_F \left\langle \frac{\vec{k}\vec{v}}{\omega - \vec{k}\vec{v}} \right\rangle \quad (26)$$

Вычислим входящий сюда интеграл, введя обозначение $s = \omega/kv_F$

$$J = \left\langle \frac{\vec{k}\vec{v}}{\omega - \vec{k}\vec{v}} \right\rangle = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\cos\theta \frac{\cos\theta}{s - \cos\theta} = -1 + \frac{1}{2}s \ln \frac{s+1}{s-1}$$

В результате получаем дисперсионное уравнение, неявным образом определяющее зависимость ω от k .

$$-1 + \frac{1}{2}s \ln \frac{s+1}{s-1} = \frac{1}{U(k)g_F} \quad (27)$$

В диэлектрической жидкости взаимодействие является короткодействующим, и потенциал U_0 от волнового вектора не зависит:

$$\frac{1}{2}s \ln \frac{s+1}{s-1} = \frac{1}{g_F U_0} + 1 \quad (28)$$

Приходим к простой линейной зависимости

$$\omega = (sv_F)k \quad (29)$$

По этой причине собственное колебание нейтральной ферми-жидкости Ландау назвал нуль-звуком. Если плотность жидкости невелика, и $g_F U_0 \ll 1$, то скорость распространения нуль-звука близка к v_F :

$$s = 1 + z, \quad \frac{1}{2} \ln \frac{2}{z} = \frac{1}{g_F U_0}$$

$$s = 1 + 2 \exp \left[-\frac{2}{g_F U_0} \right]$$

У электронной жидкости потенциал (23) из-за дальнедействующего характера кулоновского взаимодействия резко зависит от переданного импульса, и длинноволновое, так называемое, плазменное колебание имеет конечную энергию.

Формально, в уравнении

$$-1 + \frac{1}{2}s \ln \frac{s+1}{s-1} = \frac{k^2}{4\pi e^2 g_F} \quad (30)$$

предел $k \rightarrow 0$ требует, чтобы левая часть тоже стремилась к нулю и $s \rightarrow \infty$:

$$\frac{1}{s^2} + \frac{3}{5s^4} = \frac{3k^2}{4\pi e^2 g_F} \quad (31)$$

В результате находим два первых члена разложения частоты плазменных колебаний по волновому вектору:

$$\omega^2 = \Omega^2 \left(1 + \frac{3(kv_F)^2}{5\Omega^2} \right) \quad (32)$$

где введена так называемая плазменная частота Ω :

$$\Omega^2 = \frac{4\pi e^2 g_F v_F^2}{3} = \frac{4\pi e^2 N}{m^* V}$$

4. Чтобы оценить затухание плазменных колебаний, обусловленное столкновением квазичастиц с примесями и фононами, в правую часть кинетического уравнения (24) введем интеграл столкновений в τ -приближении

$$\left(-i\omega + i\vec{k}\vec{v} \right) f_1(p) - ik_\alpha \frac{4\pi e^2}{k^2} g_F \langle \chi \rangle \frac{\partial f_0(p)}{\partial p_\alpha} = -\frac{1}{\tau} (f - f_0). \quad (33)$$

Это приводит в предыдущих формулах к замене частоты ω на $(\omega + i\frac{1}{\tau})$. Получаем тривиальный результат, что время плазменных колебаний равно τ .

Затухание нуль-звука менее тривиально. Дело в том, что жидкий гелии-три выталкивает примеси и в нем нет подсистемы колебаний решетки. У этой ферми-жидкости существует только один канал релаксации - столкновения квазичастиц. При таких столкновениях сохраняется полное число частиц и полный импульс системы. (Закон сохранения энергии при $T \ll \varepsilon_F$ роли не играет.) Чтобы решения уравнения Больцмана не приводили к нарушению этих законов сохранения, интеграл столкновений должен удовлетворять условиям

$$\sum \varphi S t f = 0, \quad \varphi = 1, \vec{p},$$

Простейшее однопараметрическое выражение, которое этим свойствам удовлетворяет, имеет вид

$$S t f = -\frac{1}{\tau} \left| \frac{\partial f_0}{\partial \xi} \right| \left(\chi - \langle \chi \rangle - \frac{3}{p_F^2} p_\alpha \langle \chi p_\alpha \rangle \right) \quad (34)$$

Подставляя (34) в правую часть (24) получаем

$$\left(-i\omega + i\vec{k}\vec{v} \right) \chi + i\vec{k}\vec{v} U_0 g_F \langle \chi \rangle = -\frac{1}{\tau} \left(\chi - \langle \chi \rangle - \frac{3}{p_F^2} p_\alpha \langle \chi p_\alpha \rangle \right) \quad (35)$$

Выберем систему координат, в которой ось Z направлена вдоль волнового вектора, и скалярные произведения имеют вид

$$\vec{k}\vec{v} = kv \cos \theta, \quad \frac{3}{p_F^2} p_\alpha \langle \chi p_\alpha \rangle = 3 \cos \theta \langle \chi \cos \theta \rangle$$

Формальное решение уравнения (35) имеет вид

$$\chi = [\langle \chi \rangle (1 - i\tau kv \cos \theta U_0 g_F) + 3 \cos \theta \langle \chi \cos \theta \rangle] D$$

где

$$D = (1 - i\omega\tau + i\tau kv_F \cos \theta)^{-1} \quad (36)$$

Чтобы составить дисперсионное уравнение, следует вычислить соответствующие средние

$$\begin{aligned} \langle \chi \rangle &= \langle \chi \rangle (\langle D \rangle - iq \langle D \cos \theta \rangle) + 3 \langle \chi \cos \theta \rangle \langle D \cos \theta \rangle \\ \langle \chi \cos \theta \rangle &= \langle \chi \rangle (\langle D \cos \theta \rangle - iq \langle D \cos^2 \theta \rangle) + \langle \chi \cos \theta \rangle 3 \langle D \cos^2 \theta \rangle \end{aligned}$$

где $q = \tau U_0 g_F k v_F$. Перегруппируем члены этих уравнений

$$\begin{aligned} \langle \chi \rangle (1 - \langle D \rangle + iq \langle D \cos \theta \rangle) &= 3 \langle \chi \cos \theta \rangle \langle D \cos \theta \rangle \\ \langle \chi \cos \theta \rangle (1 - 3 \langle D \cos^2 \theta \rangle) &= \langle \chi \rangle (\langle D \cos \theta \rangle - iq \langle D \cos^2 \theta \rangle) \end{aligned}$$

Вычисляя определитель этой системы, или просто перемножая левые и правые части, находим искомое дисперсионное уравнение

$$(1 - \langle D \rangle + iq \langle D \cos \theta \rangle) \left(\frac{1}{3} - \langle D \cos^2 \theta \rangle \right) = \langle D \cos \theta \rangle (\langle D \cos \theta \rangle - iq \langle D \cos^2 \theta \rangle) \quad (37)$$

Входящие сюда интегралы равны

$$\begin{aligned} \langle D \rangle &= \frac{1}{2} \int \frac{d \cos \theta}{1 - i\omega\tau + i\tau kv_F \cos \theta} = \frac{1}{2i\tau kv_F} \ln \frac{1 - i\omega\tau + i\tau kv_F}{1 - i\omega\tau - i\tau kv_F} \\ \langle D \cos \theta \rangle &= \frac{1}{2} \int \frac{\cos \theta d \cos \theta}{1 - i\omega\tau + i\tau kv_F \cos \theta} = \frac{1}{i\tau kv_F} [1 - (1 - i\omega\tau) \langle D \rangle] \\ \langle D \cos^2 \theta \rangle &= -\frac{(1 - i\omega\tau)}{(i\tau kv_F)} \langle D \cos \theta \rangle \end{aligned}$$

Если время свободного пробега достаточно мало, то, $q = \tau U_0 g_F k v_F \ll 1$,

$$\begin{aligned} \langle D \rangle &= \frac{1}{1 - i\omega\tau} + \frac{1}{3} \frac{(i\tau kv_F)^2}{(1 - i\omega\tau)^3} + \frac{1}{5} \frac{(i\tau kv_F)^4}{(1 - i\omega\tau)^5} \\ \langle D \cos \theta \rangle &= -\frac{1}{3} \frac{(i\tau kv_F)}{(1 - i\omega\tau)^2} - \frac{1}{5} \frac{(i\tau kv_F)^3}{(1 - i\omega\tau)^4} \\ \langle D \cos^2 \theta \rangle &= \frac{1}{3} \frac{1}{(1 - i\omega\tau)} + \frac{1}{5} \frac{(i\tau kv_F)^2}{(1 - i\omega\tau)^3} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left[i\omega\tau + (i\omega\tau)^2 + \frac{1}{3} (i\tau kv_F)^2 + iq \frac{1}{3} (i\tau kv_F) \right] \left[i\omega\tau + (i\omega\tau)^2 + \frac{3}{5} (i\tau kv_F)^2 \right] \\ = \left[\frac{1}{3} \frac{(i\tau kv_F)^2}{(1 - i\omega\tau)^2} \right] \left[\frac{1}{(1 - i\omega\tau)^2} + \frac{U_0 g_F}{(1 - i\omega\tau)} \right] \end{aligned}$$

$$\omega^2 = \frac{1}{3} (kv_F)^2 \left(1 + U_0 g_F - \frac{4i\tau\omega}{5} - \frac{iq}{\sqrt{3}} \right)$$

Это - гидродинамический звук с затуханием.

В пределе большого времени свободного пробега имеем

$$\begin{aligned} \langle D \rangle &= \frac{1}{2} \int \frac{d \cos \theta}{1 - i\omega\tau + i\tau kv_F \cos \theta} = \frac{1}{2i\tau kv_F} \ln \frac{1 - i\omega\tau + i\tau kv_F}{1 - i\omega\tau - i\tau kv_F} \\ \langle D \cos \theta \rangle &= \frac{1}{2} \int \frac{\cos \theta d \cos \theta}{1 - i\omega\tau + i\tau kv_F \cos \theta} = \frac{1}{i\tau kv_F} [1 - (1 - i\omega\tau) \langle D \rangle] \\ \langle D \cos^2 \theta \rangle &= -\frac{(1 - i\omega\tau)}{(i\tau kv_F)} \langle D \cos \theta \rangle \end{aligned}$$

Выше мы получили (29) $\omega = skv_F, s \simeq 1$.

$$\begin{aligned} \langle D \rangle &= -\frac{1}{2i\tau kv_F} \ln \frac{s+1 - 1/i\tau kv_F}{s-1 - 1/i\tau kv_F} \\ &\quad - \frac{1}{2i\tau kv_F} \ln \frac{(s+1)(1 - 1/i\tau kv_F (s+1))}{(s-1)(1 - 1/i\tau kv_F (s-1))}, \\ |D| &\ll 1 \end{aligned}$$

В линейном приближении по $1/\omega\tau$ правая часть уравнения (37) мала по сравнению с единицей слева, и, приравняв левую часть нулю, мы приходим к дисперсионному уравнению для нуль-звука (28) с поправкой

$$1 - \langle D \rangle + iq \langle D \cos \theta \rangle = 0$$

$$\frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} (1 + 1/i\tau kv_F (s-1)) = \left(\frac{1}{U_0 g_F} + 1 \right) \left[1 - \frac{i}{\omega\tau} \left(\frac{1}{U_0 g_F} + 1 \right) \right]$$

$$s = 1 + z$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \ln \frac{2}{z} (1 + 1/(i\tau kv_F z)) &= \frac{1}{U_0 g_F} \left(1 - \frac{i}{\omega\tau} \frac{1}{U_0 g_F} \right) \\ z &= 2e^{-2/U_0 g_F} (1 - i/(\omega\tau z)) e^{\frac{i}{\omega\tau} \frac{1}{(U_0 g_F)^2}} \end{aligned}$$

Есть устойчивость, поскольку

$$\frac{1}{z} \gg \frac{1}{(U_0 g_F)^2}$$

Существенно, что при уменьшении $\omega\tau$ затухание очень быстро растет

$$\gamma \sim \frac{1}{\omega\tau} e^{2/U_0 g_F}$$

12 Лекция 12. Ферромагнитные магнаны

12.1 Ферромагнетизм и спиновые волны в приближении самосогласованного поля

Существует широкий класс веществ, которые в основном состоянии обладают спонтанной намагниченностью - ферромагнетизмом. Основные свойства ферромагнетиков будем исследовать в рамках модели Гейзенберга

$$H = - \sum 2\mu_B \vec{S}_R \vec{B} - \frac{1}{2} \sum J(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \vec{S}_1 \vec{S}_2. \quad (1)$$

Первый член справа есть суммарная энергия магнитных моментов атомов $\vec{\mu}_R = 2\mu_B \vec{S}_R$, расположенных в узлах кристаллической решетки, во внешнем магнитном поле, а второй описывает изотропное обменное взаимодействие спинов. Величина $J(\vec{R}_1 - \vec{R}_2)$ называется обменным интегралом. У ферромагнетиков $J_0 = \sum_g J(g) > 0$. Вещества с $J_0 < 0$, называемые антиферромагнетиками, мы рассматривать не будем. Для вещества, состоящего из N атомов со спином $S = 1/2$ - это самый общий вид парного взаимодействия спинов. Члены вида $(\vec{S}_1 \vec{S}_2)^2$ ничего нового не дают, так как

$$\sigma_\alpha \sigma_\beta = \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{i} e_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\gamma, \quad (\vec{S}_1 \vec{S}_2)^2 = \frac{1}{16} \sigma_{1\alpha} \sigma_{2\alpha} \sigma_{1\beta} \sigma_{2\beta} = -\frac{1}{16} e_{\alpha\beta\gamma} \sigma_{1\gamma} e_{\alpha\beta\gamma'} \sigma_{2\gamma'} = \frac{3}{16} - \frac{1}{2} (\vec{S}_1 \vec{S}_2)$$

Обменная энергия в (1) минимальна, когда все спины параллельны друг другу и $\vec{S}_1 \vec{S}_2 = S^2$. Энергия магнитного поля минимальна, если спины направлены по магнитному полю \vec{B} , направление которого выберем в качестве оси Z . Отсюда очевидно, что энергия основного состояния, энергия при нулевой температуре, равна

$$ground = [-2\mu_B S B - \frac{1}{2} S^2 J_0] N.$$

Если внешнее магнитное поле отсутствует, то в основном состоянии все спины попрежнему параллельны друг другу, но их общее направление произвольно. Это свойство называется спонтанным нарушением симметрии. При низких температурах спины атомов решетки флуктуируют, и среднее значение спинов $\langle \vec{S}_R \rangle = \langle \vec{S} \rangle$ не равно максимальной величине S , но близко к нему. Очевидно, что $\langle \vec{S} \rangle \parallel Z$. При температуре Кюри T_c спонтанная намагниченность исчезает, и вещество переходит в парамагнитную фазу. Пусть обменный интеграл (амплитуда взаимодействия) $J(R)$ медленно спадает с увеличением расстояния между спинами. Тогда на выделенный спин действует эффективное поле от большого числа окружающих спинов

$$\sum J(R) \vec{S}_R.$$

Сумма большого числа флуктуирующих слагаемых слабо флуктуирует. Поэтому под знаком суммы можно считать, что флуктуация каждого спина $\delta \vec{S}_R = \vec{S}_R - \langle \vec{S}_R \rangle$ мала. Это позволяет в исходном гамильтониане в разложении

$$\vec{S}_1 \vec{S}_2 = (\langle \vec{S}_1 \rangle + \delta \vec{S}_1) (\langle \vec{S}_2 \rangle + \delta \vec{S}_2) = \langle \vec{S}_1 \rangle \langle \vec{S}_2 \rangle + \langle \vec{S}_1 \rangle \delta \vec{S}_2 + \langle \vec{S}_2 \rangle \delta \vec{S}_1 + \delta \vec{S}_1 \delta \vec{S}_2$$

пренебречь произведением флуктуаций и получить в линейном приближении

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1, \quad H_0 = E_0 = -\frac{1}{2} \sum J(R_1 - R_2) \langle \vec{S}_1 \rangle \langle \vec{S}_2 \rangle - \sum 2\mu_B \langle \vec{S}_R \rangle \vec{B} \\ H_1 &= - \sum J(R_1 - R_2) \langle \vec{S}_1 \rangle \delta \vec{S}_2 - \sum 2\mu_B \delta \vec{S}_R \vec{B} = - \sum 2\mu_B \vec{B}_{eff}(R) \delta \vec{S}_R \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь введено эффективное магнитное поле

$$\vec{B}_{eff}(R) = \vec{B} + \frac{1}{2\mu_B} \langle \vec{S} \rangle J_0, \quad (3)$$

которое зависит от средних значений $\langle \vec{S} \rangle$. Как правило, при низких температурах эффективное магнитное поле много больше внешнего магнитного поля. Величины $\langle \vec{S} \rangle$ следует вычислять самосогласованным образом, построив выражения, неявным образом задающие их значения. Поэтому расчеты, выполненные в линейном приближении по флуктуациям называются приближением самосогласованного поля. Можно построить теорию возмущений по степеням флуктуаций и убедиться, что поправки к результатам приближения самосогласованного поля малы вдали от T_c , вне области критических флуктуаций (Ларкин, Вакс, Пикин). Мы будем игнорировать область критических флуктуаций и применять приближение самосогласованного поля ко всем $T \lesssim T_c$. Гамильтониан (2) формально разбит на сумму независимых членов. Это позволяет легко вычислить

$$\begin{aligned} F &= -T \ln Z, \\ Z &= \sum e^{-\beta(E_0 + H_1)} = e^{-\beta E_0} \prod Z_R \\ Z_R &= \sum_{\sigma=\pm 1} \exp[2\beta\mu_B \vec{B}_{eff}(R) \delta \vec{S}_R] = e^{-2\beta\mu_B \vec{B}_{eff}(R) \langle \vec{S}_R \rangle} 2 \cosh[\beta\mu_B B_{eff}(R)] \end{aligned}$$

$$\sum_{\sigma=\pm 1} \exp(\vec{b}\vec{\sigma}) = \sum_{\sigma=\pm 1} \frac{1}{n!} (\vec{b}\vec{\sigma})^n = 2 \cosh b$$

Из соображений симметрии ясно, что в однородном магнитном поле средние значения спинов направлены по магнитному полю и не зависят от координаты узла. Поэтому проще

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma=\pm 1} \exp(b\sigma_z) &= e^b + e^{-b} = 2 \cosh b \\ F &= E_0 + \sum 2\mu_B \vec{B}_{eff}(R) \langle \vec{S}_R \rangle - T \sum \ln \{2 \cosh[\beta\mu_B B_{eff}(R)]\} \end{aligned} \quad (4)$$

получаем

$$\begin{aligned} E_0 &= \left(-\frac{1}{2} J_0 \langle S \rangle^2 - 2\mu_B \langle S \rangle B\right) N, \quad \sum 2\mu_B \vec{B}_{eff}(R) \langle \vec{S}_R \rangle = (2\mu_B B + J_0 \langle S \rangle) \langle S \rangle N \\ F &= \frac{1}{2} J_0 \langle S \rangle^2 N - TN \ln \left\{ 2 \cosh[\beta(\mu_B B + \frac{1}{2} J_0 \langle S \rangle)] \right\} \end{aligned} \quad (5)$$

В пределе низких температур ($\beta \rightarrow \infty$) свободная энергия имеет очень простой вид

$$F = \left[\frac{1}{2} J_0 \langle S \rangle^2 - \frac{1}{2} J_0 \langle S \rangle - \mu_B B\right] N,$$

минимальное значение которого дает полную намагниченность $\langle S \rangle = 1/2$. При высоких температурах, когда $\mu_B B_{eff} \ll T$, можно использовать разложение

$$\ln(2 \cosh x) = \ln 2 + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{12}x^4 + O(x^5)$$

и получить

$$F/N = \frac{1}{2}J_0 \langle S \rangle^2 - T \ln 2 - \frac{1}{2T}(\mu_B B + \frac{1}{2}J_0 \langle S \rangle)^2 + \frac{1}{12T^3}(\mu_B B + \frac{1}{2}J_0 \langle S \rangle)^4 \quad (6)$$

Минимум этого выражения по $\langle S \rangle$ при постоянных T и B дает

$$\langle S \rangle - \frac{1}{2T}(\mu_B B + \frac{1}{2}J_0 \langle S \rangle) + \frac{1}{6T^3}(\mu_B B + \frac{1}{2}J_0 \langle S \rangle)^3 = 0 \quad (7)$$

$$S - (b + \frac{T_c S}{T}) + \frac{4}{3}(b + \frac{T_c S}{T})^3 = 0, \quad b = \frac{\mu_B B}{2T}$$

$$y - (1 + \frac{y}{1+t}) + \frac{4b^2}{3}(1 + \frac{y}{1+t})^3 = 0, \quad y = S/b, \quad 1+t = T/T_c$$

$$t = 0, \quad \frac{4b^2}{3}(1+y)^3 = 1, \quad y = \left(\frac{3}{4b^2}\right)^{1/3} - 1,$$

Опустив в (7) кубический член, находим намагниченность $M = N\mu_B \langle S \rangle$

$$\langle S \rangle = \frac{\frac{1}{2}\mu_B B}{T - T_c}, \quad (8)$$

и магнитную восприимчивость

$$\chi = \partial M / \partial B = \frac{1}{2}N\mu_B^2 \frac{1}{T - T_c}$$

Это -закон Кюри-Вейсса. Восприимчивость обращается в бесконечность при температуре Кюри:

$$T_c = \frac{1}{4}J_0 \quad (9)$$

Учет в (7) кубического члена, дает конечное значение намагниченности в T_c , но вблизи температуры Кюри вместо приближенного выражения(6) следует рассматривать (5). В парамагнитной фазе, при $T \gg T_c$ подстановка (8) в (6) дает в квадратичном по B приближении ($b = \frac{1}{2}\mu_B B$)

$$F/N = \frac{1}{2}J_0 \langle S \rangle^2 - T \ln 2 - \frac{1}{2T}(\mu_B B + \frac{1}{2}J_0 \langle S \rangle)^2 \quad (10)$$

$$F/N = \frac{2T_c b^2}{(T - T_c)^2} - T \ln 2 - \frac{1}{2T}(2b + \frac{2T_c b}{T - T_c})^2 \quad (11)$$

$$F/N = \frac{2b^2 T_c}{(T - T_c)^2} - T \ln 2 - \frac{2b^2 T}{(T - T_c)^2} = -T \ln 2 - \frac{2b^2}{(T - T_c)} \quad (12)$$

При этом энтропия и теплоемкость (отнесенные к одной частице) равны

$$\mathfrak{S} = -\frac{\partial F/N}{\partial T} = \ln 2 + \frac{2b^2}{(T - T_c)^2}, \quad C = T \frac{\partial \mathfrak{S}}{\partial T} = \frac{4b^2 T}{(T_c - T)^3}.$$

Ниже температуры Кюри в отсутствие магнитного поля возникает спонтанная намагниченность, которая, как следует из (7), растет при понижении температуры по корневому закону:

$$\langle S \rangle^2 = \frac{3T^2}{4T_c^3} (T_c - T), \quad \langle S \rangle \sim (T_c - T)^{1/2} \quad (13)$$

При наличии спонтанной намагниченности магнитная восприимчивость определяется формулой

$$\chi = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial B}$$

Для этой величины уравнение (??) дает

$$\chi \left(1 - \frac{T_c}{T} + \frac{4T_c^3}{3T^3} \langle S \rangle^2\right) = \frac{N\mu_B^2}{2T}$$

Выше точки Кюри это выражение приводит к (8), а ниже этой температуры с учетом (13) получаем

$$\chi = \frac{1}{4} N\mu_B^2 \frac{1}{T_c - T} \quad (14)$$

Обратим внимание, что в формулах для восприимчивости выше и ниже T_c числители отличаются в два раза. Рассмотрим поведение теплоемкости в окрестности точки Кюри в отсутствие внешнего поля. Подставим в (6) выражение (13) или $\langle S \rangle = 0$: $F/N = \frac{1}{2} J_0 \langle S \rangle^2 - T \ln 2 - \frac{1}{2T} (\mu_B B + \frac{1}{2} J_0 \langle S \rangle)^2 + \frac{1}{12T^3} (\mu_B B + \frac{1}{2} J_0 \langle S \rangle)^4$

$$F/N = -T \ln 2 - \frac{3T}{4T_c^2} (T_c - T)^2, \quad T < T_c$$

$$F/N = -T \ln 2, \quad T > T_c$$

Отсюда находим энтропию, приходящуюся на один спин

$$s = -\frac{\partial F/N}{\partial T} = \begin{cases} \ln 2 - \frac{3T}{2T_c^2} (T_c - T), & T < T_c \\ \ln 2, & T > T_c \end{cases}$$

Как и должно быть, энтропия спиново упорядоченного состояния меньше энтропии полностью неупорядоченного парамагнитного состояния. Теплоемкость в окрестности точки Кюри претерпевает скачок

$$c = T \frac{\partial s}{\partial T} = \begin{cases} \frac{3}{2}, & T < T_c \\ 0, & T > T_c \end{cases}$$

Это находится в полном соответствии с теорией фазовых переходов второго рода Ландау. Таков результат исследования свойств ферромагнетика в приближении

самосогласованного поля. Рассмотрим теперь элементарные возбуждения ферромагнетика - спиновые волны при низких температурах $T \ll T_c$. Распишем исходный гамильтониан по компонентам

$$H = -\frac{1}{2} \sum J(R_1 - R_2)[S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y + S_1^z S_2^z] - \sum 2\mu_B B S_R^z \quad (15)$$

$$= -\frac{1}{2} \sum J(R_1 - R_2)[S_1^- S_2^+ + S_1^z S_2^z] - \sum 2\mu_B B S_R^z \quad (16)$$

$$S^\pm = S^x \pm iS^y, S^+ = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, S^- = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \quad (17)$$

$$S^+ \chi_\downarrow = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} \quad S^- \chi_\uparrow = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} \quad (18)$$

So S^+ переворачивает спин вверх, в основное состояние. Это - оператор поглощения возбуждения. Основное состояние - все спины направлены вверх.

$$E_0 = -\frac{1}{8} \sum J(R_1 - R_2) - \sum \mu_B B = -\left(\frac{1}{8}J_0 + \mu_B B\right) N$$

Спиновые операторы удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[S^+, S^-] = 2S^z, [S^+, S^z] = -S^+, [S^-, S^z] = S^z$$

Напишем уравнение прецессии для оператора S_R^+

$$i\frac{\partial S_R^+}{\partial t} = [S_R^+, H] = 2\mu_B B S_R^+ - \sum J(R - R')[S_R^z S_{R'}^+ - S_{R'}^z S_R^+]$$

В этом уравнении будем пренебрегать флуктуацией намагниченности и заменим проекцию спина на направление магнитного поля его средним значением:

$$i\frac{\partial S_R^+}{\partial t} = (2\mu_B B + J_0 \langle S^z \rangle) S_R^+ - \sum_{R'} \langle S^z \rangle J(R - R') S_{R'}^+ \quad (19)$$

Получили линейное уравнение, решение которого легко найти переходом к импульсному представлению. Произведем преобразование Фурье

$$S_R^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikR} a_k, \quad a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{-ikR} S_R^+$$

Из уравнения (19) получаем

$$i\frac{\partial a_k}{\partial t} = (2\mu_B B + J_0 \langle S^z \rangle) a_k - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{-ikR} \sum_{R'} \langle S^z \rangle J(R - R') \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{ik'R'} a_{k'}$$

Суммирование по R при фиксированном значении $g = R' - R$ дает

$$\sum_R e^{-i(k-k')R} = N\delta_{k,k'}$$

Уравнение прецессии принимает вид

$$i \frac{\partial a_k}{\partial t} = \omega_k a_k \quad (20)$$

Выражение

$$\omega_k = 2\mu_B B + \langle S^z \rangle (J_0 - J_k), \quad (J_0 - J_k) = \sum_g J(g)(1 - e^{i\vec{k}\vec{g}}) = \frac{1}{2} \sum_g (\vec{k}\vec{g})^2 J(g)$$

(с позиций симметрии, здесь величины B и $\langle S^z \rangle$ суть скаляры) имеет смысл частоты спиновой волны при заданном значении волнового вектора. Для малых длин волн спектр спиновых волн аналогичен спектру электрона вблизи дна зоны проводимости

$$\omega_k = 2\mu_B B + \frac{k^2}{2m^*}, \quad \frac{1}{2m^*} = \frac{1}{6} \langle S^z \rangle \sum_g J(g)g^2$$

Но щель пропорциональна магнитному полю, а эффективная масса растет с повышением температуры из-за уменьшения намагниченности. В отсутствие магнитного поля спектр является безщелевым.

$$\omega_k \simeq (ka)^2 \Theta, \quad v_k = \frac{\partial \omega_k}{\partial k} \simeq 2ka^2 \Theta. \rightarrow \omega_k \simeq \Theta, \quad v_k \simeq \omega_k/k \simeq \Theta a$$

Фактически, (20) - простейшее уравнение Шредингера с одним собственным значением и одной собственной функцией

$$a_k(t) = a_k(0) \exp(-i\omega_k t)$$

Магнитный момент - действительный вектор. Покажем, что магنون есть волна, поляризованная по кругу. Складывая и вычитая уравнение (20) с его эрмитовым сопряжением

$$i \frac{\partial a_k^+}{\partial t} = -\omega_k a_k^+, \quad (21)$$

для компонент спиновой волны $S^x = \frac{1}{2}(a + a^+)$ и $S^y = \frac{1}{2i}(a - a^+)$ получаем

$$\frac{\partial S^x}{\partial t} = \omega_k S^y \quad (22)$$

$$\frac{\partial S^y}{\partial t} = -\omega_k S^x \quad (23)$$

Решение этой системы дает

$$\begin{aligned} S^x(t) &= S^x(0) \cos \omega_k t + S^y(0) \sin \omega_k t \\ S^y(t) &= S^y(0) \cos \omega_k t - S^x(0) \sin \omega_k t \end{aligned}$$

Мы видим, что вектор спиновой волны вращается по часовой стрелке. Волны, вращающейся против часовой стрелки не существует. Это означает, что при заданном \vec{k} имеется только одна волна. Это согласуется с теоремой Голдстоуна, которая предсказывает наличие ν безщелевых мод колебаний в системе, которая

имеет ν линейных преобразований, не меняющих энергию основного состояния. В трехмерном ферромагнетике длина спина является фиксированной величиной, и имеется только одно преобразование симметрии - поворот в плоскости, перпендикулярной направлению спонтанного момента. При низких температурах спиновые волны можно рассматривать как бозе-газ магнонов, функция распределения которых есть распределение Планка-Бозе-Эйнштейна

$$n_k = \langle a_k^\dagger a_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta\omega_k} - 1}$$

Отсюда полное число магнонов равно

$$N_{magn} = \sum n_k = \int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\exp(\frac{k^2}{2m^*T}) - 1} \sim T^{3/2}$$

Магноны определяют температурную зависимость намагниченности при низких температурах

$$M = M_0 - const N_{magn} = M_0 - const T^{3/2}$$

и повышают энергию тела

$$E_{magn} = \sum n_k \omega_k = \int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\exp(\frac{k^2}{2m^*T}) - 1} \frac{k^2}{2m^*} \sim T^{5/2}$$

Отсюда находим магنونный вклад в теплоемкость тела:

$$C_{magn} = \frac{\partial E_{magn}}{\partial T} \sim T^{3/2}$$

При достаточно низких температурах эта величина является определяющей, поскольку фононная теплоемкость пропорциональна T^3 . Однако в ферромагнитных металлах главную роль играет теплоемкость электронов проводимости ($C_{met} \sim T$).

12.2 Преобразование Холстейна-Примакова, закон дисперсии магнонов

Рассмотрим спектр возбуждений в системе в модели Гайзенберга, гамильтониан которой представляет собой сумму обменных и зеемановских членов ,

$$H = -J \sum_{\mathbf{j}, \delta} \mathbf{S}_{\mathbf{j}} \mathbf{S}_{\mathbf{j}+\delta} - 2\mu_0 h \sum_{\mathbf{j}} S_{\mathbf{j}}^z. \quad (24)$$

Здесь $\mathbf{S}_{\mathbf{j}}$ — оператор спина, находящегося в узле решетки \mathbf{j} , которая для простоты считается кубической; δ — нумерует множество узлов решетки, ближайших к \mathbf{j} ; h — магнитное поле, направленное по оси z . Предполагается, что взаимодействуют только ближайшие соседи. Компоненты спина связаны соотношением $\mathbf{S}_{\mathbf{j}} \mathbf{S}_{\mathbf{j}} = S(S + 1)$.

Для перехода от спиновых операторов к бозевским выполним преобразование Холстейна-Примакова

$$\begin{aligned} S_j^+ &= S_j^x + iS_j^y = (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{a_j^+ a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j, \\ S_j^- &= S_j^x - iS_j^y = (2S)^{1/2} a_j^+ \left(1 - \frac{a_j^+ a_j}{2S}\right)^{1/2}, \\ S^z &= S - a_j^+ a_j, \end{aligned} \quad (25)$$

при этом мы требуем выполнения условия

$$[a_j, a_i^+] = \delta_{ij} \quad (26)$$

Можно проверить, что введенные таким образом преобразования непротиворечивы, так как по-прежнему выполняются коммутационные соотношения

$$[S_j^\pm, S_j^z] = \mp S_j^\pm, \quad (27)$$

$$[S_j^+, S_j^-] = 2S_z \quad (28)$$

Нас будут в основном интересовать слабовозбужденные состояния системы, когда

$$\frac{\langle a_j^+ a_j \rangle}{S} = \frac{\langle n_j \rangle}{S} \ll 1. \quad (29)$$

Поэтому преобразование Холстейна-Примакова приближенно запишется в виде

$$\begin{aligned} S_j^+ &\approx (2S)^{1/2} a_j, \\ S_j^- &\approx (2S)^{1/2} a_j^+, \\ S_j^z &\approx S - a_j^+ a_j. \end{aligned} \quad (30)$$

По формуле (61) перейдем от операторов a_j^+, a_j к новым операторам $a_{\mathbf{k}}^+, a_{\mathbf{k}}$

$$a_{\mathbf{j}} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{kj}} a_{\mathbf{k}}, \quad a_{\mathbf{j}}^+ = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{kj}} a_{\mathbf{k}}^+. \quad (31)$$

Легко проверить, используя (63) и (64), что имеет место преобразование

$$a_{\mathbf{k}} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{kj}} a_{\mathbf{j}}, \quad a_{\mathbf{k}}^+ = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\mathbf{j}} e^{-i\mathbf{kj}} a_{\mathbf{j}}^+. \quad (32)$$

Используя соотношения (32), (64), (26), получим, что

$$[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^+] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}] = 0, \quad [a_{\mathbf{k}}^+, a_{\mathbf{k}'}^+] = 0. \quad (33)$$

Поскольку

$$S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y = \frac{S_i^+ S_j^- + S_j^- S_i^+}{2}, \quad i \neq j,$$

то

$$\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = \frac{S_i^+ S_j^- + S_j^- S_i^+}{2} + S_i^z S_j^z \quad (34)$$

В результате, последовательно делая подстановки (34), (30), (31), получим

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{\mathbf{j}, \delta} \left(\frac{S_{\mathbf{j}}^+ S_{\mathbf{j}+\delta}^- + S_{\mathbf{j}+\delta}^- S_{\mathbf{j}}^+}{2} + S_{\mathbf{j}}^z S_{\mathbf{j}+\delta}^z \right) - 2\mu_0 h \sum_{\mathbf{j}} S_{\mathbf{j}}^z \\ &= -J \sum_{\mathbf{j}, \delta} [S (a_{\mathbf{j}} a_{\mathbf{j}+\delta}^+ + a_{\mathbf{j}+\delta}^+ a_{\mathbf{j}}) + (S - a_{\mathbf{j}}^+ a_{\mathbf{j}}) (S - a_{\mathbf{j}+\delta}^+ a_{\mathbf{j}+\delta})] - 2\mu_0 h \sum_{\mathbf{j}} S_{\mathbf{j}}^z = \end{aligned} \quad (35)$$

$$= -JS/N \sum_{\mathbf{j}, \delta, \mathbf{k}, \mathbf{q}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{j}} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{j}+\delta)} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{q}}^+ + e^{i\mathbf{q}(\mathbf{j}+\delta)} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{j}} a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}^+ + JS \sum_{\mathbf{j}, \delta} a_{\mathbf{j}}^+ a_{\mathbf{j}} + a_{\mathbf{j}+\delta}^+ a_{\mathbf{j}+\delta}. \quad (36)$$

$$H = -JNzS^2 - 2\mu_0 H_0 NS + H_0, \quad (37)$$

$$H_0 = -JzS \sum_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ + \gamma_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} - 2a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}) + 2\mu_0 h \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \quad (38)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{-i\mathbf{k}\delta} \quad (39)$$

При переходе от (35) к (36) мы воспользовались условием (29), опустив члены четвертого порядка по операторам спиновых волн. Для кристаллов имеющих центр симметрии $\gamma_{\mathbf{k}} = \gamma_{-\mathbf{k}}$, поэтому делая подстановку $a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ = 1 + a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}$ и опуская постоянный член получим

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} [2JzS(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) + 2\mu_0 h] a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} = \quad (40)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \quad (41)$$

Таким образом, при низких температурах (когда число возбуждений мало и можно пренебречь их взаимодействием) гамильтониан (24) изморфен системе независимых осцилляторов (спиновых волн). Этот вывод аналогичен результату, полученному для колебательного спектра кристаллов, для которых гамильтониан также сводится к системе независимых осцилляторов, а элементарные возбуждения являются фононами.

Для длиноволновых возбуждений, когда $|\mathbf{k}\delta| \ll 1$, то

$$z(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) \approx \frac{1}{2} \sum_{\delta} (\mathbf{k}\delta)^2 = (ka)^2 \quad (42)$$

Мы воспользовались тем, что для кубической решетки $|\delta_i| = a$

Поэтому элементарные возбуждения в модели Гайзенберга с ферромагнитным взаимодействием представляют собой магныны (спиновые волны) с квадратичным законом дисперсии

$$\omega_{\mathbf{k}} = 2\mu_0 H_0 + 2JS (ka)^2 \quad (43)$$

В отсутствие внешнего поля в соответствии с теоремой Голдстоуна спектр возбуждений является безщелевым

12.3 Магنونная теплоемкость

Для простоты ограничимся случаем нулевого магнитного поля. Тогда закон дисперсии может быть записан в виде

$$\omega_{\mathbf{k}} = Dk^2, D = 2JSa^2. \quad (44)$$

Тогда при температуре T энергия системы может быть представлена в вид

$$\begin{aligned} U &= \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{T}} - 1} = \frac{4\pi D}{(2\pi a)^3} \int_0^{2\pi} dk k^4 \frac{1}{e^{\frac{Dk^2}{T}} - 1} = \\ &= \frac{T^{5/2}}{4\pi^2 a^3 D^{3/2}} \int_0^{x_m} dx x^{3/2} \frac{1}{e^x - 1}, x_m = 4\pi^2 D/T. \end{aligned} \quad (45)$$

При низких температурах, когда $x_m \gg 1$ верхний предел в последнем интеграле заменяется на ∞ . Тогда для энергии и теплоемкости, соответственно имеем

$$\begin{aligned} U &\approx \frac{0.45T^{5/2}}{\pi^2 D^{3/2}}, \\ c &= \frac{dU}{dT} = 0.1 \left(\frac{T}{D} \right)^{3/2} \end{aligned} \quad (46)$$

Полученный закон теплоемкости спиновых волн носит название закона $3/2$ Блоха. Рассмотрение высоких температур не имеет смысла, так как в этом случае теряет смысл используемое спинволновое приближение.

12.4 Одномерная задача Изинга и метод трансферматрицы (точное решение)

Гамильтониан одномерной задачи Изинга в нулевом магнитном поле имеет вид

$$H = -J \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j \sigma_{j+1}, \sigma = \pm 1 \quad (47)$$

Тогда статсумма запишется

$$Z_N = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp \left(K \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j \sigma_{j+1} \right), K = J/T. \quad (48)$$

Представим эту статсумму в виде

$$Z_N = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-1}=\pm 1} \exp \left(K \sum_{j=1}^{N-2} \sigma_j \sigma_{j+1} \right) \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp(K\sigma_{N-1}\sigma_N). \quad (49)$$

Поскольку $\sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp(K\sigma_{N-1}\sigma_N) = 2chK$, то

$$Z_N = Z_{N-1} (2chK) = Z_2 (2chK)^{N-2}. \quad (50)$$

Но

$$Z_2 = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \exp(K\sigma_1\sigma_2) = 4chK. \quad (51)$$

Поэтому

$$Z_N = 2(2chK)^{N-1}. \quad (52)$$

Свободная энергия имеет вид

$$F = -T \ln Z = -NT \ln(2chK)$$

Соответственно энергия и теплоемкость имеют вид

$$\begin{aligned} E &= \frac{\partial}{\partial \frac{1}{T}} \left(\frac{F}{T} \right) = -NJth \frac{J}{T} \\ C &= \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{NJ^2/T^2}{ch^2 \frac{J}{T}} \end{aligned} \quad (53)$$

В пределе высоких и низких температур $C \rightarrow 0$.

В присутствии магнитного поля статсумма

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp \left(K \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j \sigma_{j+1} + \mu_0 H \sum_{j=1}^N \sigma_j \right) \quad (54)$$

непосредственно вычислена быть не может. Удобно отождествить 1-й и N-й узлы. В макроскопическом пределе это не сказывается на термодинамических свойствах системы.

Для расчета статсуммы введем матрицу P второго порядка с матричными элементами

$$P(\sigma_j, \sigma_{j+1}) = \exp(K\sigma_j\sigma_{j+1} + \mu_0 H \sigma_j). \quad (55)$$

Здесь $\sigma_j = \pm 1$ определяет две строки, а $\sigma_{j+1} = \pm 1$ два столбца матрицы P . Тогда

$$P = \begin{pmatrix} \exp(K+M) & \exp(-K+M) \\ \exp(-K-M) & \exp(K-M) \end{pmatrix}. \quad (56)$$

Обозначим матричные элементы через $P(\sigma, \sigma')$. Это позволяет записать статсумму в виде

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-1}=\pm 1} P(\sigma_1, \sigma_2) P(\sigma_2, \sigma_3) \dots \quad (57)$$

$$\dots \sum_{\sigma_{N-1}=\pm 1} P(\sigma_{N-1}, \sigma_N) P(\sigma_N, \sigma_1) = SpP^N = \sum_j \lambda_j^N, \quad (58)$$

где λ_j - собственные значения матрицы P . Секулярное уравнение для нахождения λ_j имеет вид

$$(\exp(K+M) - \lambda)(\exp(K-M) - \lambda) = e^{-2K} \quad (59)$$

которое переписывается в виде

$$\lambda^2 - 2\lambda \exp KchM - e^{-2K} = 0 \quad (60)$$

Откуда

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = e^{KchM} \pm (e^{2K} sh^2M + e^{-2K})^{1/2}. \quad (61)$$

При $N \rightarrow \infty$ в окончательном выражении для сатсуммы (58) следует оставить только большее λ_{\max} . Поэтому

$$Z = \lambda_{\max}^N \quad (62)$$

свободная энергия дается выражением

$$F = -TN \ln \lambda_{\max}$$

Знание свободной энергии полностью решает поставленную термодинамическую задачу. Например, намагниченность на один узел равна

$$\frac{M}{N} = -\frac{\partial F}{\partial \mathcal{H}} = -T \frac{\partial \ln \lambda_{\max}}{\partial H}$$

12.5 Теорема Голдстоуна и спиновые волны

Некоторые вещества в основном состоянии обладают так называемым дальним порядком. Этот порядок характеризуется параметром порядка $M_\alpha(\vec{r})$ - n -компонентной физической величиной, коррелятор которой $\langle M_\alpha(\vec{r}), M_\alpha(\vec{r}') \rangle$ остается конечным при неограниченном увеличении расстояния $|\vec{r} - \vec{r}'|$. Например, ферромагнетик характеризуется трехмерным вектором намагниченности \vec{M} , который имеет одинаковую величину и направление во всех точках ферромагнитного тела. У сегнетоэлектриков параметром порядка является вектор электрической поляризации, у сверхпроводников - щель электронного спектра, в основном состоянии неидеального бозе газа роль параметра порядка играет волновая функция когерентного состояния. Мы, для конкретности, будем говорить об изотропном ферромагнетике, для которого $n = 3$. Существенно, что энергия ферромагнетика в отсутствии магнитного поля не зависит от направления намагниченности. Это свойство называется вырождением основного состояния. Направление вектора намагниченности характеризуется двумя углами (полярным и азимутальным). Это означает, что степень вырождения $\nu = 2$. Слабовозбужденные состояния ферромагнетика описываются колебаниями намагниченности со спектром $\varepsilon(\vec{q})$. Каждому волновому вектору \vec{q} отвечают три возможных поляризации - три моды - спиновых волн.

Теорема Голдстоуна утверждает, что в веществе, которое характеризуется n -компонентным параметром порядка и имеет степень вырождения ν , по крайней мере ν безщелевых мод колебаний. Значит в ферромагнетике есть по крайней мере две безщелевых моды спиновых волн.

Будем описывать слабовозбужденные состояния функционалом свободной энергии Ландау:

$$F = \int d^3r \left[U(M) + \frac{1}{2}g \sum_j (\nabla M_j)^2 \right] \quad (63)$$

Плотность энергии $U(M)$ изотропного ферромагнетика зависит только от M^2 и должна принимать минимальное значение при величине спонтанной намагниченности M_0 . В качестве примера примем

$$U(M) = \frac{1}{2}b(M^2 - M_0^2)^2$$

Последний член в (63) простейшим образом описывает тот факт, что переход от однородного состояния к неоднородному приводит к увеличению энергии тела.

Запишем свободную энергию (63) в квадратичном приближении по амплитуде отклонения параметра M от равновесного значения

$$\psi = M - M_0:$$

$$F = \int d^3r \left[U(M_0) + 2b \left(\vec{M}_0 \vec{\psi} \right)^2 + \frac{1}{2}g \sum_j (\nabla \psi_j)^2 \right]. \quad (64)$$

Подставим сюда разложение возбуждения по плоским волнам $\psi = \sum_q \psi_q \exp(i\vec{q}\vec{r})$ и проинтегрируем по объему тела V :

$$\delta F = V \sum_q \left[2b \left| \left(\vec{M}_0 \vec{\psi}(q) \right) \right|^2 + \frac{1}{2}gq^2 \sum_j |\psi_j(q)|^2 \right]. \quad (65)$$

Рассмотрим продольные возбуждения, для которых $\left(\vec{M}_0 \vec{\psi}(q) \right) = M_0 \psi(q)$. В этом случае

$$\delta F = V \sum_q \left[2bM_0 + \frac{1}{2}gq^2 \right] |\psi(q)|^2. \quad (66)$$

Величина $|\psi(q)|^2$ есть интенсивность возбуждений с волновым вектором q . Поэтому функция

$$\varepsilon_{\parallel} = \left[2bM_0 + \frac{1}{2}gq^2 \right], \quad (67)$$

характеризует вклад этих возбуждений в энергию тела. В пределе длинных волн ($q \rightarrow 0$) эта энергия не исчезает. Такая зависимость энергии возбуждений от волнового вектора называется спектром со щелью.

Для двух поляризаций поперечных возбуждений, перпендикулярных к вектору спонтанной поляризации $\left(\vec{M}_0 \vec{\psi}(q) \right) = 0$, имеем

$$\delta F = V \sum_{q,j=1,2} \frac{1}{2}gq^2 |\psi(q)|^2. \quad (68)$$

Спектр энергии поперечных возбуждений

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{1}{2}gq^2 \quad (69)$$

является безщелевым. Таким образом, ферромагнетик имеет одну моду спиновых волн со щелью и две безщелевых моды.

Теперь сформулируем теорему Голдстоуна в общем виде. Пусть имеется многокомпонентное действительное поле $\varphi_j(t, \vec{r})$, $j = 1 \div n$, свободная энергия которого имеет вид

$$F = \int d^3r \left[U(\varphi) + \frac{1}{2}g \sum_j (\nabla \varphi_j)^2 \right], \quad g \geq 0. \quad (70)$$

Предполагается, что система обладает некоторой симметрией, т.е. существует хотя бы одно бесконечно малое (непрерывное) преобразование поля, которое не меняет величину потенциальной энергии

$$U(\varphi + \delta\varphi^s) = U(\varphi), \quad s = 1 \div \nu \quad (71)$$

$$\delta\varphi_i^s = i\varepsilon I_{ij}^s \varphi_j, \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad (72)$$

Число ν независимых преобразований (эрмитовых матриц) I_{ik}^s , не меняющих энергию, характеризует **размерность** симметрии потенциальной энергии - размерность вырождения. Пусть поле $\eta_j(t, \vec{r})$ есть одно из основных состояний системы, которое обладает минимальной энергией:

$$U(\eta) = \min U(\eta) \quad (73)$$

Основное состояние системы задано неоднозначно. Имеется множество полей с той же энергией, связанных преобразованиями (71):

$$\delta\eta_i^s = i\varepsilon I_{ij}^s \eta_j \quad (74)$$

Множество этих полей называется ν -кратно вырожденным вакуумом..

Рассмотрим слабое возбуждение основного состояния, представленное в форме разложения по плоским волнам

$$\varphi_i = \eta_i + \psi_i, \quad \psi_i = \sum_q \psi_i(q) \exp(iqr) \quad (75)$$

Подставим это разложение в функционал (70) и ограничимся квадратичным приближением по возбуждениям

$$\delta F = \int d^3r \left[\frac{1}{2} U_{ij} \psi_i \psi_j + \frac{1}{2} g (\nabla \psi_j)^2 \right] \quad (76)$$

$$= V \sum_q \left[\frac{1}{2} U_{ij} \psi_i^*(q) \psi_j(q) + \frac{1}{2} g q^2 \psi_j^*(q) \psi_j(q) \right] \quad (77)$$

Матрица

$$U_{ij} = \left[\frac{\partial^2 U}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j} \right]_{\psi=\eta} \quad (78)$$

есть квадратная $n \times n$ - рядная матрица, которая обладает n собственными векторами

$$U_{ij} e_j^a = \lambda^a e_i^a, \quad (79)$$

$$e_i^a e_i^{a'} = \delta^{aa'}, \quad a = 1 \div n \quad (80)$$

Разложим поля $\psi_j(q)$ по этим векторам

$$\psi_j(q) = \sum_a \psi^a(q) e_j^a \quad (81)$$

и получим

$$\delta F = V \sum_{qa} \left[\frac{1}{2} \lambda^a + \frac{1}{2} g q^2 \right] |\psi^a(q)|^2 \quad (82)$$

В результате свободная энергия распалась на независимые члены. Коэффициенты

$$\varepsilon^a(q) = \frac{1}{2} \lambda^a + \frac{1}{2} g q^2 \quad (83)$$

имеют смысл энергии одной из n мод возбуждений с заданным волновым вектором \vec{q} . Энергия этих возбуждений при $\vec{q} \rightarrow 0$ должна быть неотрицательной.

$$\lambda^a \geq 0 \quad (84)$$

Докажем, что некоторые из мод имеют безщелевой спектр, т.е. $\lambda^a = 0$.
Уравнение симметрии (71)

$$U(\varphi + \delta\varphi^s) = U(\varphi), \quad (85)$$

можно переписать в форме:

$$\frac{\partial U(\varphi)}{\partial \varphi_j} \delta\varphi_j^s = 0$$

Дифференцируя это соотношение по φ_i , находим

$$\frac{\partial U(\varphi)}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j} \delta\varphi_j^s + \frac{\partial U(\varphi)}{\partial \varphi_j} \frac{\delta\varphi_j^s}{\partial \varphi_i} = 0 \quad (86)$$

В основном состоянии имеем (78) и $\left[\frac{\partial U(\varphi)}{\partial \varphi_j} \right]_{\varphi=\eta} = 0$. Отсюда следует, что для основного состояния уравнение (86) содержит только первый член

$$U_{ij} \delta\eta_j^s = 0 \quad (87)$$

Подставим сюда (74) и сократим на $i\varepsilon$:

$$U_{ij} I_{ij}^s \eta_j = 0 \quad (88)$$

Из этого выражения следует, что существуют ν векторов, равных

$$e_i^s = \text{const} * I_{ij}^s \eta_j, \quad s = 1 \div \nu.$$

которые, согласно определению (79), являются собственными векторами матрицы U_{ij} с нулевыми собственными значениями.

Таким образом, по крайней мере ν из n линейно независимых возбуждений вида $\psi_j(q) = \psi^s(q) e_j^s$ имеют безщелевой спектр

$$\varepsilon^s(q) = \frac{1}{2} g q^2, \quad s = 1 \div \nu. \quad (89)$$

Теорема Голдстоуна доказана.

13 Лекция 13. Сверхпроводимость I - феноменология

13.1 Введение

Самым интересным явлением в физике твердого тела является сверхпроводимость. Сверхпроводимость – это сверхтекучесть электронной ферми-жидкости, наблюдаемая при низких температурах в некоторых металлах и соединениях. Сверхпроводимость была открыта Камерлинг-Оннесом в 1911 г. При изучении электросопротивления ртути Камерлинг-Оннес обнаружил, что при температуре около $4K$ сопротивление внезапно исчезало. Существенно, что это происходило скачком. Это явление было названо сверхпроводимостью. Современная техника позволяет установить, что в этом состоянии сопротивление отсутствует по крайней мере с точностью до 10^{-24} Ом·см. Для сравнения укажем, что сопротивление очень чистой меди при температуре $4.2K$ имеет порядок 10^{-9} Ом·см. Позднее было установлено, что сверхпроводимость можно разрушить не только нагреванием, но и при помещении образца в сравнительно слабое магнитное поле. Пусть T_c - температура, при которой массивный образец переходит в сверхпроводящее состояние в нулевом магнитном поле, а $H_{cm}(0)$ - критическое магнитное поле, которое разрушает сверхпроводимость при температуре $T = 0$. Экспериментально было установлено, что зависимость критического магнитного поля от температуры хорошо описывается эмпирической формулой

$$H_c(T) = H_c(0) [1 - (T/T_c)^2]. \quad (1)$$

Рассмотрим, как вел бы себя *идеальный проводник* во внешнем слабом магнитном поле, которое еще не разрушает идеальную проводимость. Пусть сначала образец находится в состоянии с конечным сопротивлением, то есть при температуре выше T_c в магнитном поле. Тогда магнитное поле прекрасно проникает в проводник и в нем $\mathbf{V} \neq 0$. При охлаждении образца ниже температуры T_c в идеальном проводнике $\rho = 0$. Поэтому электрическое поле $\mathbf{E} = \rho \mathbf{j} = 0$, поскольку ток \mathbf{j} – конечен. Тогда из уравнения Максвелла

$$\text{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t}$$

следует, что магнитная индукция в идеальном проводнике $\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = 0$ и, следовательно, $\mathbf{V} = \text{const} \neq 0$.

Более 20 лет считалось, что сверхпроводник – это просто идеальный проводник, металл с нулевым сопротивлением. В 1933 году Мейсснер и Оксенфельд экспериментально показали, что при $T < T_c$ в магнитных полях, удовлетворяющих условию $H < H_c(T)$ (см. (1)), всегда в образце магнитная индукция $\mathbf{V} = 0$. Это есть основное отличие идеального проводника от сверхпроводника: при охлаждении сверхпроводника, находящегося в магнитном поле, до температуры T_c магнитное поле из него выталкивается. Итак, ниже T_c сверхпроводник это не только идеальный проводник, но и идеальный диамагнетик и сверхпроводящее состояние

удовлетворяет условиям

$$\rho = 0, \quad (2)$$

$$\mathbf{B} = 0. \quad (3)$$

13.2 Магнитные свойства сверхпроводников

В зависимости от того, как откликаются сверхпроводники на приложенное магнитное поле, они делятся на два класса. Это сверхпроводники *первого* и *второго* рода. К сверхпроводникам первого рода относятся все металлы кроме ниобия. Для них имеет место эффект Мейсснера-Оксенфельда.

13.2.1 Магнитные свойства сверхпроводников первого рода

Магнитные свойства вещества зависят не только от материала, но и от формы образца. В данном курсе лекций мы, в основном, будем рассматривать цилиндрический образец в продольном магнитном поле. Это позволит выявить практически все особенности поведения сверхпроводника в магнитном поле, и в то же время существенно упростить выкладки.

Итак, поместим длинный массивный цилиндр из сверхпроводника первого рода во внешнее однородное магнитное поле. Внутри сверхпроводника магнитная индукция $B = 0$. Во внешнем поле единица объема цилиндра обладает намагниченностью \mathbf{M} . Поэтому магнитное поле \mathbf{H} внутри сверхпроводника находится из условия $\mathbf{B} = \mathbf{H} + 4\pi\mathbf{M} = 0$. Известно, что тангенициальная составляющая магнитного поля непрерывна. Поэтому в рассматриваемой геометрии магнитное поле *внутри* сверхпроводника совпадает с внешним магнитным полем. Следовательно, магнитный момент связан с *внешним* магнитным полем \mathbf{H} соотношением

$$\mathbf{M} = -\mathbf{H}/4\pi. \quad (4)$$

Появление ненулевого магнитного момента \mathbf{M} означает, что в сверхпроводнике текут замкнутые *незатухающие* токи, ответственные за эффект Мейсснера-Оксенфельда. Поскольку внутри сверхпроводника $\mathbf{B} = 0$, то из уравнения Максвелла $\text{rot}\mathbf{B} = (4\pi/c)\mathbf{j}$ следует, что внутри сверхпроводника нет объемного тока, $\mathbf{j} = \mathbf{0}$. Поэтому упомянутые незатухающие токи текут, только по поверхности сверхпроводника.

Строго говоря, как эксперимент, так и теория обнаруживают, что магнитное поле фактически проникает в сверхпроводник первого рода на глубину λ по закону $\exp(-x/\lambda)$. Это же касается упомянутых выше незатухающих токов, ответственных за диамагнетизм сверхпроводника – они текут в поверхностном слое толщиной λ .

Заметим, что в односвязном сверхпроводнике (например сплошном цилиндре) токи могут течь по поверхности сверхпроводника только во внешнем магнитном поле. Если бы это было не так, то при снятии внешнего магнитного поля, эти токи приводили бы к ненулевому магнитному полю внутри образца.

13.2.2 Магнитные свойства сверхпроводников второго рода.

В отличие от сверхпроводников первого рода, сверхпроводники второго рода не обнаруживают полного эффекта Мейсснера-Оксенфельда. Возьмем длинный массивный цилиндр из сверхпроводника второго рода и поместим его в продольное внешнее магнитное поле. При увеличении этого поля от нуля до некоторого значения H_{c1} , называемого *первым критическим*, индукция внутри цилиндра равна нулю, т.е. поле выталкивается из сверхпроводника. При дальнейшем увеличении магнитного поля оно начинает проникать в сверхпроводник, но весьма своеобразным образом. Вначале образуются так называемые квантовые вихревые нити или, просто, *вихри*. Каждая из них представляет собой очень тонкую цилиндрическую сердцевину, находящуюся в *нормальном* состоянии. Радиус этой сердцевины ξ по порядку величины равен размеру волнового пакета электронов, несущих сверхток (физический смысл этого параметра, подробнее будет обсуждаться в последующих разделах). Ось цилиндра параллельна внешнему полю. Вокруг нормальной сердцевины циркулирует незатухающий ток. Создаваемое им магнитное поле направлено так же, как и внешнее магнитное поле. С увеличением внешнего магнитного поля H от H_{c1} до H_{c2} , называемого *вторым критическим полем*, плотность вихрей увеличивается. (два рисунка, на первом в поле H_{c1} $\xi \ll a$, на втором – в поле H_{c2} , $\xi \sim a$, a – постоянная треугольной решетки). Когда внешнее магнитное поле достигает значения H_{c2} , плотность вихрей такова, что размер вихря по порядку величины сравняется с расстоянием между вихрями. При этом весь образец переходит в нормальное состояние. Состояние сверхпроводника второго рода при $H_{c1} < H < H_{c2}$ называется *смешанным* или *вихревым*. Однако и при $H > H_{c2}$ сверхпроводимость сохраняется в тонком поверхностном слое вплоть до достижения внешним полем значения $H_{c3} = 1.69H_{c2}$.

13.3 Термодинамика сверхпроводников

13.3.1 Критическое поле для сверхпроводника первого рода³.

Логика: Сначала 1)напомнить термодинамику в поле- 2)слабое поле, 3)потом о родах и сильное поле и крит. поля

Рассмотрим металлический цилиндр в однородном продольном магнитном поле. Свободная энергия системы есть свободная энергия цилиндра в отсутствие магнитного поля + энергия поля (в отсутствие цилиндра) + энергия взаимодействия цилиндра с полем. Свободную энергию системы будем отсчитывать от состояния в котором имеется только поле. Тогда плотность энергии нормального цилиндра есть F_n . Будем охлаждать систему до тех пор, пока цилиндр не перейдет в сверхпроводящее состояние. Тогда его магнитный момент станет равным $\mathbf{M} = -\mathbf{H}/4\pi$ (см. (4)). Для энергии этого цилиндра в магнитном поле

$$dE_m = -\mathbf{M}d\mathbf{H} = \frac{HdH}{4\pi}.$$

³Обратим внимание, что в этом разделе мы не интересуемся приповерхностными эффектами в слое толщиной порядка глубины проникновения λ . Поэтому, естественно, размер образца $L \gg \lambda$ и полученные соотношения имеют точность λ/L .

Поэтому

$$E_m = H^2/8\pi = \frac{MH}{2}. \quad (5)$$

Пусть F_{s0} – свободная энергия сверхпроводника в нулевом магнитном поле. Тогда $F_{sH} = F_{s0} + H^2/8\pi$ – свободная энергия сверхпроводника в магнитном поле. Очевидно, что в равновесии

$$F_n = F_{sH}.$$

Это имеет место при критическом поле H_c :

$$F_n - F_{s0} = H_c^2/8\pi \quad (6)$$

Итак, в *нулевом внешнем магнитном поле* внутренняя энергия сверхпроводника меньше энергии нормального состояния (при той же температуре и объеме) на величину $H_c^2/8\pi$. При включении внешнего магнитного поля, появление магнитного момента у сверхпроводящего металла приводит к увеличению его энергии на величину (5). До тех пор, пока $H_0 < H_c$, сверхпроводнику выгодно оставаться в сверхпроводящем состоянии. Поле H_c называют критическим термодинамическим магнитным полем. Обратим внимание, что конечно же, это поле есть свойство только материала.

13.3.2 Энтропия и теплоемкость сверхпроводника

Из термодинамики известно, что энтропия

$$S = -(\partial F/\partial T)_V. \quad (7)$$

Из (6) и (7) следует, что

$$S_s - S_n = \frac{H_c}{4\pi} \left(\frac{\partial H_c}{\partial T} \right)_V. \quad (8)$$

S_s и S_n – энтропии сверхпроводящего и нормального состояния, соответственно. Из (1), описывающего эксперимент, следует, что $\frac{\partial H_c}{\partial T} < 0$, то есть сверхпроводящее состояние обладает меньшей энтропией. Это означает, что сверхпроводящее состояние является чем-то более упорядоченным, чем нормальное. Это наталкивает на мысль описывать переход в сверхпроводящее состояние как фазовый переход в духе теории Ландау. (**см. соответствующую главу**).

При $T = T_c$ магнитное поле $H_c = 0$. Тогда $S_s - S_n = 0$. Следовательно, переход в сверхпроводящее состояние в этом случае является фазовым переходом *второго рода*. При $T < T_c$, имеет место скачок энтропии, то есть при переходе в сверхпроводящее состояние из нормального скрытая теплота выделяется, и наоборот, при переходе из сверхпроводящего в нормальное – поглощается. Это – переход первого рода.

Удельная теплоемкость $C = T(\partial S/\partial T)$. Из выражения (8) следует, что

$$C_s - C_n = \frac{T}{4\pi} \left[\left(\frac{\partial H_c}{\partial T} \right)^2 + H_c \frac{\partial^2 H_c}{\partial T^2} \right]. \quad (9)$$

При $T = T_c$ поле $H_c = 0$. Тогда из (9) следует формула Рутгерса

$$C_s - C_n = \frac{T_c}{4\pi} \left(\frac{\partial H_{cm}}{\partial T} \right)_{T_c}^2. \quad (10)$$

Итак, в отсутствие внешнего поля имеет место скачок теплоемкости, причем в состоянии с большей энтропией (сверхпроводящем состоянии) теплоемкость больше. Это соответствует теории фазовых переходов Ландау.

13.4 Термодинамические потенциалы

Макроскопическая электродинамика описывает электромагнитные поля в веществе, усредненные по временам, много большим времени изменения молекулярных полей τ_a и по расстояниям, много большим межатомных расстояний a . Поэтому макроскопическая электродинамика описывает низкочастотные и длинноволновые поля, удовлетворяющие условиям

$$\omega \ll \frac{1}{\tau_a}, a \ll \lambda$$

Магнитной индукцией в веществе называется усредненная по достаточно большим временам и размерам полная напряженность магнитного поля – сумма внешнего магнитного поля и молекулярного поля. При изменении внешнего магнитного поля происходит изменение магнитной индукции внутри тела $\delta \mathbf{B}$. При этом изменение энергии системы магнитное поле + тело

$$\delta R = \frac{1}{4\pi} \int dV \mathbf{H} \delta \mathbf{B}. \quad (11)$$

Входящий в это выражение параметр \mathbf{H} называется напряженностью магнитного поля в веществе. Он не обязательно совпадает с внешним магнитным полем. Совпадение, например, имеет место в случае длинного цилиндра в продольном внешнем магнитном поле. В соответствии с теоремой о малых добавках, в равновесии для свободной энергии \mathcal{F} имеем

$$\delta \mathcal{F} = -S \delta T - p \delta V + \frac{1}{4\pi} \int dV \mathbf{H} \delta \mathbf{B}.$$

Обратим внимание, что \mathcal{F} включает в себя полную магнитную энергию системы поле+тело. Определенный таким образом термодинамический потенциал $\mathcal{F}(T, V, \mathbf{B})$ в равновесии имеет минимум. Предположим, что мы хотим измерять теплоемкость при заданных значениях T, V, \mathbf{B} . На эксперименте контролировать значение магнитной индукции \mathbf{B} внутри тела неудобно, а в случае тел с нецилиндрической геометрией попросту невозможно. Фактически эксперимент проводится в заданном внешнем магнитном поле.

Для исследования термодинамики сверхпроводника в таких условиях введем термодинамический потенциал

$$\mathcal{G} = \mathcal{F} - \int dV \frac{\mathbf{H} \mathbf{B}}{4\pi}. \quad (12)$$

Этот прием в теоретической механике назывался преобразованием Лежандра. Тогда

$$\delta\mathcal{G} = -S\delta T - \frac{1}{4\pi} \int dV \mathbf{B} \delta \mathbf{H}. \quad (13)$$

В соответствии с общими принципами термодинамики именно этот потенциал имеет минимум при заданных температуре T , объеме и магнитном поле \mathbf{H} . Напомним лишний раз, что в формуле (13) \mathbf{H} – магнитное поле *внутри образца*. В случае цилиндрической геометрии в продольном магнитном поле напряженность магнитного поля в веществе совпадает с напряженностью внешнего магнитного поля.

Полезно также ввести плотность потенциала \mathcal{G} :

$$G = F - \frac{\mathbf{H}\mathbf{B}}{4\pi} \quad (14)$$

В случае других геометрий для описания термодинамики вещества во внешнем магнитном поле вводят другие термодинамические потенциалы. Например

$$\tilde{\mathcal{G}} = \mathcal{F} - \frac{\mathbf{H}_0 \mathbf{M}}{2},$$

где \mathbf{H}_0 – внешнее магнитное поле, а \mathbf{M} – *полный* магнитный момент образца. Использование этой формулы выходит за рамки данного курса.

В разделе термодинамика доказать следующее

Для простоты считаем тело однородным. Рассмотрим некоторый термодинамический потенциал, например свободную энергию F . Она является функцией объема, энтропии, и магнитной индукции внутри тела B . Если поле B постоянно, то свободная энергия F имеет минимум. В *равновесии*, при малом изменении B для изменения свободной энергии имеем

$$dF = SdT - pdV + HdB/4\pi.$$

Если равновесия нет, то

$$\delta F \leq S\delta T - p\delta V + H\delta B/4\pi.$$

Пусть процессы в теле происходят таким образом, что постоянны H , T и V . Из последнего соотношения следует, что

$$d(F - HB/4\pi) \leq 0$$

Поэтому в теле могут происходить только такие процессы, что потенциал $F - HB$ может только уменьшаться и в состоянии равновесия он имеет минимум

Как правило теоретики выводят (либо постулируют) вид свободной энергии \mathcal{F} , как функции магнитной индукции \mathbf{B} . В тоже время, экспериментаторы работают с системами, помещенными во внешнем поле, которым они и управляют. Если образец – длинный цилиндр, то магнитное поле внутри образца численно равно внешнему магнитному полю. Тогда в условиях эксперимента минимум имеет потенциал \mathcal{G} .

Поэтому схема вычислений такова. Берется потенциал \mathcal{F} . Преобразованием Лежандра он приводится к виду \mathcal{G} (12) являющимся функционалом от магнитной индукции \mathbf{B} . Температура, напряженность (внешнего) магнитного поля, объем (давление) считаются заданными. Далее ищется находится экстремум \mathcal{G} . В результате получается распределение магнитной индукции в образце, что и требуется.

13.5 Уравнение Лондонов

Опишем простейшую физическую модель, приводящую к эффекту Мейсснера. В рамках макроскопической электродинамики имеем

$$\operatorname{rot}\mathbf{B} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}_s, \quad (15)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{B} = 0. \quad (16)$$

Запишем полную свободную энергию сверхпроводника в виде

$$\mathcal{F} = \int F_s dV + E_{kin} + E_{mag}. \quad (17)$$

здесь F_s – плотность свободной энергии сверхпроводящих электронов в отсутствие тока, E_{kin} – кинетическая энергия электронов, ответственных за сверхпроводящий ток:

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \int n_s m v^2 dV.$$

Из уравнения (15) имеем

$$\mathbf{j}_s(\mathbf{r}) = n_s e \mathbf{v}(\mathbf{r}) = \frac{c}{4\pi} \operatorname{rot}\mathbf{B}.$$

Тогда

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \int n_s m \left(\frac{c}{4\pi n_s e} \operatorname{rot}\mathbf{B} \right)^2 dV, \quad (18)$$

Магнитная энергия

$$E_{mag} = \int \frac{\mathbf{B}^2}{8\pi} dV, \quad (19)$$

связана с энергией магнитного поля, индуцированного сверхпроводящими токами. Здесь m, e – соответственно масса и заряд электрона, n_s – концентрация сверхпроводящих электронов. Из (17), (18), (19) следует, что

$$\mathcal{F} = \int dV \left[\mathcal{F}_s + \frac{1}{8\pi} (\mathbf{B}^2 + \lambda_L^2 (\operatorname{rot}\mathbf{B})^2) \right], \quad (20)$$

где

$$\lambda_L = \left(\frac{mc^2}{4\pi n_s e^2} \right)^{1/2}. \quad (21)$$

Проварьируем свободную энергию по магнитному полю \mathbf{h} :

$$\delta\mathcal{F} = \frac{1}{4\pi} \int (\mathbf{B}\delta\mathbf{B} + \lambda_L^2 \text{rot}\mathbf{B} \cdot \text{rot}\delta\mathbf{B}) dr. \quad (22)$$

Второй член в (22) преобразуем, используя формулу

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \text{rot } \mathbf{b} &= \mathbf{b} \text{rot } \mathbf{a} - \text{div} [\mathbf{a} \times \mathbf{b}], \\ \mathbf{a} &= \text{rot}\mathbf{B}, \quad \mathbf{b} = \delta\mathbf{B}. \end{aligned}$$

Тогда

$$\text{rot}\mathbf{B} \cdot \text{rot}\delta\mathbf{B} = \delta\mathbf{B} \text{rot}\mathbf{B} \cdot \text{rot}\text{rot}\mathbf{B} - \text{div} [\text{rot}\mathbf{B} \times \delta\mathbf{B}] \quad (23)$$

Учтем, что член с дивергенцией преобразуется в поверхностный интеграл, равный нулю (так как на поверхности равна нулю вариация $\delta\mathbf{B}$)⁴. Тогда оставшееся объемный интеграл должен равняться нулю при произвольном $\delta\mathbf{B}$ внутри тела. Поэтому

$$\mathbf{B} + \lambda_L^2 \text{rot rot}\mathbf{B} = 0. \quad (24)$$

Это уравнение называется *уравнением Лондонов* и является следствием существования незатухающих токов.

13.6 Эффект Мейсснера

Покажем теперь, как из уравнения Лондонов следует эффект Мейсснера. Ограничившись рассмотрением цилиндра большого радиуса, его границу можно считать полоской. Пусть продольное внешнее магнитное поле B_0 направлено по оси z , а нормаль к поверхности сверхпроводника направлена по оси x (см. сноску на этой странице). Тогда уравнение Лондонов (24) переписывается в виде :

$$B_z - \lambda_L^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} B_z = 0.$$

Магнитная индукция, конечная внутри сверхпроводника, имеет вид

$$B_x = B(0) e^{-\frac{x}{\lambda_L}} = B_0 e^{-\frac{x}{\lambda_L}}, \quad (25)$$

⁴На малых расстояниях от поверхности последнюю можно считать *плоской*. Докажем, что непрерывна тангенциальная составляющая магнитной индукции. Направим ось x вдоль поверхности. Тогда тангенциальная составляющая есть B_x . Пусть нормаль к поверхности направлена по оси z . Тогда магнитная индукция может зависеть только от z . Поэтому $\text{rot}\mathbf{B} = -\mathbf{e}_y \frac{\partial B_x}{\partial z}$. Поскольку внутри сверхпроводника плотность поверхностного тока, во всяком случае, конечна, а вне его равна нулю, то из уравнения Максвелла (15) следует, что конечна производная $\frac{\partial B_x}{\partial z}$. Вне сверхпроводника магнитная индукция совпадает с внешним магнитным полем. Конечность производной означает непрерывность соответствующей величины. Таким образом, в рассматриваемом случае на поверхности сверхпроводника тангенциальная составляющая магнитной индукции непрерывна. Эти рассуждения не отменяют непрерывности нормальной составляющей магнитной индукции, следующей из уравнения $\text{div}\mathbf{B} = 0$. Итак, на поверхности сверхпроводника непрерывна магнитная индукция.

Поскольку нас интересует минимум свободной энергии в заданном внешнем магнитном поле (совпадающем вне сверхпроводника с магнитной индукцией), то при варьировании магнитной индукции следует считать, что на поверхности $\delta\mathbf{B} = 0$. Поэтому поверхностный интеграл обращается в нуль .

что описывает эффект Мейсснера.

Во избежание недоразумений напомним, что в макроскопической электродинамике, непрерывными являюся тангенциальная составляющая напряженности магнитного поля и нормальная составляющая магнитной индукции. При этом тангенциальная составляющая магнитной индукции может, вообще говоря иметь скачок, связанный с существованием поверхностных токов. Если интересоваться масштабами, много большими глубины проникновения, масштаб λ следует считать бесконечно малым. Это приводит к тому что плотность сверхпроводящих токов обращается в бесконечность и их следует рассматривать как поверхностные. Наличие поверхностных токов приводит к скачку тангенциальной составляющей магнитной индукции. Заметим попутно, что при таком рассмотрении не определена напряженность магнитного поля внутри сверхпроводника. В самом деле, магнитное поле определяется как вариация энергии по магнитной индукции (см. (11)). В сверхпроводнике $B \equiv 0$. Поэтому вариационная производная не определена.

Из уравнений (24), (21) и (15) имеем

$$\text{rot} \mathbf{j}_s = -\frac{ne^2}{mc} \mathbf{B}$$

Введем потенциал \mathbf{A}

$$\mathbf{B} = \text{rot} \mathbf{A}.$$

Этот потенциал определен неоднозначно, с точностью до градиента некоторой функции $\nabla \phi$. Тогда

$$\mathbf{j}_s = -\frac{ne^2}{mc} (\mathbf{A}' - \nabla \phi),$$

\mathbf{A}' – один из возможных потенциалов. Если потребовать, чтобы $\text{div} \mathbf{j}_s = \mathbf{0}$, то $\text{div}(\mathbf{A}' - \nabla \phi) = 0$. Поэтому можно вектор-потенциал выбрать так, чтобы

$$\text{div} \mathbf{A} = \mathbf{0}.$$

Такой выбор потенциала \mathbf{A} называется лондоновской калибровкой. В этой калибровке получаем

$$\mathbf{j}_s = -\frac{ne^2}{mc} \mathbf{A}. \quad (26)$$

Из уравнения Максвелла следует, что

$$\mathbf{j} = \frac{c}{4\pi} \text{rot rot} \mathbf{A}$$

Подставляя это выражение в уравнение Лондонов в форме (26) получим еще одну форму уравнения Лондонов

$$\text{rot rot} \mathbf{A} = -\frac{1}{\lambda_L^2} \mathbf{A}, \quad \lambda_L = \frac{4\pi ne^2}{c mc}. \quad (27)$$

Итак, характерный масштаб затухания магнитного поля и токов в глубь сверхпроводника определяется параметром λ_L , называемым лондоновской глубиной проникновения.

Обсудим теперь основные недостатки теории Лондонов.

В первую очередь, обратим внимание, что уравнение (26) не является калибровочно инвариантным. Это основной, так сказать, "фундаментальный" недостаток теории Лондонов. Но из теории Лондонов следует, что во внешнем магнитном поле сверхпроводнику *всегда* термодинамически выгодно расслоиться на максимально мелкую сеть чередующихся нормальных и сверхпроводящих областей – так называемое промежуточное состояние. Это означает, что на границе поверхностное натяжение $\sigma_{ns} < 0$. Докажем это, используя уравнение Лондонов.

Пусть образец находится во внешнем магнитном поле. Для простоты рассмотрим плоскую NS -границу между нормальной и сверхпроводящей частями образца. Граница расположена перпендикулярно оси x . В левом полупространстве $x < 0$ имеем сверхпроводник, справа при $x > 0$ – нормальный металл. Металл считаем немагнитным. Поэтому в нем магнитная индукция равна магнитному полю.

Из условия сосуществования нормальной и сверхпроводящей фаз следует, что в нормальной фазе *автоматически* устанавливается магнитное поле $H = H_c$. Поэтому можно считать, что мы имеем дело с образцом находящимся в *заданном* внешнем поле напряженностью H_c . Тогда минимум должен иметь термодинамический потенциал G (см. (14)):

$$G = F - \frac{\mathbf{B}\mathbf{H}_c}{4\pi}.$$

Вдали от границы (где $\mathbf{B} = 0!$) в сверхпроводящей части имеем

$$G_s = F_s(\mathbf{B}) - \frac{\mathbf{B}\mathbf{H}_c}{4\pi} \Big|_{\mathbf{B}=0} = F_{s0}. \quad (28)$$

Вдали от границы в нормальной фазе $H = B = H_c$. Поэтому

$$G_n = F_n + \frac{\mathbf{B}^2}{8\pi} - \frac{\mathbf{B}\mathbf{H}_c}{4\pi} = F_n - \frac{\mathbf{H}_c^2}{8\pi}. \quad (29)$$

Учитывая (6), получаем, что, как и следовало ожидать в равновесии

$$G_s = G_n. \quad (30)$$

Магнитное поле проникает в сверхпроводник на глубину λ и изменяет свободную энергию сверхпроводящей области. Для анализа рассмотрим плоскую границу между нормальной и сверхпроводящей фазами. Напомним, что если нормальная и сверхпроводящая фазы сосуществуют только если магнитное поле в нормальной фазе равно H_c . Термодинамический потенциал Гиббса сверхпроводящего полупространства ($x > 0$) имеет вид

$$\mathcal{G} = \int_{x>0} dV \left[F_{s0} + \frac{B^2}{8\pi} - \frac{H_c B}{4\pi} + \frac{\lambda^2}{8\pi} \left(\frac{dB}{dx} \right)^2 \right]. \quad (31)$$

Здесь первый член – плотность свободной энергии Гиббса $G_s = F_{s0}$ в отсутствие магнитного поля, второй – энергия магнитного поля в сверхпроводнике, третий – аналог члена $\mathbf{H}\mathbf{B}$ в (14), последний – кинетическая энергия сверхпроводящих

токов. Если бы магнитное поле не проникало в сверхпроводник, то последние три члена обращались бы в нуль. Из решения уравнения Лондонов следует, что $B = H_c \exp(-x/\lambda)$ (см. (25)). Подставляя это выражение в (31), вычислим поправку к свободной энергии за счет частичного проникновения магнитного поля в сверхпроводник:

$$\Delta \mathcal{G} = \gamma S,$$

где S – площадь поверхности, σ – поверхностное натяжение

$$\sigma = \int_{x>0} dx \left[\frac{B^2}{8\pi} - \frac{H_c B}{4\pi} + \frac{\lambda^2}{8\pi} \left(\frac{dB}{dx} \right)^2 \right] = -\frac{H_c^2}{8\pi} \lambda. \quad (32)$$

Отсюда следует, что образование поверхности энергетически выгодно и упомянутое расслоение должно происходить всегда!

Такое расслоение действительно наблюдается, но далеко не для всех сверхпроводников и скорее является исключением, чем правилом. Если с отсутствием калибровочной инвариантности в теории Лондонов экспериментаторы еще могли смириться, то с необходимостью расслоения – нет. Пришлось теоретикам искать причину, по которой в большинстве сверхпроводников образование поверхности между сверхпроводящим и нормальным состоянием невыгодно.

Во введении мы определили сверхпроводники первого рода как вещества, в которых имеет место полный эффект Мейсснера – магнитное поле в них не проникает. Как будет показано ниже для них $\sigma > 0$. Уравнение Лондонов для них несправедливо. В противоположном случае $\sigma < 0$ мы имеем дело со сверхпроводниками второго рода, для которых имеет место смешанное (*вихревое*) состояние.

13.7 Когда справедливо уравнение Лондонов?

При выводе уравнения Лондонов мы неявно использовали, тот факт, что размер сверхпроводящих электронов много меньше глубины проникновения λ . Если это не так, и размер электрона $\xi > \lambda$, то в зоне действия магнитного поля находится только "часть электрона" и поэтому уравнение Лондонов несправедливо. Приведем простейшие физические соображения, как можно прийти к рассмотрению задачи на этом уровне.

Очевидно, что при температуре T_c за сверхпроводимость должны отвечать электроны с энергией порядка T_c . В соответствии с основными положениями теории ферми-жидкости характерный импульс сверхпроводящих электронов таков, что

$$\begin{aligned} E_F - T_c &< \frac{p^2}{2m} < E_F + T_c, \\ T_c &\ll E_F, \end{aligned}$$

где E_F – энергия Ферми. Элементарные возбуждения в такой системе представляют собой волновые пакеты шириной $\delta p \sim T_c/v_F$, где $v_F = p_F/m$. Тогда характерная протяженность волнового пакета равна

$$\xi_0 \sim \frac{\hbar v_F}{T_c}.$$

При выводе уравнения Лондонов неявно предполагалось, что этот волновой пакет *целиком* повержен влиянию внешнего магнитного поля. При этом мы получили, что магнитное поле изменяется на масштабе лондоновской глубины проникновения λ_L . Если $\xi_0 \gg \lambda_L$, то лишь малая часть волнового пакета подвержена влиянию магнитного поля. Таким образом, уравнение Лондонов справедливо если $\lambda_L \gg \xi_0$. Такие сверхпроводники называются сверхпроводниками второго рода. Парадоксально, но после открытия эффекта Мейсснера, главным образом, исследовались сверхпроводники первого рода, когда $\lambda_L \ll \xi_0$, для которых уравнение Лондонов не работает.

Оценим глубину проникновения магнитного поля λ в другом предельном случае, когда $\lambda \ll \xi_0$. В этом случае, только λ/ξ_0 часть волнового пакета подвержена влиянию магнитного поля, то есть участвует в формировании незатухающего тока. Для оценки можно считать, что это эквивалентно уменьшению концентрации n . Тогда вычисление λ можно провести тем же способом, каким получалась лондоновская глубина проникновения, но с концентрацией $n_s \lambda/\xi_0$. В результате получаем самосогласованное уравнение

$$\lambda = \left(\frac{mc^2 \xi_0}{4\pi n_s e^2 \lambda} \right)^{1/2}.$$

Отсюда следует, что

$$\lambda = \lambda_L \left(\frac{\xi_0}{\lambda_L} \right)^{1/3} \gg \lambda_L.$$

Мы видим, что квантовомеханические соображения позволяют чисто феноменологически ввести параметр ξ_0 . Пойдем немного дальше. Пусть сверхпроводящие электроны описываются некоторой эффективной волновой функцией Ψ . Квадрат модуля этой функции определяет плотность сверхпроводящих электронов. Это плотность обращается в нуль в нормальном металле и увеличиваясь на NS границе достигает своего максимального значения в толще сверхпроводника. Таким образом на границе $|\nabla\Psi|^2 \neq 0$. Из квантовой механики известно, что эта величина пропорциональна плотности кинетической энергии. Кинетическая энергия – положительна и дает положительный вклад в поверхностную энергию. Таким образом, можно ожидать, что последовательный учет неоднородности позволит изменить знак результирующего поверхностного натяжения на $\sigma > 0$ и расслоение станет невыгодным.

13.8 Связь между В и Н в промежуточном состоянии

Рассмотрим сверхпроводник *первого* рода. Казалось бы, поскольку в нем, $\sigma > 0$, то он должен находиться в *однородном* состоянии. Несложный анализ показывает, что в этом случае форма образца существенно определяет распределение магнитного поля внутри сверхпроводника.

В сверхпроводниках первого рода глубина проникновения $\lambda = 0$, если он находится во внешнем магнитном поле $H < H_c$. Рассмотрим сверхпроводящий шар, помещенный в изначально однородное магнитное поле.

Применим уравнение Максвелла $\operatorname{div}\mathbf{V} = 0$ к области, вблизи одного из полюсов. В силу симметрии задачи, в этом месте магнитное поле может быть направлено только по нормали к поверхности. Но поскольку в сверхпроводнике $\mathbf{V} = 0$, то и снаружи вблизи полюса магнитное поле $\mathbf{H} = 0$.

Рассмотрим теперь область вблизи экватора. В силу симметрии задачи магнитная индукция как внутри, так и вне шара по-прежнему может быть направлена параллельно оси, соединяющей полюса. Внутри шара $\mathbf{V} = 0$. А вне шара может существовать ненулевая тангенциальная составляющая магнитного поля. В этом случае условие $\operatorname{div}\mathbf{V} = 0$ не накладывает на внешнее *тангенциальное* поле никаких ограничений. Поэтому экваториальный участок находится в ненулевом магнитном поле. Итак, при движении вдоль меридиана, магнитное поле вблизи поверхности шара. изменяется от нуля до некоторого максимального, пропорционального исходному внешнему полю.

Будем постепенно увеличивать внешнее поле. Тогда в тот момент, когда на экваторе поле достигло значение H_c в остывших точках поверхности шара поле меньше H_c . Это означает, что экваториальная часть шара должна перейти в нормальное состояние (магнитное поле разрушило сверхпроводимость), в то время как часть шара ближе к полюсам может сохранять сверхпроводимость. То есть мы имеем сосуществование двух фаз – нормальной и сверхпроводящей. Из теории фазовых переходов следует, что это в этом случае имеет место фазовый переход *первого* рода.

Можно поставить задачу, какая часть образца находится в сверхпроводящей фазе в магнитном поле. Рассмотрим, для простоты плоскую пластинку в нормальном внешнем поле. В этом случае, сколь угодно слабое магнитное поле переводит пластину в промежуточное состояние. В самом деле, если пластина находится в однородном сверхпроводящем состоянии, то в ней $V = 0$. Очевидно, что, поскольку вне пластины $V \neq 0$, то это несовместимо с условием $\operatorname{div}\mathbf{V} = 0$. В то же время пластина не может находиться полностью в нормальном состоянии, так как проникшее в нее поле слабо, чтобы разрушить сверхпроводимость. Таким образом пластина находится в промежуточном состоянии.

Очевидно, что в нормальной фазе в равновесии напряженность магнитного поля есть H_c и совпадает в ней с магнитной индукцией. В сверхпроводящей фазе магнитная индукция равна нулю. Пусть вне образца магнитное поле, равное магнитное магнитной индукции, есть H . Тогда, в силу сохранения магнитного потока через поверхность ($\operatorname{div}\mathbf{V} = 0$!) имеем

$$H = H_c(1 - \rho),$$

где ρ – доля пластинки, находящейся в сверхпроводящем состоянии. Переход из промежуточного в нормальное состояние имеет место, если $\rho = 0$, что происходит при $H = H_c$.

Несложно показать, что длинный цилиндр из сверхпроводника первого рода в продольном магнитном поле в промежуточное состояние не переходит никогда. То есть магнитное поле в него не проникает.

13.9 Уравнение Гинзбурга – Ландау

Выше, интерпретируя эксперимент, мы установили, что в сверхпроводящем состоянии энтропия меньше, чем в нормальном (см. выражение (8)). Кроме того, скачок испытывает теплоемкость при переходе из нормального в сверхпроводящее состояние. Налицо – признаки фазового перехода второго рода. Поэтому естественно попытаться описать переход в сверхпроводящее состояние в рамках подхода Ландау (см. лекцию, в которой был приведен подход Ландау, описывающий переход в ферромагнитное состояние). Исследуя область применимости уравнения Лондонов, нам понадобилось искусственно ввести параметр ξ_0 – размер волнового пакета, носителя сверхтока. Учет изменения свойств сверхпроводника на масштабах ξ_0 натолкнул нас на возможную причину того, что $\sigma > 0$. И наконец, выражение (26) не является калибровочно инвариантным. Эти соображения дают ключ к построению последовательной теории сверхпроводимости.

В теории фазовых переходов Ландау понятие параметра порядка является определяющим. Для описания перехода в сверхпроводящее состояние Гинзбург и Ландау в качестве параметра порядка ввели макроскопическую волновую функцию сверхпроводящих электронов Ψ^5 , вообще говоря, комплексную, причем $n_s = 2|\Psi|^2$ – имеет смысл плотности сверхпроводящих электронов, равной нулю в нормальной фазе. Происхождение множителя 2 следующее. Из микроскопической теории следует, что за сверхпроводимость ответственны так называемые куперовские пары – пары электронов с противоположными импульсами. Внутри пары электроны ведут себя сильно коррелировано и фактически сверхпроводящей частицей является куперовская пара. Поэтому плотность сверхпроводящих электронов n_s в два раза больше плотности куперовских пар $|\Psi|^2$. Пусть вблизи температуры перехода T_c , когда плотность сверхпроводящих электронов мала, то есть мало $|\Psi|$. Потенциал Гиббса во внешнем магнитном поле \mathbf{H}_0 вблизи T_c можно представить в виде разложения по малому параметру Ψ :

$$G_{sh} = G_n + \alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{4m} \left| \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi \right|^2 + \frac{(\text{rot} \mathbf{A})^2}{8\pi} - \frac{\text{rot} \mathbf{A} \cdot \mathbf{H}_0}{4\pi}. \quad (33)$$

$$\text{rot} \mathbf{A} \equiv \mathbf{B}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla.$$

G_n – плотность свободной энергии в нормальном состоянии ⁶ Два следующих члена описывают переход части электронов в сверхпроводящее состояние. Остальные члены – новые и в теории ферромагнетизма они не возникали. Четвертый член описывает пространственную неоднородность функции Ψ и взаимодействие

⁵Подчеркнем, что функция $\Psi(x)$ – зависит от пространственных координат и вовсе не является многоэлектронной волновой функцией. В этом разделе $\Psi(x)$ вводится феноменологически как параметр, характеризующий коллективное поведение куперовских пар.

⁶Напомним, что в этом курсе мы интересуемся только цилиндрической геометрией и продольным магнитным полем. Если бы мы рассматривали термодинамику сверхпроводящего шара в магнитном поле, то внутри шара возникли бы чередующиеся области: в одни области магнитное поле проникает, в другие – нет. Это состояние называется *промежуточным*. Магнитной индукцией \mathbf{B} называется магнитное поле, усредненное по размеру больше масштаба промежуточного состояния. Только в результате такого усреднения можно считать $\text{rot} \mathbf{A} = \mathbf{B}$. В цилиндрической геометрии промежуточного состояния не возникает.

с магнитным полем, имеющим вектор потенциал \mathbf{A} . Этот член *аналогичен* выражению для кинетической энергии хорошо известному из квантовой механики. Он описывает кинетическую энергию сверхпроводящих пар электронов в магнитном поле. Имея в виду дальнейшее сравнение с экспериментом, мы с самого начала учитываем, что сверхток переносится парами электронов, что объясняет появление удвоенных масс электрона и заряда в (33). Предпоследний член – энергия магнитного поля \mathbf{B} . И, наконец, последний член характерен для потенциала Гиббса в магнитном поле (см. (14)). Задача состоит в том, чтобы найти такое пространственное распределение Ψ и \mathbf{A} внутри сверхпроводника, что потенциал Гиббса имеет минимум.

В однородном случае, в отсутствие внешнего поля, минимум потенциала (33) достигается при условии

$$\frac{\partial G_{s0}}{\partial \Psi} = \alpha \Psi^* + \beta \Psi (\Psi^*)^2 = 0.$$

Откуда следует, что решение этого уравнения

$$|\Psi_0|^2 = -\alpha/\beta \quad (34)$$

Таким образом,

$$G_{s0} = G_n - \frac{\alpha^2}{2\beta} \quad (35)$$

Сравнивая это выражение с (6), получаем связь параметров, определяющих функционал Гинзбурга-Ландау (33) с критическим термодинамическим полем.

$$H_c^2 = 4\pi \frac{\alpha^2}{\beta}. \quad (36)$$

Вектор потенциал \mathbf{A} определен неоднозначно. Чтобы теория была калибровочно инвариантной нужно потребовать, чтобы при преобразовании вектор-потенциала определенным образом преобразовывалась и волновая функция Ψ . Сделаем одновременное преобразование

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}' + \nabla\varphi, \quad (37)$$

$$\Psi = \Psi' \exp\left[i\frac{2\pi}{\Phi_0}\varphi\right], \quad \Phi_0 = \frac{\pi\hbar c}{e}. \quad (38)$$

Это преобразование не меняет величины микроскопического магнитного поля

$$\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A} = \text{rot}\mathbf{A}'.$$

Легко также убедиться, что при преобразовании (37) – (38) имеем

$$\left| -i\hbar\nabla\Psi - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\Psi \right| = \left| -i\hbar\nabla\Psi' - \frac{2e}{c}\mathbf{A}'\Psi' \right|.$$

Не изменяются также и остальные члены в функционале Гинзбурга-Ландау (33). Говорят, что выражение для энергии Гиббса (33) является градиентно (или калибровочно) инвариантным.

Найдем, при каких значениях Ψ и \mathbf{A} свободная энергия Гиббса

$$\mathcal{G}_{sH} = \mathcal{G}_n + \int dV \left[\alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{4m} \left| -i\hbar\nabla\Psi - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\Psi \right|^2 + \frac{(\text{rot}\mathbf{A})^2}{8\pi} - \frac{\text{rot}\mathbf{A} \cdot \mathbf{H}_0}{4\pi} \right] \quad (39)$$

имеет минимум.

Первое условие минимума

$$\delta_{\Psi^*} \mathcal{G}_{sH} = 0.$$

Вычислим вариацию

$$\delta_{\Psi^*} g_{sH} = \int dV \left[\alpha \Psi \delta\Psi^* + \beta \Psi |\Psi|^2 \delta\Psi^* + \frac{1}{4m} \left(i\hbar\nabla\delta\Psi^* - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\delta\Psi^* \right) \left(-i\hbar\nabla\Psi - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\Psi \right) \right]. \quad (40)$$

Подчеркнем, что действие оператора ∇ ограничено соответствующими круглыми скобками. Введем обозначение

$$\mathbf{p} = \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\mathbf{A} \right). \quad (41)$$

Тогда нижняя строчка выражения (40) перепишется в виде

$$\int dV \frac{1}{4m} \left(i\hbar\nabla\delta\Psi^* - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\delta\Psi^* \right) (\mathbf{p}\Psi) \quad (42)$$

Исследуем выражение

$$\int dV (\nabla\delta\Psi^*) (\mathbf{p}\Psi) = \int dV (\nabla\delta\Psi^* (\mathbf{p}\Psi)) - \int dV \delta\Psi^* \nabla (\mathbf{p}\Psi) \quad (43)$$

Первый интеграл преобразуем в интеграл по поверхности сверхпроводника

$$\int dV \nabla (\delta\Psi^* (\mathbf{p}\Psi)) = \oint d\mathbf{S} \delta\Psi^* (\mathbf{p}\Psi). \quad (44)$$

Поэтому в (40), с точностью до поверхностного члена (44) можно сделать замену

$$(\nabla\delta\Psi^*) (\mathbf{p}\Psi) \rightarrow -\delta\Psi^* \nabla (\mathbf{p}\Psi).$$

Это позволяет переписать (42) в виде

$$\int dV \frac{1}{4m} \left(i\hbar\nabla\delta\Psi^* - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\delta\Psi^* \right) (\mathbf{p}\Psi) = \int dV \frac{1}{4m} \delta\Psi^* \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \Psi,$$

Используя (43), получим

$$\delta_{\Psi^*} g_{sH} = \int dV \left[\alpha |\Psi|^2 + \beta \Psi |\Psi|^2 + \frac{1}{4m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \Psi \right] \delta\Psi^* + \oint d\mathbf{S} \delta\Psi^* (\mathbf{p}\Psi) = 0$$

Полезнее равенство должно быть справедливым при произвольном $\delta\Psi^*$. Получаем первое уравнение Гинзбурга-Ландау и граничное условие

$$\alpha\Psi + \beta\Psi|\Psi|^2 + \frac{1}{4m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \Psi = 0$$

$$\left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\mathbf{A} \right) \Psi_{\mathbf{n}} = 0.$$
(45)

Проварьируем теперь энергию Гиббса по вектор-потенциалу \mathbf{A} :

$$\begin{aligned} \delta A_{g_{sH}} = \int dV \delta_A \left[\frac{1}{4m} \left(i\hbar\nabla\Psi^* - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\Psi^* \right) \left(-i\hbar\nabla\Psi - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\Psi \right) + \right. \\ \left. + \frac{\text{rot}\mathbf{A} \text{rot}\delta\mathbf{A}}{4\pi} - \frac{\mathbf{H}_0}{4\pi} \text{rot}\delta\mathbf{A} \right] = \\ \int dV \frac{1}{4m} \left[\left(-\frac{2e}{c}\Psi^*\delta\mathbf{A} \right) \left(-i\hbar\nabla\Psi - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\Psi \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{4m} \left(i\hbar\nabla\Psi^* - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\Psi^* \right) \left(-\frac{2e}{c}\Psi\delta\mathbf{A} \right) + \right. \\ \left. \frac{(\text{rot}\mathbf{A} - \mathbf{H}_0) \text{rot}\delta\mathbf{A}}{4\pi} \right] = 0 \end{aligned}$$
(46)

Последний член преобразуем с помощью тождества

$$\mathbf{a} \text{rot} \mathbf{b} = \mathbf{b} \text{rot} \mathbf{a} - \text{div} [\mathbf{a} \times \mathbf{b}].$$

В результате, преобразуя член с дивергенцией в поверхностный интеграл, получим

$$\int dV \frac{\text{rot}\mathbf{A} \text{rot}\delta\mathbf{A}}{4\pi} = \int dV \delta\mathbf{A} \frac{\text{rot}\text{rot}\mathbf{A}}{4\pi} - \oint d\mathbf{S} [\text{rot}\mathbf{A} \times \delta\mathbf{A}].$$
(47)

Вспомним теперь, что

$$\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A}.$$

На поверхности сверхпроводника магнитное поле считается заданным, где, следовательно, $\delta\mathbf{A} = 0$. Подставляя (47) в (46), и, учитывая, что вариация обращается в нуль при произвольном значении $\delta\mathbf{A}$, внутри сверхпроводника получим

$$\frac{i\hbar e}{2mc} (\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) + \frac{2e^2}{mc^2} \mathbf{A} |\Psi|^2 + \frac{\text{rot}\text{rot}\mathbf{A}}{4\pi} = 0.$$
(48)

Вспомним теперь, что

$$\text{rot}\mathbf{A} = \mathbf{B}.$$
(49)

Уравнение Максвелла гласит

$$\operatorname{rot}\mathbf{B} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}. \quad (50)$$

Из трех последних уравнений следует выражение для сверхпроводящего тока:

$$\mathbf{j}_s = -\frac{i\hbar e}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) - \frac{2e^2}{mc}A|\Psi|^2. \quad (51)$$

Физически этот результат интерпретируется следующим образом. В квантовой механике электрический ток, связанный с одной частицей с зарядом $2e$ и массой $2m$ выражается через оператор скорости следующим образом:

$$\mathbf{j} = 2e\psi^*\mathbf{v}\psi = \frac{2e}{2m}\psi^*\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\right)\psi.$$

Если $|\Psi|^2$ имеет смысл плотности электронных пар, то полная плотность сверхпроводящего тока имеет смысл представить в виде

$$\mathbf{j}_s = 2e\Psi^*\mathbf{v}\Psi = \frac{e}{m}\Psi^*\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\right)\Psi, \quad (52)$$

что фактически совпадает с (51).

Перейдем к безразмерной функции ψ , обозначив

$$\psi = \Psi/\Psi_0, \quad |\Psi_0|^2 = \frac{n_s}{2} = |\alpha|/\beta. \quad (53)$$

Введем также обозначения

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{4m|\alpha|}, \quad (54)$$

$$\lambda^2 = \frac{mc^2}{4\pi n_s e^2} = \frac{mc^2\beta}{8\pi e^2|\alpha|}. \quad (55)$$

Тогда уравнения Гинзбурга-Ландау переписутся в виде $\mathbf{B} = \operatorname{rot}\mathbf{A}$

$$\xi^2 \left(i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0}\mathbf{A} \right)^2 \psi - \psi + \psi|\psi|^2 = 0, \quad (56)$$

$$\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{A} = -i\frac{\Phi_0}{4\pi\lambda^2}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{|\psi|^2}{\lambda^2}\mathbf{A} \quad (57)$$

Напомним, что $\Phi_0 = \frac{\pi\hbar c}{e}$.

Пренебрежем неоднородностью n_s и представим волновую функцию ψ в виде $\psi = |\psi|e^{i\theta}$. Тогда второе уравнение ГЛ переписется в виде

$$\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{A} = \frac{|\psi|^2}{\lambda^2} \left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\nabla\theta - \mathbf{A} \right). \quad (58)$$

Уравнение (58), в отличие от уравнения Лондонов (27), является калибровочно инвариантным. Член $\frac{\Phi_0}{2\pi}\nabla\theta$, обеспечивающий эту инвариантность, является существенно квантовым.

13.10 Граница между нормальной и сверхпроводящей фазами

Рассмотрим границу между нормальной и сверхпроводящей фазой в сверхпроводнике второго рода. Если бы граница была резкой, то, поскольку $G_n = G_s$, наличие границы не вносило бы вклада в свободную энергию. Фактически всегда имеется переходный слой от нормального состояния к сверхпроводящему. Мы уже знаем, что сверхпроводник характеризуется двумя масштабами длин ξ_0 – характерный *квантовый* масштаб – размер куперовских пар, λ – глубина проникновения магнитного поля в образец. В переходном слое свободная энергия изменяется (по сравнению с $G_s = G_n$) по двум причинам. Во первых, магнитное поле частично, на глубину λ , проникло в сверхпроводник. Во вторых, слой толщиной ξ_0 подвержен влиянию нормальной части образца из-за чего в этом объеме не происходит "*полная*" конденсация куперовских пар. Характерное значение плотности магнитной энергии в нормальной фазе и характерная энергия конденсации в сверхпроводящей фазе $\frac{H_c^2}{8\pi}$.

Рассмотрим вначале сверхпроводник первого рода. Выше в случае сверхпроводников второго рода с помощью уравнения Лондонов было вычислено поверхностное натяжение (32). Аналогично, уравнения Гинзбурга-Ландау могут быть использованы для вычисления поверхностного натяжения в случае сверхпроводников первого рода⁷. Вместо этой, относительно простой, но громоздкой процедуры, получим ответ качественным образом.

В сверхпроводнике первого рода $\xi_0 \gg \lambda$. (Уравнение Лондонов при этом не работает). В большей части переходного слоя толщиной $\xi_0 - \lambda \approx \xi_0$ магнитное поле отсутствует, а плотность сконденсировавшихся электронов *меньше*, чем в истинно сверхпроводящей фазе, так как в переходной области происходит плавное изменение параметра порядка ψ от 1 до 0. Поэтому в переходном слое энергия *больше* по сравнению с $G_n = G_s$ на величину

$$\sigma_{ns} = \frac{H_c^2}{8\pi} \xi_0 > 0 \quad (59)$$

Фактически это есть превышение энергии Гиббса на единицу поверхности и поэтому называется поверхностным натяжением. И так в сверхпроводниках первого рода образование границы энергетически невыгодно.

Аналогичные соображения позволяют установить знак поверхностного натяжения и в случае сверхпроводника второго рода, когда $\xi_0 \ll \lambda$. В этом случае в большей части переходного слоя $\lambda - \xi_0 \approx \lambda$ параметр порядка равен нулю. В то же время магнитное поле в нем меняется от $\frac{H_c^2}{8\pi}$ до нуля. То есть в среднем в переходном слое плотность магнитной энергии *меньше* $\frac{H_c^2}{8\pi}$. Поэтому по сравнению с истинно нормальным металлом мы имеем *выигрыш* в энергии и, следовательно

$$\sigma_{ns} = \frac{H_c^2}{8\pi} \lambda < 0. \quad (60)$$

⁷В случае сверхпроводников второго рода, уравнения Гинзбурга-Ландау не дают ничего нового, по сравнению с теорией Лондонов.

Подчеркнем лишний раз, что описанные выше соображения о знаке поверхностного натяжения существенно основаны на равенстве (30).

Итак, возможность образования границы между нормальной и сверхпроводящей фазами качественно определяется выражением

$$\sigma \approx \frac{H_c^2}{8\pi} (\xi_0 - \lambda). \quad (61)$$

Если $\sigma > 0$, то образование поверхности невыгодно, в противном случае – образование поверхности энергетически выгодно. Строгий анализ, выполненный на основе уравнений Гинзбурга-Ландау, показывает, что если параметр

$$\kappa = \lambda/\xi > \frac{1}{\sqrt{2}},$$

то образование поверхности энергетически выгодно.

13.11 Квантование магнитного потока

Из уравнения (58) следует интересный эффект – квантование магнитного потока. Пусть в массивном сверхпроводнике имеется полость. Поскольку он не является односвязным, то в сверхпроводнике могут существовать поверхностные сверхпроводящие токи, приводящие к наличию магнитного потока в полости. Выберем в толще сверхпроводника замкнутый контур, охватывающий эту полость. В толще сверхпроводника магнитное поле $\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A} = \mathbf{0}$. Следовательно, интеграл по этому контуру от левой части уравнения (58) равен нулю. Таким образом,

$$\oint \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla\theta - \mathbf{A} \right) d\mathbf{l} = \mathbf{0}.$$

По своему физическому смыслу θ , фаза волновой функции, должна обеспечивать однозначность последней. Это возможно, если изменение θ при обходе по замкнутому контуру кратно 2π . Интеграл от вектор потенциала \mathbf{A} , преобразованный к интегралу от $\text{rot}\mathbf{A}$ по поверхности, определяет магнитный поток через полость

$$\oint \mathbf{A} d\mathbf{l} = \int \text{rot}\mathbf{A} d\mathbf{S} = \int \mathbf{B} d\mathbf{S} = \Phi \quad (62)$$

Таким образом, получаем

$$\Phi = \oint \frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla\theta d\mathbf{l} = n\Phi_0, \quad \Phi_0 = \frac{\pi\hbar c}{e}, \quad n - \text{целое}. \quad (63)$$

Таким образом, магнитный поток в полости¹ квантуется, а квантом является параметр Φ_0 .

¹Заметим, что ничтожная часть этого потока сосредоточена в сверхпроводнике в слое толщиной λ . Подавляющая часть магнитного потока сосредоточена в полости.

13.12 Характерные масштабы длин в сверхпроводнике

В предыдущем разделе в (54) формально был введен параметр ξ , имеющий размерность длины. Выясним его физический смысл. Нанесем, на чистую плоскую поверхность сверхпроводника тонкий слой нормального металла. Вблизи границы в сверхпроводнике из-за контакта с металлом плотность сверхпроводящих электронов немного понизится, то есть параметр $|\psi|$ отличается от единицы, которой он равен в толще сверхпроводника. Поскольку мы рассматриваем односвязный сверхпроводник, то фаза волновой функции однозначна. Соответствующим калибровочным преобразованием ее можно "загнать" в вектор-потенциал, сделав саму волновую функцию вещественной.

Пусть ось x перпендикулярна к поверхности. Тогда первое уравнение ГЛ в отсутствие магнитного поля запишется

$$-\xi^2 \psi'' - \psi + \psi^3 = 0. \quad (64)$$

Будем считать, что слой нормального металла столь тонок, что ψ вблизи границы мало отличается от единицы и решение уравнения (64) будем искать в виде

$$\psi = 1 - \varepsilon(x), \quad \varepsilon(x) \ll 1. \quad (65)$$

В линейном по ε приближении получим

$$\xi^2 \varepsilon'' - 2\varepsilon = 0.$$

Отсюда следует, что

$$\varepsilon(x) = \varepsilon(0) e^{-\frac{\sqrt{2}x}{\xi}}.$$

Таким образом, параметр ξ есть та характерная длина, на которой происходит изменение параметра порядка ψ .

Физический смысл второго параметра λ , фигурирующего в теории ГЛ, следует из уравнения (58). Как и в теории Лондонов, он определяет глубину проникновения магнитного поля в сверхпроводник.

Из теории фазовых переходов Ландау следует, что вблизи температуры перехода параметр $|\alpha| \propto (T_c - T)$. Таким образом, вблизи T_c

$$\xi \propto (T_c - T)^{-1/2}, \quad \lambda \propto (T_c - T)^{-1/2}. \quad (66)$$

В теории ГЛ важную роль играет параметр

$$\kappa = \lambda/\xi = \frac{mc}{\hbar e} \left(\frac{\beta}{2\pi} \right)^{1/2}, \quad (67)$$

не зависящий от температуры. В разделе 13.7 было показано, что если этот параметр $\kappa \gg 1$, то сверхпроводник хорошо описывается уравнением Лондонов и квантовые эффекты несущественны. В этом случае поверхностное натяжение на границе сверхпроводящей и нормальной фаз отрицательное и образование границы невыгодно. Анализ уравнений ГЛ приводит к такому же выводу, при этом пороговое значение для κ для возникновения сверхпроводимости второго рода есть $\kappa_c = 1/\sqrt{2}$.

13.13 Вихри Абрикосова

Перейдем к детальному изучению сверхпроводников второго рода. Выше мы установили, что для них энергия границы между нормальной и сверхпроводящей фазами $\sigma_{ns} < 0$. Это означает, что становится энергетически выгодным расслоение образца на области нормальной и сверхпроводящей фаз. Вначале этой части пособия мы описали, каким образом магнитное поле проникает в сверхпроводник второго рода. Так, внутри цилиндрического образца образуются вихри. Каждый вихрь представляет собой цилиндр с нормальной сердцевиной, радиус которого порядка длины когерентности ξ . В сердцевине параметр порядка $\psi = 0$. Вокруг этой нормальной сердцевины течет незатухающий сверхток. Создаваемое им магнитное поле направлено вдоль сердцевины. Вихревой ток захватывает область радиуса порядка λ – глубины проникновения. Эта область может быть достаточно большой, поскольку для сверхпроводников второго рода $\lambda \gg \xi$.

Один вихрь несет один квант магнитного потока. Образование вихрей становится энергетически выгодным при внешнем поле $H_0 > H_{c1}$. Вихри, образовавшись в сверхпроводнике, располагаются на расстоянии порядка λ и образуют в поперечном сечении правильную треугольную решетку. Возникающее состояние называется смешанным. Это состояние существует при повышении величины внешнего поля до значения H_{c2} , называемого вторым критическим полем. В этом случае период решетки становится порядка ξ . Это означает, что вихри соприкасаются своими нормальными сердцевинами и параметр порядка ψ обращается в нуль во всем объеме образца.

Вблизи верхнего поля есть область, где решетка плавится. Очень близко от есть разреженный газ сврхпроводящих нитей см ниже

Кривая намагниченности для сверхпроводника второго рода ведет себя как показано на рисунке...

13.13.1 Одиночный вихрь

Рассмотрим сверхпроводник второго рода, то есть случай $\lambda \gg \xi$. Мы хотим показать, что существует область магнитных полей, при которых выгодно образование в толще сверхпроводника *нормальных* тонких цилиндрических областей радиуса ξ – *вихрей*. Параметр порядка внутри этой области изменяется от 0 до 1. Вне сердцевины $|\psi|^2 = 1$. Поэтому для больших расстояний $\rho \gg \xi$. уравнение ГЛ (58) переписывается

$$\text{rot rot } \mathbf{A} = \frac{1}{\lambda^2} \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla \theta - \mathbf{A} \right), \rho \gg \xi.$$

Проинтегрируем последнее уравнение по замкнутому контуру охватывающему нормальную сердцевину вихря.

$$\oint dl (\lambda^2 \text{rot rot } \mathbf{A} + \mathbf{A}) = \frac{\Phi_0}{2\pi} \oint dl \nabla \theta. \quad (68)$$

Если бы не магнитная сердцевина, то фаза волновой функции была бы однозначной аналитической функцией и интеграл в правой части равнялся бы нулю.

Наличие нормальной сердцевинки делает сверхпроводящий образец *многосвязным*. В то же время, остается требование *однозначности волновой функции*. Это означает, что при обходе по замкнутому контуру фаза может измениться на $2\pi n$ – значение интеграла в правой части (68). Преобразуем левую часть (68) к поверхностному интегралу, учитывая, что $\text{rot}\mathbf{A} = \mathbf{B}$:

$$\int d\mathbf{S} (\lambda^2 \text{rotrot}\mathbf{B} + \mathbf{B}) = n\Phi_0.$$

Поскольку интеграл в левой части не зависит от контура (главное, что он охватывает сердцевину!), то формально можно считать, что подынтегральная функция есть δ -функция. Поэтому

$$\lambda^2 \text{rotrot}\mathbf{B} + \mathbf{B} = n\Phi_0 \delta(\rho). \quad (69)$$

Всюду вне сердцевинки при $\rho \gg \xi$ имеем

$$\text{rotrot}\mathbf{B} = -\frac{1}{\lambda^2}\mathbf{B}. \quad (70)$$

Раскрывая левую часть этого выражения по известной формуле, получим

$$\Delta\mathbf{B} = \frac{1}{\lambda^2}\mathbf{B}. \quad (71)$$

В цилиндрических координатах имеется только одна z -компонента h_z . Поэтому для нее имеем

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} h_z = \frac{\rho}{\lambda^2}$$

Пусть $h_z = f(x)$, $x = \rho/\lambda$. Тогда

$$x f'' + f' - x f = 0.$$

Это – уравнение Бесселя. Нас интересует его решение в окрестности вихря, то есть при $\rho < \lambda$. При малых значениях аргумента $f = \ln x$. (Это легко проверить непосредственной подстановкой). Поэтому магнитное поле в окрестности оси вихря имеет вид

$$h \sim \ln \left(\frac{\lambda}{\rho} \right), \quad \xi < \rho < \lambda. \quad (72)$$

Точное решение уравнения (69) при условии $h(\infty) = 0$ имеет вид

$$h = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} K_0(\rho/\lambda).$$

K_0 – функция Макдональда, асимптотика которой $K_0(z) \propto \ln(1/z)$ при $z \ll 1$ приводит к (72). Это позволяет оценить поле в центре вихря с логарифмической точностью

$$h(0) \simeq h(\xi) \simeq \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} \ln(\xi/\lambda). \quad (73)$$

13.13.2 Первое критическое поле

Исходим из функционала Гинзбурга-Ландау для свободной энергии

$$\mathcal{F}_{sH} = \mathcal{F}_n + \int dV \left[\alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{4m} \left| -i\hbar\nabla\Psi - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\Psi \right|^2 + \frac{(\text{rot}\mathbf{A})^2}{8\pi} \right] \quad (74)$$

Напомним выражения для длины когерентности и глубины проникновения магнитного поля

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{4m|\alpha|}, \quad (75)$$

$$\lambda^2 = \frac{mc^2}{4\pi n_s e^2} = \frac{mc^2\beta}{8\pi e^2 |\alpha|}. \quad (76)$$

Если вихря нет, то поскольку внутри сверхпроводника микроскопическое поле $\mathbf{B} = 0$, то вклад в свободную энергию (74) дает только верхняя строка. Энергией вихря будем называть свободную энергию, определяемую нижней строкой в (74), то есть будем ее отсчитывать от свободной энергии состояния без вихрей. Нас интересует случай $\lambda \gg \xi$. Поэтому можно пренебречь свободной энергией, сосредоточенной в объеме нормальной сердцевин⁸. Кроме того, поскольку мы интересуемся расстояниями $\rho > \xi$, где параметр порядка практически не изменяется, можно считать $|\Psi|^2 = |\Psi_0|^2 = \frac{|\alpha|}{\beta}$. По этой причине в (39) можно пренебречь квантовым членом $-i\hbar\nabla\Psi$. Поэтому из (39) для вычисления энергии вихря остается только выражение

$$\varepsilon = \int dV \left(\frac{e^2}{mc^2} \mathbf{A}^2 \frac{|\alpha|}{\beta} + \frac{h^2}{8\pi} \right). \quad (77)$$

Во втором уравнении ГЛ (58)

$$\text{rot rot}\mathbf{A} = \frac{|\psi|^2}{\lambda^2} \left(\frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla\theta - \mathbf{A} \right)$$

опустим квантовый градиентный член. Тогда

$$\mathbf{A} = \left(\frac{\lambda}{|\psi|} \right)^2 \text{rot rot}\mathbf{A} = \left(\frac{\lambda}{|\psi|} \right)^2 \text{rot}\mathbf{B}. \quad (78)$$

Подставляя (77) в (78), получим

$$\varepsilon = \frac{1}{8\pi} \int dV (\lambda^2 (\text{rot}\mathbf{B})^2 + \mathbf{B}^2). \quad (79)$$

Заметим, что, как и следовало ожидать при $\lambda \gg \xi$, это есть Лондоновское выражение, (20),.

⁸Эта энергия порядка $(H_c^2/8\pi) \pi\xi^2$. Вычисленная ниже энергия вихря окажется больше этой малой поправки.

Применим к выражению $(\text{rot}\mathbf{B})^2 = \text{rot}\mathbf{B} \cdot \text{rot}\mathbf{B}$ формулу

$$\mathbf{a} \text{rot} \mathbf{b} = \mathbf{b} \text{rot} \mathbf{a} - \text{div} [\mathbf{a}, \mathbf{b}]$$

Тогда

$$(\text{rot}\mathbf{B})^2 = \mathbf{B} \text{rot} \text{rot}\mathbf{B} - \text{div} [\text{rot}\mathbf{B}, \mathbf{B}]. \quad (80)$$

По теореме Гаусса

$$\int \text{div} [\text{rot}\mathbf{B} \times \mathbf{B}] = \oint d\mathbf{S} [\text{rot}\mathbf{B} \times \mathbf{B}]. \quad (81)$$

Напомним, что нас интересует цилиндрическая геометрия, когда вектор \mathbf{B} направлен по оси z . Вычислим энергию вихря единичной длины, ограниченного плоскостями $z = 0, z = 1$. Интеграл по торцевым окружностям равен нулю, так как вектор $[\text{rot}\mathbf{B} \times \mathbf{B}]$ лежит в плоскости этих торцов. Поскольку поле вихря $\mathbf{B} \rightarrow 0$, при $\rho \rightarrow \infty$, то интеграл и по бесконечно удаленной цилиндрической поверхности в (81) обращается в нуль. Итак,

$$\varepsilon = \frac{1}{8\pi} \int dV [\mathbf{B} (\lambda^2 \text{rot} \text{rot}\mathbf{B} + \mathbf{B})]. \quad (82)$$

В силу уравнения (69), выражение в круглых скобках есть δ -функция. Поэтому, используя (73), получим

$$\varepsilon = \frac{\Phi_0 \mathbf{B}(0)}{8\pi} = \left(\frac{\Phi_0}{4\pi\lambda} \right)^2 \ln(\xi/\lambda) \quad (83)$$

Во внешнем поле минимум должна иметь энергия Гиббса

$$\varepsilon_1 = \varepsilon - \int \frac{\mathbf{B}\mathbf{H}_0}{4\pi} dV. \quad (84)$$

\mathbf{H}_0 можно вынести за знак интеграла. Если считать, что вихрь несет один квант магнитного потока, то

$$\int \frac{\mathbf{B}}{4\pi} dV = \int_0^1 dz \int \frac{\mathbf{B}}{4\pi} d\mathbf{S} = \frac{\Phi_0}{4\pi}. \quad (85)$$

Итак

$$\varepsilon_1 = \left(\frac{\Phi_0}{4\pi\lambda} \right)^2 \ln(\xi/\lambda) - \frac{\Phi_0 \mathbf{H}_0}{4\pi}. \quad (86)$$

Отсюда следует, что в слабом магнитном поле $\varepsilon_1 > 0$ и образование вихря невыгодно. Из (86) следует, что минимальное поле при котором $\varepsilon_1 < 0$ есть

$$H_{c1} = \frac{\Phi_0}{4\pi\lambda^2} \ln(\xi/\lambda) = \frac{\Phi_0}{4\pi\lambda^2} \ln(\varkappa). \quad (87)$$

Это поле называется *первым критическим* полем, при котором внешнее магнитное поле начинает проникать в сверхпроводник. Вспоминая оценку (66), получим

$$H_{c1}(T \rightarrow T_c) \sim H_{c1}(0)(T_c - T). \quad (88)$$

13.13.3 Второе критическое поле

Найдем теперь *второе критическое* поле, при котором почти весь образец находится в нормальном состоянии, то есть параметр порядка Ψ – мал. Из первого уравнения Гинзбурга Ландау имеем

$$\xi^2 \left(i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right)^2 \psi = a\psi, \quad a = 1 - |\psi|^2 \quad (89)$$

В сильном поле сверхпроводящая фаза слаба, и в уравнении (89) нелинейность проявляется только в том смысле, что собственное значение *линейного* уравнения $a < 1$.

Подставим в уравнение (89) потенциал $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$:

$$-\xi^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \xi^2 / \hbar^2 \left(i\hbar \nabla + \frac{2e}{c} Bx \right)^2 \psi - \xi^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = a\psi. \quad (90)$$

Похожее уравнение решалось в разделе о магнетизме электронного газа. Если установить соответствие

$$m' = \frac{\hbar^2}{2\xi^2}, \quad e' = 2e,$$

то получим уравнение движения электрона в магнитном поле

$$-\frac{\hbar^2}{2m'} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2m'} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e'}{c} Bx \right)^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m'} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = a\psi. \quad (91)$$

Минимальное собственное значение уравнения (91) есть $a = \frac{\hbar e' B}{2m' c} = \frac{2eB\xi^2}{\hbar c}$. Нас интересует решение этого уравнения, когда $a < 1$. Итак, решение уравнения (90) существует (*при* $a < 1$), если

$$\frac{2eB\xi^2}{\hbar c} < 1.$$

Тогда верхнее критическое поле определится критерием

$$H_{c2} = \frac{\hbar c}{2e\xi^2}. \quad (92)$$

Это условие имеет простой физический смысл. Во внешнем поле $H \sim H_{c2}$ поле почти полностью проникает в образец. Это означает, что расстояние между вихрями становится порядка толщины сердцевин вихря, и поле внутри сверхпроводника $h \sim H_{c2}$. Следовательно один вихрь несет магнитный поток по порядку величины равный $\xi^2 H_{c2}$. С другой стороны, этот поток равен Φ_0 , что и отражает критерий (92).

Заметим, что при приближении H_0 к H_{c2} параметр порядка $|\Psi|^2 = 1 - H_0/H_c$.

Строгий анализ, основанный на уравнениях Гинзбурга-Ландау, показывает, что в сверхпроводниках второго рода, для которых $\kappa > 1/\sqrt{2}$, в интервале $H_{c1} < H_0 < H_{c2}$ образуются вихри. Эти вихри отталкиваются друг от друга и образуют двумерную решетку, составленную из равносторонних треугольников. При наличии градиента внешнего магнитного поля вихри могут двигаться, но примеси их останавливают (пиннинг). Это явление аналогично движению и пиннингу дислокаций в реальных кристаллах.

13.14 Эффекты Джозефсона

Рассмотрим два сверхпроводника, разделенных диэлектрическим промежутком. Если этот промежуток достаточно толстый, то ток через него между сверхпроводниками течь не может. Это условие формально соответствует граничному условию к уравнениям Гинзбурга-Ландау (45), Итак, для обоих сверхпроводников условие обращения тока в нуль есть

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \frac{2e}{c}A_x\right)\Psi_1 = 0, \quad (93)$$

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \frac{2e}{c}A_x\right)\Psi_2 = 0. \quad (94)$$

Если сделать диэлектрический слой достаточно тонким, то проницаемость барьера, обусловленная этим слоем, становится конечной и через диэлектрический контакт может течь сверхток. Ток, вытекающий, например, из *первого* сверхпроводника зависит от как от Ψ_1 , так и от Ψ_2 . Если интересоваться свойствами перехода вблизи температуры перехода, когда параметр порядка мал, то это влияние достаточно учесть в *первом порядке*. Тогда из (93), (94) следует, что в наиболее общем виде

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \frac{2e}{c}A_x\right)\Psi_1 = f(\Psi_1, \Psi_2) \approx \frac{\Psi_2}{\lambda} + \frac{\Psi_1}{\lambda'} \quad (95)$$

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \frac{2e}{c}A_x\right)\Psi_2 = f(\Psi_1, \Psi_2) \approx \frac{\Psi_1}{\lambda} + \frac{\Psi_2}{\lambda'} \quad (96)$$

коэффициенты $1/\lambda$ и $1/\lambda'$ пропорциональны проницаемости барьера. Эти уравнения должны удовлетворять требованиям симметрии по отношению к обращению времени $t \rightarrow -t$. Соответствующее преобразование получается, если сделать замену $\psi \rightarrow \psi^*$, $A \rightarrow -A$. Легко убедиться, что это имеет место, если $\lambda, \lambda' -$ вещественны. Вычислим ток, втекающий в контакт, со стороны первого сверхпроводника, используя (51):

$$j = -2e\text{Re} \left(\Psi_1^* \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla_x - \frac{2e}{c}A_x \right) \Psi_1 \right). \quad (97)$$

Подставляя сюда граничное условие (95), получим

$$j = -\frac{i\hbar e}{2m\lambda} (\Psi_1^* \Psi_2 - \Psi_1 \Psi_2^*) \quad (98)$$

(Обратим внимание, что константа λ выпала из окончательного выражения.) Это ток *вытекающий* из первого сверхпроводника и *втекающий* во второй. Как и следовало ожидать, при взаимной замене индексов 1 и 2, это выражение меняет знак, поскольку понятия *вытекающий* и *втекающий* взаимозаменяются. Если сверхпроводники одинаковы, то Ψ_1 и Ψ_2 могут отличаться только фазой. Если эти фазы есть φ_1 и φ_2 , то

$$j = j_c \sin(\varphi_2 - \varphi_1), \quad j_c = \frac{\hbar e |\psi|^2}{m\lambda}. \quad (99)$$

Напомним, что при приближении к точке перехода $|\psi|^2$ стремится к нулю, как $T_c - T$. По этому же закону убывает максимальный сверхпроводящий ток через контакт.

Приложим теперь к контакту разность потенциалов V . Пусть в первом сверхпроводнике волновая функция стационарного состояния есть

$$\psi = \psi_1 e^{i\varphi_1(t)} = \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar}.$$

Тогда

$$-\hbar \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} = E_1.$$

Аналогично для второго сверхпроводника

$$-\hbar \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} = E_2.$$

Если на мостике установилась разность потенциалов V , то разность потенциальных энергий куперовских пар, имеющих заряд $2e$, равна

$$E_2 - E_1 = 2eV.$$

Тогда

$$2eV = \hbar \frac{\partial (\varphi_2 - \varphi_1)}{\partial t}. \quad (100)$$

Тогда

$$(\varphi_2 - \varphi_1) = (\varphi_2 - \varphi_1)_0 - 2eVt. \quad (101)$$

Подставляя (101) в (99), получим

$$j = j_c \sin [(\varphi_2 - \varphi_1)_0 - 2eVt]. \quad (102)$$

Получили интересный результат: наложение на туннельный контакт *постоянной* разности потенциалов, приводит к появлению сверхпроводящего *переменного* тока с частотой

$$\omega_f = \frac{2}{\hbar} |eV|. \quad (103)$$

Выделяемая в контакте мощность пропорциональна Vj . Среднее за период значение этого произведения равно *нулю*, как это и должно быть для сверхпроводящего тока.

14 Лекция 14. Сверхпроводимость II - микроскопическая теория

Введение До сих пор мы только описывали явление сверхпроводимости феноменологически. Сейчас мы переходим к микроскопическому описанию, которое было предложено в 1957г. удостоенными Нобелевской премии Бардиным, Купером, Шриффером (теория БКШ) почти полвека спустя после открытия явления.

Боголюбов также внес большой вклад в микроскопическую теорию сверхпроводимости.

Сделаем предварительные оценки. Энергия конденсации куперовских пар на 1см^3 , равна $H_c^2/8\pi \sim 10^5\text{эрг/см}^3$, если принять $H_c \sim 10^3$. Число электронов в 1см^3 по порядку величины равно 10^{22} . Таким образом, за сверхпроводимость отвечает энергия примерно равная $10^5/10^{22} = 10^{-17}\text{эрг/электрон} = 10^{-5}\text{эВ/электрон}$. Заметим, что современная квантовая теория металлов прекрасно описывает многие их свойства даже в пренебрежении кулоновской энергией, имеющей порядок 1эВ/электрон . Таким образом, предстояло объяснить природу явления, которой соответствует энергия на много порядков меньше энергии других взаимодействий, которыми обычно пренебрегают.

Ключом к построению микроскопической теории явилось то обстоятельство, что изотопы одного и того же сверхпроводящего металла имеют разные критические температуры T_c , при этом

$$T_c M^\alpha = \text{const}, \quad (1)$$

причем для большинства элементов $\alpha \approx 0.5$. Это наталкивает на мысль, что колебания решетки, фононы, ответственны за сверхпроводимость, поскольку характерная энергия фононов – температура Дебая – $\Theta_D \sim M^{-1/2}$.

14.1 Гамильтониан и уравнение движения

Полный гамильтониан подсистемы электронов в представлении вторичного квантования для большого канонического ансамбля запишем в форме суммы кинетической энергии электронов и эффективного парного взаимодействия

$$\begin{aligned} \hat{H} = \int d^3r \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(t, \mathbf{r}) & \left(\frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2}{2m} + e\varphi - \mu \right) \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(t, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(t, \mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_{\sigma'}(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}_1). \end{aligned} \quad (2)$$

$\hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r})$ – оператор уничтожения электрона в (r, t) представлении, $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор импульса электрона, \mathbf{A}, φ – потенциалы электромагнитного поля. В (2) мы пренебрегаем кристаллической структурой тела, $\sigma = \pm 1$ есть удвоенная проекция спина на одну из осей, постоянная μ есть химический потенциал электронов. Выпишем также оператор полного числа частиц

$$\hat{N} = \int d^3r \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}). \quad (3)$$

Квантовое поле ферми-частиц удовлетворяет коммутационным соотношениям:

$$\{\hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}_1), \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(t, \mathbf{r}_2)\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (4)$$

$$\{\hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}_1), \hat{\Psi}_{\sigma'}(t, \mathbf{r}_2)\} = 0, \quad (5)$$

где $\{\dots\}$ – антикоммутатор. Обратим внимание, что в (2) операторы ферми-поля стоят в *нормальном порядке* – слева операторы рождения фермионов, справа – операторы поглощения.

Потенциал $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ равен сумме кулоновского отталкивания электронов и притяжения, которое возникает как результат взаимодействия летящих навстречу друг другу электронов благодаря обмену фононом или магненом. Обмен фононами – процесс второго порядка, и, согласно теории возмущений, приводит к понижению энергии, т. е. к притяжению (см. раздел *****). В металлах кулоновское взаимодействие заэкранировано и сильно ослаблено. Если притяжение превалирует, то металл при достаточно низких температурах переходит в сверхпроводящее состояние. В таких металлах как *Cu* преобладает отталкивание, и перехода в сверхпроводящее состояния нет. Интересно, что в соединениях, которые называются купратами, причиной сверхпроводимости является сильное взаимодействие электронов проводимости с подсистемой спинов ионов меди во внутрикристаллических плоскостях *CuO₂*.

Короткодействующий парный потенциал эффективного притяжения электронов можно заменить на локальный

$$U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = U_0 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (6)$$

Параметр U_0 имеет размерность энергия×объем и записывается в виде

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (7)$$

Величина a называется длиной рассеяния. В случае притяжения величины U_0 и a отрицательны.

Итак, гамильтониан (2) принимает вид

$$\hat{H} = \int d^3r \left[\hat{\Psi}_\sigma^+(t, \mathbf{r}) \left(\frac{(\hat{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2m} + e\varphi - \mu \right) \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) + \frac{1}{2} U_0 \hat{\Psi}_\sigma^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_{-\sigma}^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_{-\sigma}(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) \right] \quad (8)$$

Потенциал (6) подразумевает, что взаимодействуют электроны находящиеся в одном месте. В силу принципа Паули, для этого они должны иметь разные проекции спина, что и отражено в (8).

Производная по времени от гайзенберговских операторов равна

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) = \left[\hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}), \hat{H} \right]. \quad (9)$$

Вычисляя коммутатор с помощью (4), (5), приходим к нелинейному "уравнению Шредингера":

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) = \left(\frac{(\hat{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2m} + e\varphi - \mu \right) \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) + U_0 \hat{\Psi}_{-\sigma}^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_{-\sigma}(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}). \quad (10)$$

В отсутствие внешнего электромагнитного поле имеем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - \mu \right) \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) + U_0 \hat{\Psi}_{-\sigma}^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_{-\sigma}(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}). \quad (11)$$

Современная наука не может решить это уравнение точно. Но в случае слабого взаимодействия ($nU_0 \ll \mu$), чтобы найти элементарные возбуждения достаточно нелинейный член учесть приближенно. Рассмотрение его в рамках теории возмущений дает только перенормировку массы электрона и слабое затухание возбуждений. Чтобы увидеть в (10) сверхпроводимость, необходимо в решение задачи ввести идею, которая бы отражала физическую причину качественной перестройки электронной подсистемы, аналогичную той, которая привела к микроскопическому объяснению сверхтекучести бозе-газа. В бозе-газе - это конденсация Бозе-Эйнштейна. Явления конденсации в ферми-газе не может существовать из-за принципа Паули. Но на уровне коллективных бозе-возбуждений конденсация становится возможной. Такими коллективными возбуждениями в ферми-газе являются куперовские пары.

14.2 Феномен Купера

Прежде, чем заниматься многочастичной проблемой, рассмотрим поведение двух выделенных электронов с локальным взаимодействием, которые двигаются на фоне остальных электронов, заполняющих сферу Ферми. Это движение описывается стационарным уравнение Шредингера:

$$\left[\left(\frac{\hat{p}_1^2}{2m} - \mu \right) + \left(\frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \mu \right) + U_0 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right] \psi(r_1, r_2) = E \psi(r_1, r_2). \quad (12)$$

Роль заполненной ферми-сферы сводится к тому, что из фазового пространства, доступного этим электронам, в силу принципа Паули исключены состояния, находящиеся внутри этой сферы. Тогда волновая функция основного состояния есть функция покоящейся пары электронов. Эта функция зависит только от расстояния между электронами $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ и может быть представлена в форме

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{k > k_F} \psi_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (13)$$

При суммировании по импульсам учтено, что все состояния внутри поверхности Ферми заняты. Для краткости здесь и далее мы полагаем $\hbar = 1$. Подставляя (13) в (12), получим

$$\sum_{k' > k_F} \left[2 \left(\frac{k'^2}{2m} - \mu \right) - E \right] \psi_{k'} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} + U_0 \sum_{k' > k_F} \psi_{k'} \delta(\mathbf{r}) = 0.$$

Умножая это уравнение на $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ и интегрируя по объему V , находим

$$V \left[2 \left(\frac{k^2}{2m} - \mu \right) - E \right] \psi_k + U_0 \sum_{k' > k_F} \psi_{k'} = 0$$

Отсюда

$$\psi_k = - \frac{U_0/V}{2 \left(\frac{k^2}{2m} - \mu \right) - E} \sum_{k' > k_F} \psi_{k'}$$

Суммируя по импульсам и сокращая на $\sum_{k' > k_F} \psi_{k'}$, получаем интегральное уравнение

$$1 = - \sum_{k > k_F} \frac{U_0/V}{2 \left(\frac{k^2}{2m} - \mu \right) - E}$$

которое сводится к интегралу по $\xi = \frac{k^2}{2m} - \mu$.

Напомним, что

$$\sum_{k > k_F} = \frac{1}{2} V \int_0^{\omega_D} d\xi \nu(\xi), \nu(\xi) - \text{плотность состояний.} \quad (14)$$

Тогда

$$-\frac{1}{2} g \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\nu(\xi)}{2\xi - E} = 1.$$

Верхний предел интегрирования мы формально обозначили через ω_D , имея в виду, что впоследствии будет установлено (****), что в металле притягиваются электроны вблизи энергии Ферми в корочке толщиной порядка энергии Дебая ω_D .

При $g < 0$ существует решение этого уравнения с отрицательным собственное значением $E = -|E|$. Пренебрегая зависимостью плотности

$\nu(\xi)$ электронных состояний от энергии возбуждения, получаем

$$\frac{1}{2} |U_0| \nu(0) \ln \frac{2\omega_D}{|E|} = 1.$$

Откуда следует, что

$$|E| = \omega_D \exp \left[-\frac{2}{|U_0| \nu(0)} \right]. \quad (15)$$

Итак, рассмотренная задача показывает, что два электрона на поверхности Ферми образуют связанное состояние с экспоненциально малой энергией связи. Удивительным здесь является то, что в *трехмерной* задаче сколь угодно слабое притяжение приводит к образованию связанного состояния. Это обусловлено тем, что $\nu_F \neq 0$. Теорема об отсутствии связанного состояния относится к решениям одночастичного трехмерного уравнения Шредингера с мелким потенциалом. А в задаче Купера, фактически, рассматривается относительное движение пары электронов на фоне моря других электронов, занимающих все состояния под поверхностью Ферми. В обычной квантовомеханической задаче сколь угодно слабое притяжение приводит к образованию связанного состояния только в одномерии.

14.3 Уравнения Боголюбова-Де Жена

Двухчастичная задача Купера поучительна в том смысле, что она демонстрирует, что при $U_0 < 0$ электроны вблизи поверхности Ферми связываются в покоящиеся пары – бозе-частицы с нулевым суммарным импульсом. Этот результат подсказывает, в каком направлении нужно двигаться. Если таких пар много, то, по

аналогии с бозе-газом, можно говорить о конденсате покоящихся пар. Основной недостаток задачи Купера заключается в том, что она не учитывает тождественности электронов внутри сферы Ферми и двух выделенных электронов.

Из теории атома водорода и теории позитрония (связанного состояния электрон-позитрон) мы знаем, что волновая функция связанного состояния двух частиц есть произведение волновых функций этих частиц. Поэтому произведение $\hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r})\hat{\Psi}_{-\sigma}(t, \mathbf{r})$ в (11) можно интерпретировать как оператор уничтожения функции куперовской пары. Поскольку число куперовских пар есть макроскопическое число, то это произведение можно заменить на c -число.

$$\hat{\Psi}_{-\sigma}(t, \mathbf{r})\hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) \rightarrow \left\langle \hat{\Psi}_{-\sigma}(t, \mathbf{r})\hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) \right\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(S p \rho_N \left\langle N | \hat{\Psi}_{-\sigma}(t, \mathbf{r})\hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) | N + 2 \right\rangle \right) \quad (16)$$

В отличие от лекции по сверхтекучести, здесь мы хотим рассмотреть свойства сверхпроводника при всех температурах вплоть до критической температуры перехода в нормальное состояние. Поэтому в (16) справа символ усреднения $\langle \dots \rangle$ означает двойное усреднение по *когерентному* состоянию конденсата куперовских пар и по распределению Гиббса с N -частичной матрицей плотности ρ_N . В однородном случае среднее (16) не зависит ни от времени, ни от координаты, но, как следует из (5), меняет знак при изменении знака σ .

В приближении (16) уравнение (11) формально становится линейным

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - \mu \right) \hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) + U_0 \hat{\Psi}_{-\sigma}^+(t, \mathbf{r}) \left\langle \hat{\Psi}_{-\sigma}(t, \mathbf{r})\hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) \right\rangle. \quad (17)$$

Введем обозначения

$$\xi_k = \frac{k^2}{2m} - \mu, \quad \sigma \Delta = U_0 \left\langle \hat{\Psi}_{-\sigma}(t, \mathbf{r})\hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) \right\rangle \quad (18)$$

Аномальное среднее Δ , вообще говоря, есть комплексная величина.

Разложим поле $\hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r})$ по плоским волнам $|\mathbf{k}\sigma\rangle = |\mathbf{k}\rangle|\sigma\rangle$ ($|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, $|\sigma\rangle$ – спиновая волновая функция):

$$\hat{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{r}) = \sum_{k\sigma'} \langle \mathbf{k}\sigma' | r\sigma \rangle \hat{a}_{k\sigma'} = \sum_{k\sigma'} \langle \sigma' | \sigma \rangle \langle k | r \rangle \hat{a}_{k\sigma'} = \sum_k \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_{k\sigma} \quad (19)$$

Тогда из (17) имеем уравнение для $\hat{a}_{k\sigma}$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}_{k\sigma} = \xi_k \hat{a}_{k\sigma} + \sigma \Delta \hat{a}_{-k-\sigma}^+. \quad (20)$$

Диагонализуем это уравнение с помощью преобразования Боголюбова

$$\hat{a}_{k\sigma} = u_k \hat{b}_{k\sigma} - \sigma v_k^* \hat{b}_{-k-\sigma}^+ \quad (21)$$

Операторы поглощения и рождения квазичастиц $\hat{b}_{k\sigma}$, $\hat{b}_{-k-\sigma}^+$ должны быть собственными функциями оператора энергии $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{b}_{k\sigma} = \varepsilon_k \hat{b}_{k\sigma}, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{b}_{-k-\sigma}^+ = -\varepsilon_k \hat{b}_{-k-\sigma}^+$$

Кроме того, операторы частиц и квазичастиц должны удовлетворять одинаковым правилам антикоммутации

$$\{\hat{a}_{k\sigma}, \hat{a}_{k'\sigma'}^+\} = u_k^2 \{\hat{b}_{k\sigma}, \hat{b}_{k'\sigma'}^+\} + v_k^2 \{\hat{b}_{-k-\sigma}^+, \hat{b}_{-k'-\sigma'}\} = \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'}$$

и, следовательно:

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad (22)$$

Подстановка (21) в (20) дает

$$(\varepsilon_k - \xi_k) u_k \hat{b}_{k\sigma} + (\varepsilon_k + \xi_k) \sigma v_k^* \hat{b}_{-k-\sigma}^+ = \sigma \Delta (u_k^* \hat{b}_{-k-\sigma}^+ + \sigma v_k \hat{b}_{k\sigma})$$

Отсюда

$$\begin{aligned} (\varepsilon_k - \xi_k) u_k &= \Delta v_k \\ (\varepsilon_k + \xi_k) v_k &= \Delta^* u_k \end{aligned}$$

Решая эту систему уравнений находим энергию квазичастиц

$$\varepsilon_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2} \quad (23)$$

и коэффициенты преобразования⁹

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}\right)}, \quad v_k = \frac{\Delta^*}{|\Delta|} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}\right)}, \quad 2u_k v_k^* = \frac{\Delta}{\varepsilon_k}, \quad |u_k|^2 - |v_k|^2 = \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}. \quad (24)$$

Преобразование от операторов поглощения и рождения электронов к операторам квазичастиц диагонализует гамильтониан (8), и он равен сумме энергии основного состояния и энергии квазичастиц

$$H_s = E_0 + \sum \varepsilon_k \hat{b}_{k\sigma}^+ \hat{b}_{k\sigma} \quad (25)$$

Итак, конденсация куперовских пар привела к тому, что спектр квазичастиц имеет щель $|\Delta|$. Критерий сверхтекучести Ландау гласит, что вещество является сверхтекучим, если минимальное значение отношения

$$v_c = \min \frac{\varepsilon_k}{k} \quad (26)$$

отлично от нуля. В данном случае

$$v_c = \frac{|\Delta|}{k_F}. \quad (27)$$

Следовательно, состояние с конденсатом куперовских пар является сверхтекучим, и максимальная плотность сверхтекучего тока равна

$$j_c = en \frac{|\Delta|}{k_F}. \quad (28)$$

⁹Здесь мы не обсуждаем выбор знака перед радикалом при решении получающихся квадратных уравнений. Это будет подробно сделано ниже в разделе

Это заключение, существенно опирается на то обстоятельство, что $|\Delta| \neq 0$. Выясним, при каких условиях это имеет место

Соотношения (24) самосогласованным образом определяют величину щели в спектре возбуждений квазичастиц Δ . Вычислим правую часть (18)), используя разложение (19) и преобразования Боголюбова (21), (24):

$$\begin{aligned} \Delta &= \sigma U_0 \left\langle \hat{\Psi}_{-\sigma}(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\sigma}(t, \mathbf{r}) \right\rangle = \sigma U_0 \left\langle \sum_{k'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik'r} \hat{a}_{k'-\sigma} \sum_k \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} \hat{a}_{k\sigma} \right\rangle \\ &= \frac{\sigma U_0}{V} \sum_{kk'} e^{ik'r} e^{ikr} \left\langle \left(u_{k'} \hat{b}_{k'-\sigma} + \sigma v_{k'}^* \hat{b}_{-k'\sigma}^+ \right) \left(u_k \hat{b}_{k\sigma} - \sigma v_k^* \hat{b}_{-k-\sigma}^+ \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (29)$$

Средние значения для произведений операторов квазичастиц равны

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{b}_{k'-\sigma} \hat{b}_{k\sigma} \right\rangle &= \left\langle \hat{b}_{-k'\sigma}^+ \hat{b}_{-k-\sigma}^+ \right\rangle = 0, \quad \left\langle \hat{b}_{-k'\sigma}^+ \hat{b}_{k\sigma} \right\rangle = n_{bk} \delta_{-k'k}, \quad \left\langle \hat{b}_{k'-\sigma} \hat{b}_{-k-\sigma}^+ \right\rangle \\ &= (1 - n_{bk}) \delta_{-k'k}. \end{aligned}$$

Выражение (29) принимает вид

$$\Delta = -\frac{U_0}{2V} \sum_k \frac{\Delta}{\varepsilon_k} (1 - 2n_{bk})$$

Это уравнение имеет тривиальное решение $\Delta = 0$. Сокращая на щель, получаем неявное интегральное уравнение на $|\Delta|$

$$1 = -\frac{U_0}{2V} \sum_k \frac{1}{\varepsilon_k} (1 - 2n_{bk}). \quad (30)$$

Поскольку число введенных ферми-квазичастиц не сохраняется, то их химпотенциал равен нулю то

$$n_{bk} = (1 + \exp(\varepsilon_k/T))^{-1} < 1/2.$$

Поэтому $(1 - 2n_{bk}) > 0$. Следовательно, уравнения (30) имеет решение только, если $U_0 < 0$. Заменяя в (30) сумму на интеграл $\left(\sum_k = \frac{1}{2} V \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\xi \nu(\xi) \right)$ (в определении $\nu(\xi)$ входит суммирование по спину) и пренебрегая зависимостью плотности состояний от энергии, получаем интегральное уравнение

$$1 = \frac{|U_0|}{2} \nu(0) \int_0^{\hbar\omega_D} d\varepsilon_k \frac{1}{\varepsilon_k} (1 - 2n_{bk}). \quad (31)$$

Это есть неявное уравнение для нахождения энергетической щели. Строго говоря, нужно еще показать, что возникшее новое *основное сверхпроводящее* состояние с $\Delta \neq 0$ имеет энергию ниже, чем *основное нормальное* состояние, что будет сделано ниже.

Теория БКШ Ввиду важности и нетривиальности результатов полученных в предыдущем разделе, приведем несколько иной их вывод. Это позволит лучше почувствовать структуру элементарных возбуждений и природу возникновения энергетической щели в спектре элементарных возбуждений. Кроме того, мы аккуратно покажем, что перестроенное основное сверхпроводящее состояние обладает меньшей энергией по сравнению с основным нормальным состоянием.

Напомним, как классифицируются элементарные возбуждения в *невозмущаемом* ферми-газе. При температуре, равной нулю, электроны заполняют в импульсном пространстве сферу радиуса, равного импульсу Ферми p_F . Обозначим это многочастичное состояние через $|0\rangle$. Переведем частицу с уровня Ферми в состояние с некоторым импульсом $p > p_F$. Тогда это состояние можно представить как $a_p^+ |0\rangle$. Энергия такого возбуждения равна $\xi = p^2/2m - p_F^2/2m$. Переведем теперь электрон из состояния с импульсом $p < p_F$ на поверхность Ферми. Полученное состояние есть ферми-сфера с "дыркой". Оно имеет энергию $\xi = p_F^2/2m - p^2/2m$. Это возбужденное состояние можно записать в виде $a_p |0\rangle$. Если формально ввести новые операторы рождения и уничтожения

$$b_p = a_p, p > p_F, \quad b_p^+ = a_p, p < p_F. \quad (32)$$

то для *всех* p операторы b_p^+ описывают рождение возбуждения, а b_p описывают уничтожение возбуждения.

Рассмотрим как изменится эта картина во взаимодействующем ферми-газе. Если взаимодействуют электроны в узкой корочке $|p - p_F| \leq \hbar\omega_D$, то для таких импульсов описанный сценарий построения элементарных возбуждений (32) становится несправедливым. Элементарные возбуждения, соответствующие операторам b_p , должны быть *суперпозицией* a и a^+ (преобразование Боголюбова)

$$b_{p+} = u_p a_{p+} - v_p a_{-p-}^+, \quad b_{p-} = u_p a_{-p-} + v_p a_{p+}^+, \quad (33)$$

Для дальнейшего важно, что при $p \gg p_F$ и $p \ll p_F$ сценарий, отвечающий (33), должен переходить в (32). Это означает, что

$$\begin{aligned} u_p &\rightarrow 1, v_p \rightarrow 0, \text{ если } p \gg p_F, \\ u_p &\rightarrow 0, v_p \rightarrow 1, \text{ если } p \ll p_F. \end{aligned} \quad (34)$$

Преобразование, обратное (33), имеет вид

$$\begin{aligned} a_{p+} &= u_p b_{p+} + v_p b_{-p-}^+, \quad a_{p-} = u_p b_{p-} - v_p b_{-p+}^+, \\ a_{p+}^+ &= u_p b_{p+}^+ + v_p b_{-p-}, \quad a_{p-}^+ = u_p b_{p-}^+ - v_p b_{-p+}. \end{aligned} \quad (35)$$

Вычислим антикоммутиатор

$$\begin{aligned} \{a_{p+}, a_{p+}^+\} &= u_p^2 \{b_{p+}, b_{p+}^+\} + v_p^2 \{b_{-p-}, b_{-p-}^+\} + \\ &+ u_p v_p \{b_{p+}, b_{-p-}\} + u_p v_p \{b_{p+}, b_{-p-}\} = 1. \end{aligned} \quad (36)$$

Потребуем, чтобы новые операторы подчинялись тем же фермиевским коммутационным соотношениям

$$\begin{aligned} \{b_{p\sigma}, b_{p\sigma}^+\} &= 1, \\ \{b_{p\sigma}, b_{p\sigma}\} &= 0. \end{aligned} \quad (37)$$

Чтобы условие (36) было при этом непротиворечивым, необходимо, чтобы

$$u_p^2 + v_p^2 = 1. \quad (38)$$

Исходный гамильтониан в импульсном представлении имеет вид

$$H = \sum_{p\sigma} \frac{p^2}{2m} a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} - \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} a_{\mathbf{p}'+}^+ a_{-\mathbf{p}'-}^+ a_{-\mathbf{p}-} a_{\mathbf{p}+}, \quad (39)$$

g - амплитуда рассеяния двух ферми частиц друг на друге. Здесь первый член есть кинетическая энергия электронов. Второй член описывает рассеяние друг на друге электронов с противоположными импульсами и спинами. Этот гамильтониан называется гамильтонианом Бардина-Купера-Шриффера (БКШ).

При выводе уравнений Гинзбурга-Ландау исследовался минимум свободной энергии. В данном разделе, чтобы не учитывать явным образом сохранение частиц, введем химический потенциал системы электронов $\mu = p_F^2/2m$ и будем решать задачу в рамках большого канонического ансамбля. Вместо свободной энергии минимум должен иметь потенциал $\Omega = F - \mu N = E - TS - \mu N = (E - \mu N) - TS$, где оператор числа частиц $N = \sum_{p\sigma} a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma}$. Формально это отвечает рассмотрению свободной энергии с гамильтонианом $H' = H - \mu N$. Итак, гамильтониан задачи имеет вид (в этом разделе мы для простоты полагаем объем $V = 1$)

$$H' = H_0 + H_{int}, \quad (40)$$

$$H_0 = \sum_{p\sigma} \xi_p a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \dots H_{int} = -g \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} a_{\mathbf{p}'+}^+ a_{-\mathbf{p}'-}^+ a_{-\mathbf{p}-} a_{\mathbf{p}+}, \quad (41)$$

где $\xi_p = p^2/2m - \mu$. Тогда

$$\begin{aligned} \xi_p &> 0, \quad \text{при } p > p_F, \\ \xi_p &< 0, \quad \text{при } p < p_F. \end{aligned} \quad (42)$$

Сейчас мы хотим, используя преобразование (35), найти энергию основного состояния и энергию элементарных возбуждений. Сделаем подстановку (35) в выражение (39). Для вычисления энергии системы необходимо вычислить диагональный матричный элемент гамильтониана в базисе собственных функций оператора $b_p^+ b_p$. Введем обозначение $n_p = \langle b_p^+ b_p \rangle$. Здесь $\langle \dots \rangle$ обозначают статистическое усреднение - квантово-механическое вычисление диагонального матричного элемента с последующим усреднением по Гиббсу. С учетом условия (38) и коммутационных соотношений (37) преобразуем $\langle H_0 \rangle$ к виду

$$E_0 = 2 \left(\sum_p \xi_p v_p^2 + \sum_p \xi_p (1 - 2v_p^2) n_p \right). \quad (43)$$

В отсутствие магнитного поля заселенность не зависит от проекции спина. Поэтому в последнем выражении учтено, что $n_{p+} = n_{p-} = n_p$. Вычисляя $\langle H_{int} \rangle$,

учтем, что диагональные матричные элементы получаются, только от *независимого* взятия диагональных членов от $a_{p'}^+ a_{-p'}^+$ и $a_{-p} a_p$, соответственно, поскольку в H_{int} имеется условие $p \neq p'$. В результате находим

$$E_{int} = -g \left[\sum_p u_p v_p (1 - 2n_p) \right]^2 \quad (44)$$

Свободная энергия системы $F = E - TS = (E_0 + E_{int}) - TS$ зависит от параметров u_p, v_p, n_p . Выбор этих параметров осуществим, исходя из условия минимума F . Поскольку энтропия системы зависит только от чисел заполнения n_p , то минимум свободной энергии по отношению к параметрам u_p, v_p достигается минимизацией $E_0 + E_{int}$ по v_p при фиксированном наборе чисел заполнения, чему соответствует заданная энтропия.

Приравняем к нулю вариацию $E_0 + E_{int}$ по v_p . Учтем, что из $u_p^2 + v_p^2 = 1$ следует

$$\frac{\partial u}{\partial v} = -\frac{v}{u}.$$

Тогда

$$4\xi_p v_p (1 - 2n_p) + 2\Delta \frac{(v_p^2 - u_p^2)}{u_p} (1 - 2n_p) = 0, \quad (45)$$

причем мы ввели обозначение

$$\Delta = g \sum_p u_p v_p (1 - 2n_p). \quad (46)$$

Для ферми-частиц с нулевым химпотенциалом

$$1 - 2n_p > 0. \quad (47)$$

Сокращая уравнение (45) на $1 - 2n_p > 0$ (см. предыдущий раздел), получим

$$2\xi_p u_p v_p = (u_p^2 - v_p^2) \Delta \quad (48)$$

Решим совместно систему уравнений (38) и (48). Для решения удобно возвести в квадрат уравнение (48) и воспользоваться тождеством $(u_p^2 - v_p^2)^2 = 1 - 4u_p^2 v_p^2$. Тогда получим

$$4\xi_p^2 u_p^2 v_p^2 = (1 - 4u_p^2 v_p^2) \Delta^2$$

откуда

$$u_p v_p = \pm \frac{\Delta}{2\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} \quad (49)$$

Рассмотрим случай, когда правая часть взята со знаком плюс. Подставляя (49) в (48) и учитывая (38), получим

$$\begin{pmatrix} u_p^2 \\ v_p^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\xi_p}{\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} \right) \quad (50)$$

Рассмотрим поведение функций u_p и v_p , например, при $p > p_F$. Легко убедиться, что при $|\Delta| \ll |\xi_p|$, благодаря тому, что $\xi_p > 0$ (см. (42)) из (50) следует, что $u_p \rightarrow 1$ и $v_p \rightarrow 0$, как это и должно быть в соответствии с требованием (34). Если бы в (49) был взят другой знак, то критерий (34) не имел бы места.

Подставляя выражение (49) со знаком *плюс* в (46), получим уравнение

$$\Delta \left(\frac{g}{2} \sum_p \frac{(1 - 2n_p)}{\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} - 1. \right) = 0.$$

Это уравнение имеет неинтересное нетривиальное решение $\Delta = 0$, но может иметь и *нетривиальное* решение, удовлетворяющее условию

$$\frac{g}{2} \sum_p \frac{(1 - 2n_p)}{\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} = 1. \quad (51)$$

В силу условия (??) находим, что уравнение (51) имеет решение только если $g > 0$.

Используя полученные значения u_p и v_p , находим выражение для энергии

$$\begin{aligned} E = & \sum_p \xi_p \left(1 - \frac{\xi_p}{\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} \right) + \frac{2n_p \xi_p^2}{\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} - \\ & - \Delta^2 \sum_p \frac{(1 - 2n_p)}{2\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}}. \end{aligned} \quad (52)$$

Здесь, при вычислении последнего члена в (52) мы воспользовались (51).

14.4 Энергия основного состояния

Энергия основного состояния есть значение E при нулевой температуре. Температуре $T = 0$ отвечают числа заполнения $n_p = 0$. Поэтому в основном состоянии для перестроенного спектра

$$\begin{aligned} E_g(\Delta) &= \sum_p \xi_p \left(1 - \frac{\xi_p}{\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} \right) - \Delta^2 \sum_p \frac{1}{2\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} = \\ &= \sum_p \left[\left(\xi_p - \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2} \right) + \frac{\Delta^2}{2\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} \right]. \end{aligned} \quad (53)$$

Если бы взаимодействия не было, то энергия основного нормального состояния равнялась бы энергии ферми-сферы

$$E_g = 2 \sum_{p < p_F} \xi_p.$$

Запишем изменение энергии основного состояния:

$$\begin{aligned}
 E_g(\Delta) - E_g &= \sum_{p>p_f} \left[\left(\xi_p - \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2} \right) + \frac{\Delta^2}{2\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} \right] + \\
 &+ \sum_{p<p_f} \left[\left(-\xi_p - \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2} \right) + \frac{\Delta^2}{2\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} \right] = \\
 &= \sum_p \left[\left(|\xi_p| - \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2} \right) + \frac{\Delta^2}{2\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} \right] = \\
 &= 2 \sum_{p>p_f} \left[\left(\xi_p - \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2} \right) + \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} \right].
 \end{aligned}$$

Докажем, что для перестроенного состояния $E_g(\Delta) < E_g$.

Имеем:

$$I_1 = 2 \sum_{p>p_f} \xi_p = 2 \frac{\nu_F}{2} \int_0^{\hbar\omega_D} \xi_p d\xi_p = \frac{\nu_F}{2} (\hbar\omega_D)^2. \quad (54)$$

$$I_2 = 2 \sum_{p>p_f} \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2} = 2 \frac{\nu_F}{2} \int_0^{\hbar\omega_D} \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} d\xi = \Delta^2 \nu_F \int_0^{\hbar\omega_D/\Delta} \sqrt{x^2 + 1} dx \quad (55)$$

Поскольку (подстановка $x = \sinh y$)

$$\int \sqrt{x^2 + 1} dx = \int dy \cosh^2 y = \frac{1}{4} \sinh(2y) + \frac{y}{2} = \frac{1}{2} \left(x\sqrt{x^2 + 1} + \operatorname{Arsh} x \right),$$

то

$$I_2 = \Delta^2 \frac{\nu_F}{2} (\hbar\omega_D/\Delta) \left[1 + (\hbar\omega_D/\Delta)^2 \right]^{1/2} + \Delta^2 \frac{\nu_F}{2} \operatorname{Arsh} (\hbar\omega_D/\Delta). \quad (56)$$

Из (51) следует, что

$$\sum_{p>p_f} \frac{\Delta^2}{\sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}} = \frac{\Delta^2}{g}. \quad (57)$$

Итак,

$$E_g(\Delta) - E_g = \frac{\nu_F}{2} (\hbar\omega_D)^2 - \Delta^2 \frac{\nu_F}{2} (\hbar\omega_D/\Delta) \left[1 + (\hbar\omega_D/\Delta)^2 \right]^{1/2} - \quad (58)$$

$$- \Delta^2 \frac{\nu_F}{2} \operatorname{Arsh} (\hbar\omega_D/\Delta) + \frac{\Delta^2}{g}. \quad (59)$$

В силу (??) последняя строка в (58) обращается в нуль. Из выражения (58) немедленно следует, что $E_g(\Delta) - E_g < 0$. При $\hbar\omega_D/\Delta \gg 1$

$$E_g(\Delta) - E_g = \frac{\nu_F}{2} (\hbar\omega_D)^2 - \Delta^2 \frac{\nu_F}{2} (\hbar\omega_D/\Delta) \left[1 + (\hbar\omega_D/\Delta)^2 \right]^{1/2} \approx -\frac{\nu_F \Delta^2}{4}. \quad (60)$$

Таким образом, энергия основного состояния сверхпроводящего состояния ($\Delta \neq 0$) ниже энергии нормального состояния.

14.5 Температурная зависимость энергетической щели

Вычислим теперь Δ при $T = 0$. Из (51) имеем

$$1 = \frac{g\nu_F}{2} \int_0^{\omega_D} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2}} d\xi. \quad (61)$$

Следовательно

$$\frac{g\nu_F}{2} \text{Arsh}(\hbar\omega_D/\Delta_0) = 1. \quad (62)$$

Откуда

$$\Delta_0 = \hbar\omega_D / \text{sh}\left(\frac{2}{g\nu_F}\right) \quad (63)$$

Поэтому, если взаимодействие мало, т.е. $\frac{g\nu_F}{2} \ll 1$, то

$$\Delta_0 = 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{2}{g\nu_F}\right). \quad (64)$$

Таким образом, поскольку $\Delta_0 \neq 0$, то сколь угодно слабое притяжение приводит к уменьшению энергии основного состояния, отделенного от невозмущенного состояния щелью (60). Этот результат есть многочастичное обобщение задачи Купера. Обратим внимание, что этот результат не может быть получен в рамках теории возмущений по взаимодействию.

Найдем, при какой температуре щель Δ обращается в нуль. Имеем из (51)

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{g\nu_F}{2} \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\tanh\left(\frac{\xi}{T_c}\right)}{\xi} d\xi \simeq \\ &\simeq \frac{g\nu_F}{2} \left[\int_0^1 \text{th}(z)/z + \int_1^{\hbar\omega_D/T_c} \frac{dz}{z} \right] \simeq \\ &\simeq \frac{g\nu_F}{2} \ln(\omega_D/T_c). \end{aligned} \quad (65)$$

Точное значение интеграла (65)

$$\frac{g\nu_F}{2} \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\tanh\left(\frac{\xi}{T_c}\right)}{\xi} d\xi = \frac{g\nu_F}{2} \ln \frac{2\hbar\omega_D\gamma}{\pi T_c} = 1, \quad (66)$$

где $\gamma = 1,78$. Поэтому

$$T_c = 1.14\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{2}{g\nu_F}\right). \quad (67)$$

Сравним (64) с (67):

$$\Delta_0 \approx 1.76T_c.$$

Заметим, что поскольку $\omega_D \sim M^{-1/2}$, то (67) объясняет изотоп-эффект (1).

Установим закон, по которому вблизи T_c щель обращается в нуль. Из (51) и (??) имеем

$$1 = \frac{g\nu_F}{2} \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \frac{\tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2T}}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}. \quad (68)$$

Из подынтегрального выражения (68) выделим его значение с нулевой щелью

$$1 = \frac{g\nu_F}{2} \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \frac{\tanh \frac{\xi}{2T}}{\xi} + \frac{g\nu_F}{2} \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \left[\frac{\tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2T}}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} - \frac{\tanh \left(\frac{\xi}{2T} \right)}{\xi} \right]. \quad (69)$$

Первый член справа определяется (65), а второй член на верхнем пределе сходится, и этот предел можно заменить на бесконечность:

$$\begin{aligned} J &= \int_0^{\infty} d\xi \left[\frac{\tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2T}}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} - \frac{\tanh \left(\frac{\xi}{2T} \right)}{\xi} \right] \\ &= \int_0^{\infty} dx \left[\frac{\tanh \frac{\sqrt{x^2 + (\Delta/T)^2}}{2}}{\sqrt{x^2 + (\Delta/T)^2}} - \frac{\tanh \frac{x}{2}}{x} \right] \simeq -A (\Delta/T)^2, \end{aligned}$$

где $A \simeq 0.1$. Уравнение (69) принимает вид

$$1 \equiv \frac{g\nu_F}{2} \ln \frac{2\hbar\omega_D\gamma}{\pi T_c} = \frac{g\nu_F}{2} \ln \frac{2\hbar\omega_D\gamma}{\pi T} - A (\Delta/T)^2.$$

Тогда

$$0 = \left(\ln \frac{T_c}{T} - A (\Delta/T)^2 \right).$$

Поэтому вблизи T_c

$$\Delta = \sqrt{T_c \frac{T_c - T}{A}}. \quad (70)$$

14.6 Элементарные возбуждения и сверхпроводимость

В духе феноменологической теории ферми-жидкости Ландау определим энергию возбуждений в системе ε_p как вариационную производную

$$\varepsilon_{p\sigma} = \frac{\delta E}{\delta n_{p\sigma}} = \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2} > 0 \quad (71)$$

($E = ?$)Итак, если существует нетривиальное решение (51), то, во-первых, имеет место перестройка основного состояния в состояние с меньшей энергией (60). Во вторых, из (71) следует, что элементарные возбуждения имеют минимальное значение Δ . Таким образом, на языке квазичастиц энергия системы равна

$$E = E_{sg} + \sum_{p\sigma} \varepsilon_p n_{p\sigma}. \quad (72)$$

Напомним, как из полученных результатов следует сверхпроводимость. Закон дисперсии возбуждений (71) обнаруживает, что $\min \left(\frac{\varepsilon_p}{p} \right) = \frac{\Delta}{p_F} > 0$. Это свойство, в соответствии с критерием сверхтекучести Ландау, означает, что система, ферми-газ с притяжением, обладает свойствами сверхтекучести – возможно бездиссипативное течение электронной жидкости, то есть сверхпроводимость.

14.7 Незатухающий электрический ток.

Уравнение Шредингера для одного электрона в э.м. поле имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi \right) \psi \quad (73)$$

Введем фазовое преобразование $\chi = \chi(r, t)$

$$\psi = \psi_0 e^{ix}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= e^{ix} \left(i\hbar \frac{\partial \psi_0}{\partial t} - \hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} \psi_0 \right), \\ (-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \psi &= e^{ix} (-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} A + (\hbar \nabla \chi)) \psi_0, \\ (-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} A)^2 \psi &= e^{ix} (-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} A + (\hbar \nabla \chi))^2 \psi_0. \end{aligned}$$

Одновременно рассмотрим градиентное преобразование

$$-\frac{e}{c} A_0 = -\frac{e}{c} A + (\hbar \nabla \chi), \quad e\varphi_0 = e\varphi + \hbar \frac{\partial \chi}{\partial t}. \quad (74)$$

Выбираем фазу преобразования, так, чтобы в представлении с индексом нуль отсутствовал электрический потенциал

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = -\frac{e}{\hbar} \varphi. \quad (75)$$

Уравнение (73) преобразуется к виду

$$i\hbar \frac{\partial \psi_0}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}_0 \right)^2 \right] \psi_0 \quad (76)$$

Переход от (73) к (76) называется калибровочным преобразованием. При этом преобразовании меняются и потенциалы поля, и фаза волновой функции. Это – формальное преобразование, и оба уравнения описывают одно и то же движение электрона.

В такой калибровке во вторичном квантовании гамильтониан системы электронов (8) имеет вид:

$$\hat{H} = \int d^3r \left[\hat{\Psi}_{0\sigma}^+(t, \mathbf{r}) \left(\frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}_0 \right)^2}{2m} - \mu \right) \hat{\Psi}_{0\sigma}(t, \mathbf{r}) + \frac{1}{2} g \hat{\Psi}_{0\sigma}^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_{0-\sigma}^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_{0-\sigma}(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_{0\sigma}(t, \mathbf{r}) \right] \quad (77)$$

Введем обозначение $-\frac{e}{c} \mathbf{A}_0 = \mathbf{v}_s m$, и ограничимся линейным приближением по магнитному полю (квадратичный член содержит скорость света c в знаменателе). Тогда

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \quad (78) \\ \hat{H}_1 &= \int d^3r \left[\hat{\Psi}_{0\sigma}^+(t, \mathbf{r}) \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu \right) \hat{\Psi}_{0\sigma}(t, \mathbf{r}) + \frac{1}{2} g \hat{\Psi}_{0\sigma}^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_{0-\sigma}^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_{0-\sigma}(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_{0\sigma}(t, \mathbf{r}) \right] \\ \hat{H}_2 &= \int d^3r \hat{\Psi}_{0\sigma}^+(t, \mathbf{r}) (\hat{\mathbf{p}} \mathbf{v}_s) \hat{\Psi}_{0\sigma}(t, \mathbf{r}) \end{aligned}$$

(Здесь мы воспользовались тем, что, если дополнительно потребовать, чтобы $\text{div} \mathbf{A} = 0$, то операторы $\hat{\mathbf{p}}$ и \mathbf{A} коммутируют) Первый член H_1 – гамильтониан сверхпроводника без поля, который в импульсном представлении имеет вид (39), а второй член равен

$$\hat{H}_2 = \int d^3r \hat{\Psi}_{0\sigma}^+(t, \mathbf{r}) (\hat{\mathbf{p}} \mathbf{v}_s) \hat{\Psi}_{0\sigma}(t, \mathbf{r}) = \int d^3r \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ (\hat{\mathbf{p}} \mathbf{v}_s) \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}'} = \mathbf{v}_s \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}}$$

В основном состоянии без поля система электронов находится в состоянии покоя. Поэтому импульс системы в поле равен импульсу квазичастиц. Это легко доказать с помощью преобразования Боголюбова, оставив только диагональные члены,

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{k} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (79)$$

В результате гамильтониан сверхпроводника в поле принимает вид

$$H = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma} + \mathbf{v}_s \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma} \quad (80)$$

Мы видим, что энергия квазичастицы в поле деформируется

$$H = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mathbf{v}_s \mathbf{k}, \quad \mathbf{v}_s = -\frac{e}{mc} \mathbf{A}_0 \quad (81)$$

Поскольку для спаренных электронов характерное значение импульса есть p_F , то минимальная энергия возбуждения

$$\min \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = |\Delta| - v_s p_F.$$

В соответствии с критерием Ландау (27) сверхпроводящее состояние разрушается если $\min \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} \leq 0$. Значит, сильное магнитное поле разрушает сверхпроводник, если

$$v_s = \frac{e}{mc} \mathbf{A}_0 > v_c = \frac{|\Delta|}{p_F} \quad (82)$$

Свяжем величину v_s с электрическим током, который в сверхпроводнике генерируется не электрическим, а магнитным полем. Согласно квантовой механике, плотность электрического тока, создаваемого электронами в присутствии магнитного потенциала, равна (вспомним, что скорость заряженной частицы есть отношение кинематического импульса $(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}_0)$ к массе)

$$\mathbf{j} = evn = e \left\langle \text{Re} \hat{\Psi}_0^+ \frac{(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}_0)}{m} \hat{\Psi}_0 \right\rangle = e \sum \left(\frac{\mathbf{k}}{m} + \mathbf{v}_s \right) \langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle.$$

Внесем знак суммы под знак статистического усреднения

$$\mathbf{j} = ev_s \left\langle \sum \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \right\rangle + \frac{e}{m} \left\langle \sum \mathbf{k} \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \right\rangle \quad (83)$$

Тогда в первом члене получаем полное число электронов N_e , а во втором – с учетом (79) – ток квазичастиц

$$\mathbf{j} = ev_s N_e + \frac{e}{m} \left\langle \sum \mathbf{k} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma} \right\rangle \quad (84)$$

(Заметим, что в силу (83) ток обращается в нуль, когда $P = \left\langle \sum \mathbf{k} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma} \right\rangle = -m \mathbf{v}_s N_e$ т.е. когда импульс квазичастиц полностью компенсирует суммарный импульс электронов, двигающихся как целое со скоростью \mathbf{v}_s)

При нулевой температуре квазичастиц нет, и в системе существует незатухающий ток

$$\mathbf{j} = ev_s N_e$$

Из этой формулы следует, что в образовании сверхтекучего электрического тока принимают участие все электроны. Это удивительно, поскольку при переходе в сверхпроводящее состояние по Боголюбову перестраиваются только электроны в узкой корочке около поверхности Ферми.

При $T \neq 0$ в термодинамическом равновесии число квазичастиц в заданном состоянии равно

$$n_{bk} = \left\langle \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma} \right\rangle = \frac{1}{e^{\beta \tilde{\varepsilon}_k} + 1}.$$

Энергия квазичастиц зависит от направления. Если скорость мала, то $\tilde{\varepsilon}_k \approx \varepsilon_k + \mathbf{v}_s \mathbf{k}$ и

$$n_{bk}(\tilde{\varepsilon}_k) \approx n_{bk}(\varepsilon_k) + (\mathbf{v}_s \mathbf{k}) \frac{\partial n_{bk}}{\partial \varepsilon_k} \quad (85)$$

Только поправка в (85) дает вклад квазичастиц в электрический ток при подстановке (85) в (84):

$$\tilde{\mathbf{j}} = \frac{e}{m} \sum \mathbf{k} (\mathbf{v}_s \mathbf{k}) \frac{\partial n_{bk}}{\partial \varepsilon_k} = -\frac{e}{3m} \mathbf{v}_s \sum k^2 \left| \frac{\partial n_{bk}}{\partial \varepsilon_k} \right| \quad (86)$$

Здесь мы воспользовались тем, что, если перейти от суммирования к интегрированию по k , то

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k}(\mathbf{v}_s \mathbf{k}) \frac{\partial n_{b\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_k} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int dk \frac{\partial n_{b\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_k} \int \mathbf{k}(\mathbf{v}_s \mathbf{k}) d\Omega_k = \quad (87)$$

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int dk \frac{\partial n_{b\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_k} (4\pi/3) \mathbf{v}_s k^2 = \mathbf{v}_s/3 \frac{V}{(2\pi)^3} \int dk \frac{\partial n_{b\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_k} (4\pi/3) k^2 = \mathbf{v}_s/3 \sum_{\mathbf{k}} k^2 \frac{\partial n_{b\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_k} \quad (88)$$

Возникающий(87) здесь интеграл по углам считается так:

$$\int d\Omega \mathbf{k}(\mathbf{v}_s \mathbf{k}) = a \mathbf{v}_s. \quad (89)$$

Домножив обе части скалярно на \mathbf{v}_s , получим

$$a v_s^2 = \int d\Omega (\mathbf{v}_s \mathbf{k})^2 = 2\pi v_s^2 \int_0^\pi d(-\cos \theta) \cos^2(\theta) = v_s^2 4\pi/3. \quad (90)$$

То есть $a = 4\pi/3$.

Обратим внимание, что квазичастицы создают электрический ток (86), противоположный скорости \mathbf{v}_s , в направлении которой течет электрический ток электронов в основном состоянии. Таким образом, при фиксированном значении v_s с увеличением температуры сверхтекучий ток падает

$$\mathbf{j} = e \mathbf{v}_s N_s(T),$$

где плотность сверхтекучих электронов равна

$$N_s(T) = N_e + \frac{1}{3} \sum_{\mathbf{k}} k^2 \frac{\partial n_{b\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_k}$$

Когда

$$N_s(T) = 0,$$

сверхтекучесть пропадает. Это происходит при $T = T_c$

$$\frac{1}{3} \sum_{\mathbf{k}} k^2 \left(\frac{\partial n_{b\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_k} \right)_{T_c} = \frac{1}{3} \sum_{\mathbf{k}} k^2 \left(\frac{\partial n_{b\mathbf{k}}}{\partial |\xi_k|} \right)_{\Delta=0} = -N_e$$

Используя (82), напишем максимальный (критический) ток

$$\mathbf{j} = e \frac{\Delta}{p_F} N_s, \quad (91)$$

С помощью формул (74) вернемся в исходное представление

$$\mathbf{j} = \frac{e}{m} N_s \left(-\frac{e}{c} \mathbf{A} + (\hbar \nabla \chi) \right) \quad (92)$$

Это есть калибровочно-инвариантная формула для плотности тока сверхпроводящих электронов в электромагнитном поле. При калибровочном преобразовании меняется векторный потенциал и фаза волновой функции, но вид выражения в скобках остается неизменным. Этот ток существует в состоянии термодинамического равновесия, в отличие от тока электронов в нормальном состоянии, который есть проявление необратимого процесса с выделением тепла.

14.8 Теплоемкость сверхпроводника .

Тепловые свойства сверхпроводника определяются его возбуждениями - квазичастицами, которые можно рассматривать как ферми-газ с нулевым химическим потенциалом. Энтропия этого газа равна

$$S = - \sum [n \ln n + (1 - n) \ln(1 - n)]$$

$$n = (e^{\beta\varepsilon} + 1)^{-1}, \varepsilon = \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}.$$

Теплоемкость равна

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = \sum T \frac{\partial S}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial T} = - \sum T [\ln n - \ln(1 - n)] \frac{\partial n}{\partial T}$$

$$\ln n - \ln(1 - n) = \ln \frac{n}{1 - n} = - \ln\left(\frac{1}{n} - 1\right) = -\beta\varepsilon$$

Таким образом

$$C = \sum \varepsilon \frac{\partial n}{\partial T}.$$

При низких температурах теплоемкость экспоненциально мала. Вблизи критической температуры самое сложное - найти производную от распределения квазичастиц

$$\frac{\partial n}{\partial T} = \frac{\partial n}{\partial \beta\varepsilon} \frac{\partial \beta\varepsilon}{\partial T} = T \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \left(-\frac{\varepsilon}{T^2} + \frac{1}{T} \frac{1}{2\varepsilon} \frac{\partial \Delta^2}{\partial T}\right)$$

Квадрат щели линейно зависит от температуры

$$\frac{\partial \Delta^2}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} T_c \frac{T_c - T}{A} = -\frac{T_c}{A}$$

$$C_s = \sum \left| \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \right| \left(\frac{\varepsilon^2}{T} + \frac{T_c}{2A} \right) = C_n + \frac{T_c}{2A} \sum \left| \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \right| = C_n + \frac{T_c}{2A} \nu(0)$$

Так как $C_n = \frac{\pi^2}{3} \nu(0) T$, то скачек теплоемкости в точке фазового перехода равен

$$\frac{C_s - C_n}{C_n} = \frac{T_c \nu(0)}{2A \frac{\pi^2}{3} \nu(0) T} = \frac{3}{2A \pi^2} = 1,43$$

Электрон-фононное взаимодействие Покажем теперь, каким образом электрон-фононное взаимодействие может привести к эффективному притяжению электронов. В отсутствие взаимодействия между электронами и решеткой гамильтониан системы имеет вид.

$$H_0 = \sum_q \hbar \omega_q c_q^+ c_q + \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k. \quad (93)$$

Когда атомы решетки колеблются возникает локальная деформация решетки и возникает локальная поляризация, описываемая дипольным моментом $\mathbf{P}(\mathbf{r})$.

Возникающее при этом изменение плотности связанного заряда выражается через дипольный момент соотношением $\rho(\mathbf{r}) = -\operatorname{div}\mathbf{P}(\mathbf{r})$. Взаимодействие электрона, находящегося в точке \mathbf{r} , с этой поляризацией дается выражением

$$e \int Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \operatorname{div}\mathbf{P}.$$

Если бы не было дебаевской экранировки (см. наши *Лекции по физической кинетике*), то $Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ просто описывало бы кулоновское взаимодействие. В силу экранировки, кулоновское взаимодействие обрезается на межатомном расстоянии $a \sim \hbar/p_F$. Поэтому можно считать, что

$$Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = a^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Дипольный момент $P \sim neu$, где n – концентрация атомов, по порядку величины равная концентрации электронов, u – смещение узла решетки из положения равновесия. Рассмотрим вклад в $\operatorname{div}\mathbf{P}$ от некоторой фурье-компоненты флуктуацией $\operatorname{div}\mathbf{P}_k \sim V^{-1/2} iku_k$. Поэтому

$$V_k \sim V^{-1/2} i e^2 a^2 n (\omega/s) u_k.$$

Оператор смещения есть линейная комбинация операторов рождения и уничтожения фононов c^+ и c . В лекции по фононам было показано, что в это разложение операторы рождения и уничтожения входят в комбинации $i\sqrt{\frac{\hbar}{2nM\omega_k}} (c_k + c_k^+)$. Поэтому процесс, при котором происходит поглощение или испускание фонона описывается оператором

$$\begin{aligned} V_k &\sim V^{-1/2} i e^2 a^2 n (\omega_k/s)^{1/2} \sqrt{\frac{\hbar}{2nM\omega_k}} (c_k + c_k^+) \sim \\ &i V^{-1/2} \frac{n e^2 a^2}{s} \sqrt{\frac{\omega_k \hbar}{2nM}} = i V^{-1/2} (n a^3) \frac{e^2}{as} \sqrt{\frac{\omega_k \hbar}{2nM}} (c_k + c_k^+). \end{aligned} \quad (94)$$

Типичный масштаб энергий в металле есть e^2/a . Приравнивая эту величину кинетической части энергии колебаний $Ms^2/2$, получим для скорости звука оценку $s \sim a\omega_D \sim \sqrt{e^2/aM} \sim \sqrt{p_F^2/mM}$. Кроме того $na^3 \sim 1$. Подставляя эти оценки в (94), получим

$$V_k \sim i V^{-1/2} p_F \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2nm}} (c_k + c_k^+).$$

Поглощение или испускание фонона, происходит при рассеянии электрона. Полный гамильтониан системы электронов и фононов с учетом взаимодействия между ними может, таким образом, быть представлен в виде

$$\begin{aligned} H &= H_0 + V \\ H_0 &= \sum_q \hbar\omega_q c_q^+ c_q + \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k; V = D \sum_{kq} \sqrt{\hbar\omega_q} a_{k+q}^+ a_k (c_q + c_{-q}^+) \end{aligned} \quad (95)$$

Здесь c_q^+, c_q – операторы рождения и уничтожения фононов с импульсом и энергией q и ω_q соответственно; a_k^+, a_k – операторы рождения и уничтожения электронов с импульсом k и энергией ε_k , соответственно. Последний член в (95) описывает рассеяние электронов на колебаниях решетки с испусканием (поглощением)

фонона, причем D – матричный элемент перехода. Гамильтониан V описывает рассеяние электрона с испусканием или поглощением электрона. Гамильтониан рассеяния (БКШ) возникает как процесс второго порядка теории возмущений. Вместо стандартной теории возмущений удобно применить каноническое преобразование, предложенное Фрелихом,

$$\tilde{H} \equiv e^{-S} H e^S = H + [H, S] + \frac{1}{2} [[H, S], S] \dots \quad (96)$$

Переход от H к \tilde{H} с помощью унитарного канонического преобразования означает просто переход к другому базису, в котором гамильтониан может выглядеть проще.

Будем считать V малым возмущением по параметру D . Тогда S также мало по этому параметру. Выберем S из условия обращения в нуль в \tilde{H} линейных по D членов:

$$V + [H_0, S] = 0 \quad (97)$$

Во втором порядке теории возмущений

$$\begin{aligned} \tilde{H} \equiv e^{-S} H e^S &= H_0 + [V, S] + \frac{1}{2} [[H_0, S], S] + O(D^3) = \\ &= H_0 + \frac{1}{2} [V, S] + O(D^3) \end{aligned} \quad (98)$$

Перепишем (97) в базисе собственных функций гамильтониана H_0 с собственными значениями E_m . Тогда

$$S_{mn} = \frac{V_{mn}}{E_n - E_m}. \quad (99)$$

и эффективный гамильтониан рассеяния электронов через обмен виртуальным фононом равен

$$H_2 = \frac{1}{2} [V, S]$$

Для простоты ограничимся случаем нулевых температур (когда фононы возникают лишь виртуальным образом). Для вычисления энергии \tilde{H} нас интересует матричный элемент $\langle 0 | \tilde{H} | 0 \rangle$ (являющийся оператором по отношению к электронному гильбертову пространству). Здесь $|0\rangle$ – фононная компонента полной волновой функции электрон-фононной системы при отсутствии фононов. При вычислении энергии во втором порядке теории возмущений нас интересуют матричные элементы

$$\begin{aligned} \langle 1_q | S | 0 \rangle &= D \sum_k \frac{\sqrt{\hbar\omega_q} a_{k-q}^+ a_k}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} - \hbar\omega_q}, \\ \langle 0 | S | 1_q \rangle &= D \sum_k \frac{\sqrt{\hbar\omega_q} a_{k+q}^+ a_k}{\varepsilon_k + \hbar\omega_q - \varepsilon_{k+q}}, \end{aligned} \quad (100)$$

здесь $|1\rangle$ – фононная компонента волновой функции электрон-фононной системы с одним фононом в состоянии q . Очевидно, что

$$\langle 0 | V | 1_q \rangle = D \sqrt{\hbar\omega_q} \sum_k a_{k+q}^+ a_k, \quad (101)$$

$$\langle 1_q | V | 0 \rangle = D \sqrt{\hbar\omega_q} \sum_k a_{k-q}^+ a_k. \quad (102)$$

Используя (100)-(102), получим

$$\frac{1}{2} [V, S] = \frac{1}{2} D^2 \sum_{kqk'} a_{k'+q}^+ a_{k'} \frac{\hbar\omega_q a_{k-q}^+ a_k}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} - \hbar\omega_q} - \frac{\hbar\omega_q a_{k+q}^+ a_k}{\varepsilon_k + \hbar\omega_q - \varepsilon_{k+q}} a_{k'-q}^+ a_{k'} \quad (103)$$

Учитывая, что $\omega_q = \omega_{-q}$, во втором слагаемом делаем замену $q \rightarrow -q$ и переставим пары операторов $a_{k+q}^+ a_k$ и $a_{k'-q}^+ a_{k'}$. (Коммутатор этих операторов есть квадратичная форма по операторам и может быть включен в перенормировку ε_k .)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} D^2 \sum_{kqk'} \hbar\omega_q a_{k'+q}^+ a_{k'} a_{k-q}^+ a_k & \left(\frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} - \hbar\omega_q} - \frac{1}{\varepsilon_k + \hbar\omega_q - \varepsilon_{k+q}} \right) = \\ & = D^2 \sum_{kqk'} a_{k'+q}^+ a_{k'} a_{k-q}^+ a_k \frac{(\hbar\omega_q)^2}{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q})^2 - (\hbar\omega_q)^2} = \\ & = D^2 \sum_{kqk'} a_{k-q}^+ a_{k'+q}^+ a_{k'} a_k \frac{(\hbar\omega_q)^2}{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q})^2 - (\hbar\omega_q)^2}. \end{aligned} \quad (104)$$

Отсюда следует, что если

$$|\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q}| < \hbar\omega_q, \quad (105)$$

то амплитуда рассеяния двух электронов имеет отрицательный знак.

Итак, после канонического преобразования гамильтониан электрон-фононной системы имеет вид

$$H = H_0 + D^2 \sum_{kqk'} \frac{(\hbar\omega_q)^2}{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q})^2 - (\hbar\omega_q)^2} a_{k-q}^+ a_{k'+q}^+ a_{k'} a_k \quad (106)$$

Наибольший фазовый объем $\sim q^2$ отвечает процессам, в которых импульс q достигает своего максимального значения $q \sim \hbar/a$. Этому импульсу отвечает дебаевская энергия $\hbar\omega_D$. Поэтому в (106) можно заменить $\hbar\omega_q$ на $\hbar\omega_D$. Рассмотрим теперь только состояния, для которых $|\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q}| \ll \hbar\omega_D$. Тогда

$$H = H_0 - D^2 \sum_{kqk'} a_{k-q}^+ a_{k'+q}^+ a_{k'} a_k \quad (107)$$

Если перейти в этом выражении в координатное представление то мы получим для взаимодействия выражение типа (11). Это означает, обмен фононами во втором порядке теории возмущений, эквивалентен точечному притяжению. В силу принципа Паули это может иметь место, только если взаимодействуют электроны с противоположными спинами.

Очевидно, что если рассеиваются электроны с противоположными импульсами $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$, то в результате рассеяния должны получиться два электрона также с противоположными импульсами, причем это может быть *любой* импульс из этой корочки корочки. Если же рассеиваются электроны с одинаковыми импульсами (близкими к импульсу Ферми) то фазовый объем, доступный рассеянными электронам исчезающе мал. Поэтому основной вклад в рассеяние дают процессы в которых электроны имеют практически противоположные импульсы. Мы

рассматриваем модель, в которой только такое рассеяние и учитывается. Соображения, описанные выше обосновывают модель БКШ, описываемую гамильтонианом

$$H = H_0 - g \sum_{kq} a_{k+q,\sigma}^+ a_{-k+q,-\sigma}^+ a_{-k,-\sigma} a_{k,\sigma}, \quad g > 0 \quad (108)$$