

Микроскопическая теория сверхпроводимости

И.В. Бобкова, А.С.Мельников

Конспект лекций записан Анастасией
Яновской и Григорием Бобковым.

Не является учебным пособием, содержит лекционные заметки.

Оглавление

1	Вторичное квантование. Формализм чисел заполнения.	1
2	Электрон-фононное взаимодействие.	15
3	Ферми жидкость Ландау.	25
4	Задача Купера.	31
5	Уравнения Боголюбова-де-Женна.	37
6	Свойства однородного сверхпроводника. Наблюдаемые.	49
6.1	Спектр возбуждений сверхпроводника	49
6.2	Структура решения с фиксированной энергией	53
6.3	Уравнение самосогласования	54
6.4	Энергия конденсации	57
6.5	Плотность сверхтока.	60
7	Теорема Андерсона.	65
8	Андреевское отражение.	69

9	Андреевские уровни в SNS контакте. Ток-фазовая характеристика SNS контакта.	77
10	Модель ВТК	87
11	Метод Гриновских функций	95
11.1	Основные понятия о функции Грина.	95
11.2	Функция Грина невзаимодействующих электронов.	99
11.3	Функция Грина фононов.	108
11.4	Спектральное разложение для функций Грина.	109
11.5	Функция Грина при конечной температуре. .	114
11.6	Температурные функции Грина.	117
12	Уравнение Горькова. Связанное состояние на магнитной примеси	121
12.1	Уравнение Горькова	122
12.2	Связанное состояние на магнитной примеси .	127

Глава 1

Вторичное квантование. Формализм чисел заполнения.

Формализм чисел заполнения применяется в многочастичных задачах. Нам, для изложения микроскопической теории сверхпроводимости, он потребуется применительно к фермионам, поэтому основная часть данной главы посвящена рассмотрению именно этих частиц в рамках указанного формализма. Волновая функция для N тождественных частиц имеет вид $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{s}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{s}_2; \dots)$, где \mathbf{r}_i и \mathbf{s}_i - координата и спин i -ой частицы. Тождественность частиц накладывает условия на волновую функцию: она должна обладать определенной симметрией. Если в качестве частиц мы рассматриваем фермионы, то условие симметрии системы выражается в смене знака при перестановке любых двух частиц:

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{s}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{s}_2; \mathbf{r}_3, \mathbf{s}_3; \dots) = -\Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{s}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{s}_1; \mathbf{r}_3, \mathbf{s}_3; \dots) \quad (1.1)$$

Для бозонов же смены знака при перестановке частиц не происходит.

Нам интересно рассмотреть поведение электронов в сверхпроводнике. В этом материале электроны взаимодействуют друг с другом, о чем мы подробнее поговорим позже. Пока же рассмотрим для простоты систему невзаимодействующих фермионов.

Для одной частицы система описывается гамильтонианом $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r})$. Собственные волновые функции (с.ф.) этого гамильтониана зависят от квантовых чисел \mathbf{k}, σ (импульса и спина): $\psi_{\mathbf{k},\sigma}$. Уравнение Шредингера будет иметь вид: $H\psi_{\mathbf{k},\sigma} = E_{\mathbf{k},\sigma}\psi_{\mathbf{k},\sigma}$. Собственные функции рассматриваемого гамильтониана в отсутствие потенциальной энергии – плоские волны $\psi_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \chi_{\sigma}$, где Ω - объем системы, а χ_{σ} - двухкомпонентный спинор, соответствующий спиновому состоянию. При этом собственные числа гамильтониана имеют вид $E_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. (Здесь и далее мы будем полагать постоянную планка равной единице, чтобы не усложнять выкладки: $\hbar = 1$). Если же учесть потенциальную энергию, то индексация состояния с помощью k возможна, просто k теперь является не импульсом частицы, а абстрактным квантовым числом. Например, в периодическом потенциале $U(\mathbf{r})$ \mathbf{k} - квазиимпульс.

Теперь рассмотрим N таких невзаимодействующих частиц. Гамильтониан этих частиц – сумма одночастичных гамильтонианов $H_0 = \sum_{i=1}^N H_i$. H_i действует только на ψ_i . Тогда произведение

$$\Phi = \psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2)\psi_{k_3}(\mathbf{r}_3) \dots \psi_{k_N}(\mathbf{r}_N) \quad (1.2)$$

является с.ф. гамильтониана H_0 , а энергия при этом - суммой энергий отдельных частиц $E = \sum_{i=1}^N E_{k_i}$. Здесь $k_i \equiv (\mathbf{k}_i, \sigma_i)$, а спиновый индекс σ_i волновой функции $\psi_{k_i}(\mathbf{r}_i, \mathbf{s}_i)$

опущен для краткости.

Теперь для построения правильной в.ф. необходимо учесть, что для фермионов в.ф. антисимметрична (1.1). Линейная комбинация собственных функций гамильтониана также будет являться его собственной функцией. Тогда из волновых функций вида $\psi_{k_1}\psi_{k_2}\psi_{k_3}\dots\psi_{k_N}$ построим линейную комбинацию, называемую детерминантом Слэтера:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\mathbf{r}_1) & \dots & \psi_{k_1}(\mathbf{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_{k_N}(\mathbf{r}_1) & \dots & \psi_{k_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \quad (1.3)$$

Перестановке частиц (в координатном пространстве) соответствует перестановка столбцов детерминанта. Это приводит к смене знака в.ф., как того и требует фермионная симметрия. Для такой записи необходимо перенумеровать уровни (т.е. формально определить, к какому уровню относится индекс k_1 , к какому k_2 и т.д.). Общепринятой является договоренность $E_{k_1} < E_{k_2} < \dots$. Теперь кратко поясним, откуда в знаменателе возникает $\sqrt{N!}$. Уровней в системе может быть любое число, но заполнены из них частицами могут быть только N уровней. Есть $N!$ способов расставить пронумерованные частицы по выбранным уровням. В детерминанте Слэтера есть $N!$ слагаемых, отвечающих всем этим возможным перестановкам. Тогда в знаменателе в результате нормировки возникает $\sqrt{N!}$.

Теперь переходим к рассмотрению формализма чисел заполнения. Число заполнения - это число частиц в данном состоянии. В случае фермионов есть только два возможных варианта числа частиц в данном состоянии: $n_i = 0, n_i = 1$. В этом случае вместо $\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ пишется Φ_{n_1, \dots, n_i} , или $|n_1, \dots, n_i\rangle$, или $\langle \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i | n_1, \dots, n_i \rangle$ (в координатном представлении), где n_i - числа заполнения всех уровней, а не только N заполненных. Такие особые скобки называются бра и кет векторами, обозначениями Дирака.

Запись $|n_1, \dots, n_i\rangle$ удобна тем, что не привязана к конкретному представлению (координатному, импульсному). При этом она полностью определяет состояние, если задан базис: например, её можно переписать как детерминант Слэтера в координатном представлении.

Рассмотрим пример: частица находится в одномерной яме ширины L . Из курса квантовой механики известно, что $k_n = \frac{\pi n}{L}$. Посадим три частицы в состояния k_1, k_2, k_3 . Тогда в.ф. этого трехчастичного состояния будет иметь вид $|1110\dots\rangle$.

Переход к представлению чисел заполнения – не унитарное преобразование. Это в каком-то смысле тривиальное переобозначение. При помощи этого переобозначения мы сразу можем описывать и $|0\dots\rangle$, и $|100\dots\rangle$, и $|110\dots\rangle$ и т.д. состояния с разным числом частиц. Иными словами, полный базис в представлении чисел заполнения содержит переменное число частиц. Когда удобно использовать этот формализм? Когда имеются тождественные частицы, и их переменное число. Также этот формализм автоматически учитывает требуемую симметрию в.ф. Для физики конденсированного состояния формализм чисел заполнения является ключевым: в этой области работают с переменным числом тождественных частиц.

Следующей задачей будет записать операторы в представлении чисел заполнения. Для этого введем определения для двух операторов: оператора рождения

$$c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_i} (1 - n_i) |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (1.4)$$

и оператора уничтожения

$$c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_i} (n_i) |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (1.5)$$

Здесь \sum_i - множитель, возникающий из-за требований фермионной статистики. Он равен сумме всех n_j для $j < i$.

Есть два объяснения необходимости этого множителя. Подействуем на состояние $|100\dots\rangle$ операторами $c_{2,3}^\dagger$ в разном порядке: $c_2^\dagger c_3^\dagger |100\rangle$ и $c_3^\dagger c_2^\dagger |100\rangle$. В первом случае мы получим вектор $|1110\dots\rangle$, а во втором $-|1110\dots\rangle$. Видим, что есть отличие в знаке результата. Этого можно было ожидать, если заранее знать коммутационное соотношение для фермионов: $c_2^\dagger c_3^\dagger = -c_3^\dagger c_2^\dagger$. Отсюда видно, что множитель $(-1)^{\sum_i}$ необходимо ввести в определениях фермионных операторов. Но эта логика немного зациклена: коммутационные соотношения обычно и выводятся из определения операторов рождения и уничтожения. Более правильное объяснение – при добавлении двух частиц в одном или другом порядке (т.е. при перестановке координат $\mathbf{r}_{N+1}, \mathbf{r}_{N+2}$) знак конечного состояния будет разным.

Отметим, что одним из полезных свойств операторов рождения и уничтожения является то, что любое состояние многочастичной системы может быть получено из вакуума:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots |00\dots\rangle \quad (1.6)$$

Заметим, что пока ниоткуда не следует, что операторы рождения и уничтожения эрмитово сопряжены друг другу: мы просто обозначили их как c^\dagger и c . Факт сопряженности надо доказывать. Для этого рассмотрим матричные элементы c в базисе $|0\rangle, |1\rangle$

$$\langle n_i | c_i | n'_i \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

и для c^\dagger

$$\langle n_i | c_i^\dagger | n'_i \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

Отсюда легко видеть, что они действительно эрмитово сопряжены друг другу. Также отсюда следует, что эти операторы не эрмитовы, а значит не соответствуют никаким

физическим наблюдаемым. Но из них мы можем построить оператор $\hat{n}_i = c_i^\dagger c_i$, который является эрмитовым и называется оператором числа частиц:

$$c_i^\dagger c_i |n_i\rangle = (-1)^{\sum_i} c_i^\dagger n_i |n_i - 1\rangle = (-1)^{2\sum_i} n_i (2 - n_i) |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle \quad (1.9)$$

Состояния в представлении чисел заполнения – собственные для оператора числа частиц. Собственные числа (физически наблюдаемые величины) для этого оператора – число частиц в данном состоянии.

Правила коммутации (точнее в данном случае антикоммутиации) для операторов рождения и уничтожения имеют вид:

$$\begin{cases} \{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \\ \{c_i, c_j\} = 0, \\ \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0 \end{cases} \quad (1.10)$$

Вывести их из определений 1.4, 1.5 предлагается читателю. Эти коммутационные соотношения позволяют не думать о симметричных свойствах и множителях \sum_i при каждом использовании операторов рождения и уничтожения. Чтобы проиллюстрировать это, вычислим $\langle 0 | c_k c_i^\dagger | 0 \rangle$, где $|0\rangle$ – состояние заполненной Ферми-сферы, т.е. основное состояние невзаимодействующего Ферми-газа. Используя соотношения коммутации, сразу получаем $\langle 0 | \delta_{lk} - c_l^\dagger c_k | 0 \rangle = \delta_{lk}$.

Теперь давайте подумаем, как записать какой-либо оператор в представлении вторичного квантования (например гамильтониан, оператор импульса, координаты, момента импульса и т.д.). Начнем с записи одночастичного оператора $G(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ в представлении вторичного квантования. Для этого воспользуемся тем фактом, что матричный элемент от представления не зависит. Запишем его в представлении собственных функций одночастичного гамильтониана

\hat{H}_0 и в представлении чисел заполнения. В представлении собственных функций одночастичного гамильтониана \hat{H}_0 :

$$G_{ij} = \langle \phi_i | G | \phi_j \rangle = \int d^3 \mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) G(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \phi_j(\mathbf{r}) \quad (1.11)$$

Легко видеть, что записанный в представлении вторичного квантования оператор $G = \sum_{k,l} G_{kl} c_k^\dagger c_l$ дает те же самые матричные элементы:

$$\langle 1_i | \sum G_{kl} c_k^\dagger c_l | 1_j \rangle = \sum G_{kl} \delta_{lj} \delta_{ik} = G_{ij}, \quad (1.12)$$

где, в.ф ϕ_i отвечает состоянию $|00 \dots 1_i \dots 00\rangle$.

Теперь перейдем к двухчастичным операторам. В представлении и в представлении вторичного квантования они будут иметь вид:

$$G = \sum_{i \neq j} G(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{p}_j) \quad (1.13)$$

$$G = \sum_{klmn} c_l^\dagger c_k^\dagger c_m c_n \quad (1.14)$$

$$G_{klmn} = \int d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' \phi_k^*(\mathbf{r}) \phi_l^*(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{p}, \mathbf{p}') \phi_m(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}') \quad (1.15)$$

Пример двухчастичного оператора: оператор взаимодействия $\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$. Трехчастичные операторы мы сейчас отдельно рассматривать не будем, так как они редко встречаются в физике конденсированного состояния.

Теперь рассмотрим гамильтониан вида:

$$H = \underbrace{\sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i)}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i,j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}_{H_1} + \underbrace{\sum_i V_i(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)}_{H_2} \quad (1.16)$$

Здесь H_0 - невозмущенный гамильтониан, H_1 - двухчастичное взаимодействие, H_2 - одночастичное возмущение. H_2 появляется в системе, когда мы хотим учесть примеси/ фононы/ спин-орбитальное взаимодействие и т.п. Это слабое мы записываем отдельно, хотя оно, как и H_0 , имеет смысл одночастичного оператора. Мы так поступаем потому, что хотим работать в базисе собственных функций H_0 - так нам удобнее.

Воспользуемся связью между представлениями, чтобы переписать данный гамильтониан в представлении вторичного квантования.

$$H_0 = \sum_{kl} \langle \phi_k | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) | \phi_l \rangle c_k^\dagger c_l = \sum_{kl} \varepsilon_{kl} \delta_{lk} c_k^\dagger c_l = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad (1.17)$$

где ϕ_k, ϕ_l - собственные функции H_0 .

Аналогичным образом получаем:

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{klmn} V_{klmn} c_l^\dagger c_k^\dagger c_m c_n \quad (1.18)$$

$$V_{klmn} = \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \phi_k^*(\mathbf{r}) \phi_l^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_m(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}') \quad (1.19)$$

$$H_2 = \sum_{kl} V_{kl} c_k^\dagger c_l \quad (1.20)$$

$$V_{kl} = \int d^3\mathbf{r} \phi_k^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \phi_l(\mathbf{r}) \quad (1.21)$$

Соберем все вместе. Гамильтониан в представлении вторичного квантования примет вид:

$$H = \sum_k c_k^\dagger c_k \varepsilon_k + \frac{1}{2} \sum_{klmn} V_{klmn} c_l^\dagger c_k^\dagger c_m c_n + \sum_{kl} V_{kl} c_k^\dagger c_l \quad (1.22)$$

Рассмотрим несколько примеров.

Первый: $V_{kl} = 0, V_{klmn} = 0, H = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k$.

Тогда любая с.ф. имеет вид $|n_1 n_2 \dots\rangle$, где каждое $n_i = 0, 1$, и собственные энергии равны $E = \sum_k \varepsilon_k n_k$.

Второй: пусть теперь $V_{kl} \neq 0, V_{klmn} = 0$.

$$V = -M\nabla^2 + L\nabla^4, \quad H_0 = -\frac{\nabla^2}{2m}$$

Собственные функции H_0 - плоские волны. В базисе собственных функций:

$$V_{kl} = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (Ml^2 + Ll^4) e^{i\mathbf{l}\mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{l}} (M\mathbf{k}^2 + L\mathbf{k}^4) \quad (1.23)$$

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\mathbf{k}^2}{2m} + M\mathbf{k}^2 + L\mathbf{k}^4 \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \quad (1.24)$$

Возмущение привело к перенормировке спектра: $\varepsilon' = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + M\mathbf{k}^2 + L\mathbf{k}^4$.

Третий: одна частица в возмущающем поле, которое перемешивает лишь два уровня p, q . $H = H_0 + V(\mathbf{r})$.

Сначала решим без использования вторичного квантования:

$$H_0 \phi_k = \varepsilon_k \phi_k \quad (1.25)$$

$$(H_0 + V(\mathbf{r})) \psi = E\psi \quad (1.26)$$

Будем искать ψ в виде разложения по базису с.ф. невозмущенного гамильтониана H_0 :

$$\psi = \sum_k A_k \phi_k \quad (1.27)$$

$$((\varepsilon_i - E)\delta_{ij} + V_{ij}) A_j = 0 \quad (1.28)$$

Это линейная система. Она имеет нетривиальное решение, только если её детерминант равен нулю, что и определяет уровни энергии:

$$\det((\varepsilon_i - E)\delta_{ij} + V_{ij}) = 0 \quad (1.29)$$

В нашем примере $V_{pq} = V_{qp} = V \neq 0$ (двухуровневая система), а все остальные элементы взаимодействия равны нулю. Для $i \neq p, q$: $E = \varepsilon_i$. Для $i = p, q$ происходит гибридизация уровней.

$$E = \frac{\varepsilon_p + \varepsilon_q \pm \sqrt{(\varepsilon_p - \varepsilon_q)^2 + 4V^2}}{2} \quad (1.30)$$

В формализме чисел заполнения

$$H = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \sum_{kl} V_{kl} c_k^\dagger c_l \quad (1.31)$$

$$|\psi\rangle = \sum_j A_j |00 \dots 1_j \dots\rangle \quad (1.32)$$

$$\sum_j A_j (H_{ij} - E\delta_{ij}) = 0 \quad (1.33)$$

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \langle 00 \dots 1_i \dots | H | 00 \dots 1_j \dots \rangle = \\ &= \sum_k \varepsilon_k \langle 1_i | c_k^\dagger c_k | 1_j \rangle + \sum_{kl} V_{kl} \langle 1_i | c_k^\dagger c_l | 1_j \rangle = \varepsilon_i \delta_{ij} + V_{ij} \end{aligned} \quad (1.34)$$

В итоге получаем то же самое: $((\varepsilon_i - E)\delta_{ij} + V_{ij}) A_j = 0$

Теперь найдем вид двухчастичного взаимодействия V_{klmn} , когда оно зависит только от разницы координат (трансляционная симметрия) и не зависит от спина. (Тем не менее учтем спиновые переменные и тот факт, что $\phi_{\mathbf{k},\sigma} = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\chi_{\sigma}$):

$$V_{klmn,\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} = \\ = \int d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}'\phi_{\mathbf{k},\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r})\phi_{\mathbf{l},\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}')V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\phi_{\mathbf{m},\sigma_3}(\mathbf{r})\phi_{\mathbf{n},\sigma_4}(\mathbf{r})$$

Хотя в записи и фигурирует спин, взаимодействие действительно не зависит от него, так как спиноры ортогональны. Работаем в базисе оси квантования вдоль z:

$\uparrow - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\downarrow - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Когда $\sigma_1\sigma_3$ разные, из-за ортогональности базисных векторов получим ноль. Когда же $\sigma_1 = \sigma_3$, получим 1. Это можно записать просто как δ_{13} .

Введем относительный и средний радиус векторы:

$$\mathbf{r}_r = \mathbf{r} - \mathbf{r}', \mathbf{R} = \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}$$

Упростим выражение для возмущения:

$$V_{klmn,\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} = \\ = \frac{\delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4}}{\Omega^2} \int d^3\mathbf{R}d^3\mathbf{r}_r V(\mathbf{r}_r) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{m})(\mathbf{R}+\mathbf{r}_r/2)+i(\mathbf{l}-\mathbf{n})(\mathbf{R}-\mathbf{r}_r/2)} = \\ = \frac{\delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4}}{\Omega} (2\pi)^3 \int d^3\mathbf{r}_r V(\mathbf{r}_r) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_r} = \\ = \delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4} \frac{(2\pi)^3}{\Omega} V(\mathbf{q}) \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{l},\mathbf{m}+\mathbf{n}}$$

где введен вектор \mathbf{q} : $\mathbf{l} = \mathbf{n} - \mathbf{q}$, $\mathbf{k} = \mathbf{m} + \mathbf{q}$. Заметим, что выполняется условие $\mathbf{k} - \mathbf{m} + \mathbf{l} - \mathbf{n} = 0$. Физически это

отвечает процессу взаимодействия и перерасеивания двух электронов с импульсами \mathbf{m}, \mathbf{n} в электроны с импульсами \mathbf{k}, \mathbf{l} с сохранением суммарного импульса.

До сих пор мы всегда использовали с.ф. H_0 . Так поступать каждый раз не обязательно. Мы можем работать в базисе любого оператора физической наблюдаемой. Например, можно работать в базисе собственных функций оператора координаты: $\hat{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \mathbf{R} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})$, $\psi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})$. В этом базисе мы также можем записать детерминат Слэтера, при этом квантовыми числами теперь будут являться координаты:

$$\Phi_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{\mathbf{R}_1}(\mathbf{r}_1) & \dots & \psi_{\mathbf{R}_1}(\mathbf{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_{\mathbf{R}_N}(\mathbf{r}_1) & \dots & \psi_{\mathbf{R}_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \quad (1.35)$$

Переход к представлению вторичного квантования опять осуществляется также формально - $|n_{\mathbf{R}_1} n_{\mathbf{R}_2} \dots n_{\mathbf{R}_i} \dots\rangle$. В таком случае говорят о представлении чисел заполнения оператора координаты. Число $n_{\mathbf{R}_i}$ имеет смысл числа частиц в координате \mathbf{R}_i . Можно ввести операторы рождения и уничтожения в координате \mathbf{R}_i (они еще называются полевыми операторами): $\check{\Psi}^\dagger(\mathbf{R}_i), \check{\Psi}(\mathbf{R}_i)$. Таким же образом, каким мы ранее вводили оператор числа частиц, теперь можно ввести оператор плотности числа частиц в точке: $\rho(\mathbf{R}) = \check{\Psi}^\dagger(\mathbf{R})\check{\Psi}(\mathbf{R})$.

Теперь выясним, как связаны эти операторы с операторами рождения и уничтожения в представлении собственных функций гамильтониана:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_i) = \sum_{\mathbf{k}} A_{i\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad A_{i\mathbf{l}} = \phi_{\mathbf{l}}^*(\mathbf{x}_i) \quad (1.36)$$

$$|00 \dots 1_{\mathbf{x}_i} 0 \dots\rangle = \sum_{\mathbf{k}} A_{i\mathbf{k}} |0 \dots 1_{\mathbf{k}} \dots\rangle \quad (1.37)$$

$$\check{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_i)|0\rangle = \sum_{\mathbf{k}} A_{i\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle \quad (1.38)$$

$$\check{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_i) = \sum_{\mathbf{k}} A_{i\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (1.39)$$

Нетрудно проверить исходя из вышеизложенного, что полевые операторы подчиняются следующим правилам коммутации:

$$\begin{cases} \{\Psi(\mathbf{x}_i), \Psi^\dagger(\mathbf{x}_j)\} = \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j), \\ \{\Psi(\mathbf{x}_i), \Psi(\mathbf{x}_j)\} = 0, \\ \{\Psi^\dagger(\mathbf{x}_i), \Psi^\dagger(\mathbf{x}_j)\} = 0 \end{cases} \quad (1.40)$$

Как и раньше, мы можем переписать гамильтониан, включающий двухчастичное взаимодействие, через введенные операторы:

$$\begin{aligned} H = & \int d^3\mathbf{x} \check{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + U(\mathbf{x})\right) \check{\Psi}(\mathbf{x}) + \\ & + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \check{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \Psi^\dagger(\mathbf{x}') \check{\Psi}(\mathbf{x}') \check{\Psi}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (1.41)$$

Чтобы убедиться, что это верно, распишем например H_0 (второе слагаемое предлагается проверить читателю), используя разложение для полевых операторов:

$$\begin{aligned} H_0 = & \int d^3\mathbf{x} \sum_{\mathbf{k}l} A_{i\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + U(\mathbf{x}_i)\right) A_{i\mathbf{l}}^\dagger c_l = \\ = & \sum_{\mathbf{k}l} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_l \int d^3\mathbf{x}_i \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_i) \varepsilon_l \phi_l^*(\mathbf{x}_i) = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (1.42)$$

В заключение, кратко опишем отличия, с которыми мы встретимся, если захотим в качестве частиц вместо фермионов рассматривать бозоны. Из-за того, что требования

симметрии относительно перестановки частиц отличаются в случае бозонов, вместо детерминанта Слэтера пишется симметризованное произведение:

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N}(r_1, \dots, r_N) = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots}{N!}} \sum_p P[\Phi_{k_1}(r_{p_1}) \dots \Phi_{k_N}(r_{p_N})] \quad (1.43)$$

Данная сумма $\sum_p P[\dots]$ означает сумму по всем возможным перестановкам p_1, \dots, p_N из множества $1, \dots, N$.

Операторы рождения и уничтожения для бозонов вводятся следующим образом:

$$\begin{aligned} c_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \\ c_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \end{aligned} \quad (1.44)$$

Соотношения коммутации для бозонов и фермионов очень похожи. Отличие лишь в том, что антикоммутатор в случае фермионов заменяется на коммутатор в случае бозонов:

$$\begin{cases} [c_i, c_j^\dagger] = \delta_{ij}, \\ [c_i, c_j] = 0, \\ [c_i^\dagger, c_j^\dagger] = 0 \end{cases} \quad (1.45)$$

Глава 2

Электрон-фононное взаимодействие.

Давайте обсудим гамильтониан сверхпроводника, опираясь на то, о чем мы говорили в предыдущей главе. Для записи гамильтониана нам нужно понимать, посредством чего взаимодействуют электроны в сверхпроводнике. В большинстве обычных низкотемпературных сверхпроводников сверхпроводимость обеспечивается электрон-фононным взаимодействием, поэтому мы сконцентрируемся именно на этом типе взаимодействия. (Тем не менее, результирующий гамильтониан будет применим при любых бозонных переносчиках взаимодействия.)

Гамильтониан электронной подсистемы выглядит следующим образом:

$$H = \sum_s \int d^3\mathbf{x} c_s^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) c_s(\mathbf{x}) + V_{ee} \quad (2.1)$$

Здесь V_{ee} – электрон-электронное взаимодействие, которым мы сейчас интересоваться не будем, $V(\mathbf{x})$ – потенциал, действующий на электроны (созданный ионами кристаллической решетки). c_s^\dagger, c_s – полевые операторы (операторы рож-

дения и уничтожения в конкретной координате). Разрешим ионам колебаться:

$$V(\mathbf{x}) = \sum_N V_0(\mathbf{x} - \mathbf{N} - \mathbf{z}_N) \quad (2.2)$$

Здесь \mathbf{N} – равновесное положение иона, \mathbf{z}_N – отклонение одного от равновесного положения. Будем считать отклонение малым и разложим по нему потенциал:

$$V(\mathbf{x}) \approx \sum_N V_0(\mathbf{x} - \mathbf{N}) - \sum_N \mathbf{z}_N \nabla V_0(\mathbf{x} - \mathbf{N}) \quad (2.3)$$

Мы будем работать в базисе собственных функций гамильтониана без колебаний $H_0 = -\frac{\nabla^2}{2m} + \sum_N V_0(\mathbf{x} - \mathbf{N})$. Можно сказать, что мы пренебрегаем кинетической энергией ионов по сравнению с энергией электронов (адиабатическое приближение). Тогда в представлении вторичного квантования гамильтониан принимает вид:

$$H = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} + \sum_{\alpha\beta} \Delta V_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \quad (2.4)$$

$$\Delta V_{\alpha\beta} = \langle \alpha | - \sum_N \mathbf{z}_N \nabla V_0(\mathbf{x} - \mathbf{N}) | \beta \rangle \quad (2.5)$$

где $\Delta V_{\alpha\beta}$ – матричные элементы оператора возмущения (смещения), α и β – квантовые числа, соответствующие состоянию (квазиимпульс и спин). В рамках нашего курса мы предполагаем, что квантование фононов уже знакомо читателю, поэтому приводим следующее выражение без особых пояснений:

$$\begin{aligned} \mathbf{z}_N = & \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar V}{2m\Omega(\mathbf{k}, \lambda)}} \times \\ & \times [a(\mathbf{k}, \lambda) e^{i\mathbf{k}\mathbf{N}} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} + a^{\dagger}(\mathbf{k}, \lambda) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{N}} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^*] \end{aligned} \quad (2.6)$$

где λ - поляризация, Ω - частота фонона, a и a^\dagger - операторы уничтожения и рождения фононов, соответственно. Если читатель хочет подробно разобраться с квантованием фононов, он может воспользоваться, например, лекционными заметками Я.В.Фомина по курсу "Фононы и электроны в металлах"[1].

Отметим, что в классической физике выражение для смещения имеет вид:

$$z_N = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} e^{i\mathbf{k}N} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \mathbf{q}_{\mathbf{k},\lambda}, \quad (2.7)$$

где $\mathbf{q}_{\mathbf{k},\lambda}$ удовлетворяет уравнению осциллятора:

$$\ddot{\mathbf{q}}_{\mathbf{k},\lambda} + \Omega^2(\mathbf{k}, \lambda) \mathbf{q}_{\mathbf{k},\lambda} = 0 \quad (2.8)$$

Итак, возвращаемся к нашей квантовой задаче. Подставив (2.6) в (2.5), а затем полученное выражение в (2.4), получим выражение для гамильтониана электрон-фононного взаимодействия:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{e-ph} &= \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \sum_{\alpha,\beta} [C_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}, \lambda) + C_{\alpha,\beta}(-\mathbf{k}) a^\dagger(\mathbf{k}, \lambda)] c_{\alpha}^\dagger c_{\beta} \\ &C_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar V}{2m\Omega(\mathbf{k}, \lambda)}} \times \\ &\times \sum_N e^{i\mathbf{k}N} \int d^3x \phi_{\alpha}^\dagger(x) [-\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \nabla V_0(x - \mathbf{N})] \phi_{\beta}(x) \end{aligned} \quad (2.9)$$

где ϕ - собственные состояния невозмущенного гамильтониана H_0 . Можно заметить, что коэффициенты $C_{\alpha,\beta}$ обладают свойством $C_{\alpha,\beta}^*(\mathbf{k}) = C_{\beta,\alpha}(-\mathbf{k})$. Используя этот факт, можно проверить, что гамильтониан \hat{H}_{e-ph} эрмитов, как и должно быть. Каждый из двух членов \hat{H}_{e-ph} описывает физический процесс, а именно рассеяние электрона с поглоще-

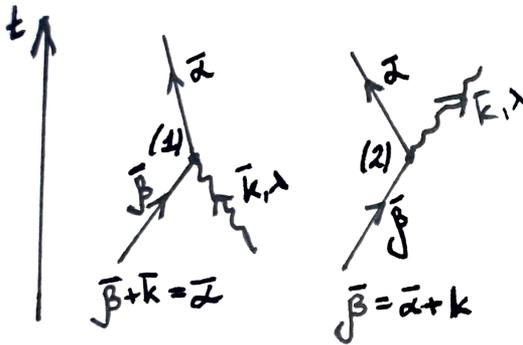


Рис. 2.1: Фейнмановские диаграммы для процессов: (1) рассеяния электрона с поглощением фонона, (2) рассеяния электрона с испусканием фонона.

нием или излучением фонона. Действительно, первое слагаемое при действии на него волновой функции даст уничтожение электрона с импульсом β , рождение электрона с импульсом α и уничтожение фонона. Второе слагаемое даст уничтожение электрона с импульсом β , рождение электрона с импульсом α и рождение фонона. Такие процессы принято изображать с помощью фейнмановских диаграмм (Рис. 2.1).

В таких процессах рассеяния должен соблюдаться закон сохранения импульса, что и наблюдается: мы можем получить требование выполнения ЗСИ аналитически. Если ϕ - плоские волны, то коэффициенты $C_{\alpha,\beta}(\mathbf{k})$ можно преобразовать, приведя к виду (читателю рекомендуется проделать это):

$$\begin{aligned} C_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}) &= \delta_{S_1,S_2} M_{\alpha\beta} \delta(\beta - \alpha + \mathbf{k}) \\ C_{\beta,\alpha}^*(\mathbf{k}) &= \delta_{S_1,S_2} M_{\beta\alpha}^* \delta(-\beta + \alpha + \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (2.10)$$

Здесь получившиеся $\delta(\beta - \alpha + \mathbf{k})$ и $\delta(-\beta + \alpha + \mathbf{k})$ как раз и означают выполнение ЗСИ. Напомним, что в.ф. состоят не

только из координатной части, но и из спиновой. Множители δ_{S_1, S_2} получились из-за присутствия в в.ф. спиновой части (и в.ф. соответствующие разным спинам ортонормированны).

Здесь и далее будем рассматривать случай, когда у нас есть только продольная поляризация фононов. Подставляя упрощенные выражения для $C_{\alpha, \beta}(\mathbf{k})$ (2.10) в гамильтониан электрон-фононного взаимодействия, получим:

$$\hat{H}_{e-ph} = \sum_{\alpha, \beta} [M_{\alpha\beta} a_{\alpha-\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + M_{\alpha\beta}^* a_{\alpha-\beta}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha}] \quad (2.11)$$

При вычислениях мы поменяли индексы α и β во втором слагаемом местами, а также заключили все константы в $M_{\alpha\beta}$. В таком упрощенном виде очевидно, что гамильтониан эрмитов. Два члена гамильтониана по-прежнему отвечают процессам перерассеяния электронов с поглощением и испусканием фононов.

Как говорилось в начале главы, нас интересует, как электроны взаимодействуют посредством фононов. Вспомним первую главу: любое взаимодействие двух фермионов выражается четырехфермионным членом (два электрона (старые) уничтожились, два родились (новые), в результате эффективно два электрона провзаимодействовали). На данный момент мы получили гамильтониан в другом виде. Давайте переделаем (2.11) так, чтобы получить четырехфермионный член.

Для того, чтобы достичь поставленной цели, будем пользоваться теорией возмущений. Будем считать возмущением полученный гамильтониан:

$$\hat{H}_{e-ph} \equiv V = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', S} [M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}, S}^{\dagger} c_{\mathbf{k}', S} + h.c.] \quad (2.12)$$

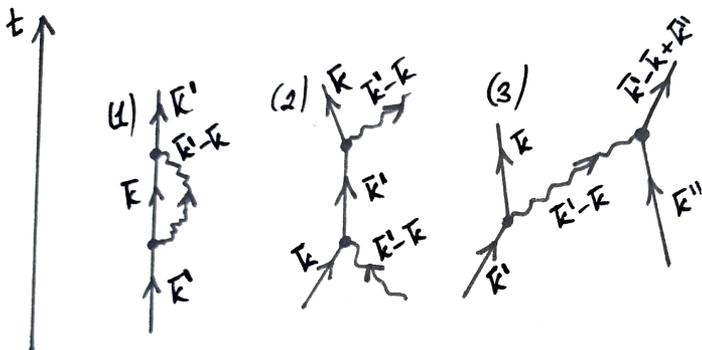


Рис. 2.2: Фейнмановские диаграммы для процессов: (1) и (2) одночастичных (одноэлектронных, однофононных), (3) взаимодействия двух электронов.

Невозмущенный гамильтониан полной системы:

$$H_0 = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} + \hat{H}_{ph} \quad (2.13)$$

В нем мы учли не взаимодействующие фононы, которые нас не интересовали ранее: $\hat{H}_{ph} = \sum_n \hbar \Omega_n a_n^{\dagger} a_n$. Тогда во втором порядке теории возмущений по взаимодействию:

$$E_n = E_n^0 + \langle n | \hat{V} | n \rangle + \sum_m \frac{\langle n | \hat{V} | m \rangle \langle m | \hat{V} | n \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (2.14)$$

Рассмотрим состояние, в котором есть какое-то количество электронов и фононов: $|n\rangle = |N_e, N_{ph}\rangle$. Тогда $\langle n | V | n \rangle = 0$. Член же второго порядка по теории возмущений сложнее. Возможные произведения (комбинации взаимодействий), которые возникают в нем, описываются с помощью диаграмм Фейнмана. На этот раз в диаграммах будет две вершины, так как речь идет о двух взаимодействиях.

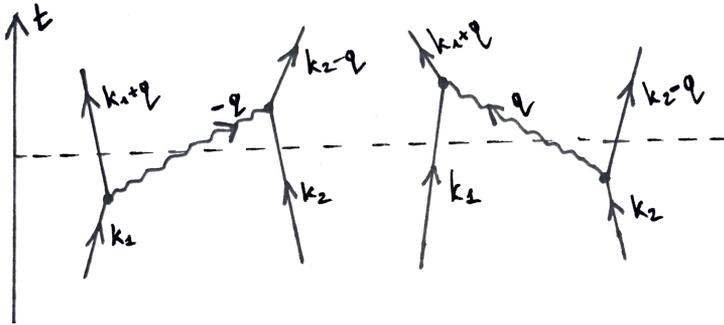


Рис. 2.3: Фейнмановские диаграммы для процессов взаимодействия двух электронов через фонон. Пунктирной линией показано промежуточное состояние системы в некоторый момент времени.

При рисовании диаграмм Фейнмана может возникнуть много различных картинок (слагаемых во втором порядке теории возмущений, видов взаимодействий). Ограничение при их рисовании состоит в том, что импульсы при взаимодействиях должны сохраняться. На Рис. 2.2 показаны некоторые возможные диаграммы. Диаграммы вида (1) и (2) не описывают взаимодействия электронов друг с другом. (1) отвечает просто перенормировке электронной энергии ε_α в (2.13), а (2) отвечает перенормировке фононных и электронных энергий. Нас сейчас будут интересовать только диаграммы вида (3): ситуации, когда было два электрона с разными импульсами, и они перерассеялись в другие два электрона. Итак, при электрон-фононном взаимодействии, как мы видим, будут перенормировки энергий фононов и электронов, но сейчас мы будем наблюдать только за взаимодействиями двух электронов через фононы. Для такой ситуации мы можем нарисовать два вида диаграмм (Рис. 2.3).

Для подсчета второго порядка по энергии в теории воз-

мущений, нам нужно знать разницу энергий рассматриваемых процессов в начальном и промежуточном состояниях (см. знаменатель 2.14). Вначале выпишем энергии начального и конечного состояния для взаимодействий, показанных с помощью диаграмм Фейнмана:

$$\begin{aligned} E &= \varepsilon(k_1) + \varepsilon(k_2) \\ E &= \varepsilon(k_1 + q) + \varepsilon(k_2 - q) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Энергии системы в начальный и конечный момент времени должны быть равны, откуда следует:

$$\varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_1 + q) = -[\varepsilon(k_2) - \varepsilon(k_2 - q)] \quad (2.16)$$

Энергии промежуточных состояний (когда есть 2 электрона и фонон):

$$\begin{aligned} E_m^1 &= \varepsilon(k_1 + q) + \varepsilon(k_2) + \hbar\Omega(-q) \\ E_m^2 &= \varepsilon(k_1) + \varepsilon(k_2 - q) + \hbar\Omega(q) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Спектр фононов симметричен, поэтому $\hbar\Omega(q) = \hbar\Omega(-q)$.

Теперь можем выписать второй порядок по энергии в теории возмущений. Будем выписывать только слагаемые, соответствующие электрон-фононному взаимодействию, так как одночастичные процессы учитываем через перенормировку энергий электронов и фононов.

$$\begin{aligned} E^{(2)} &= M_{k_1, k_1+q}^* M_{k_2-q, k_2} \frac{1}{\varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_1 + q) - \hbar\Omega} + \\ &+ M_{k_2, k_2-q}^* M_{k_1, k_1+q} \frac{1}{\varepsilon(k_2) - \varepsilon(k_2 - q) - \hbar\Omega} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Поскольку матричные элементы зависят только от переданного импульса (система трансляционно инвариантна), можем записать после сложения двух дробей:

$$E^{(2)} = |V(q)|^2 \frac{-2\hbar\Omega}{\hbar^2\Omega^2 - [\varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_1 + q)]^2} \quad (2.19)$$

Здесь мы учли равенство 2.16. Итак, мы получили вклад второго порядка в энергию в теории возмущений, а именно энергию электрон-фононного взаимодействия. Гамильтониан, который у нас получился:

$$\begin{aligned} \hat{H} = H_0 + H_{e-ph} + H_{ee} = \\ = \sum_{\alpha} \tilde{\varepsilon}_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} + \sum V_{e-ph} c_{s',k_2-q}^{\dagger} c_{s,k_1+q}^{\dagger} c_{s',k_2} c_{s,k_1} + \\ + \sum V_{ee} c_{s',k_2-q}^{\dagger} c_{s,k_1+q}^{\dagger} c_{s',k_2} c_{s,k_1} \end{aligned} \quad (2.20)$$

H_{ee} - кулоновское электрон-электронное взаимодействие. Заметим, что при взаимодействии электронов через фонон (при том виде электрон-фононного взаимодействия, который мы рассматриваем) переворота спина не происходит (вершина в диаграмме не спин-активная, спин фонона = 0).

Два четырехфермионных слагаемых можно записать в одно слагаемое. Давайте поймем, какой будет знак у этого слагаемого. Кулоновское взаимодействие отвечает отталкиванию электронов. Чему отвечает электрон-фононное взаимодействие? Давайте узнаем знак знаменателя 2.19, оценив величины. Характерная энергия фононов порядка энергии Дебая, в типичных металлах $\hbar\Omega \sim 0.025eV$. Вблизи поверхности Ферми разница энергий налетающего и рассеянного электрона порядка температуры $\varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_1 + q) \sim 1K \approx 10^{-4}eV$. Получается, что знак дроби может быть отрицательный, и значит электрон-фононное взаимодействие может приводить к притяжению между электронами. То, будет ли все-таки оно приводить к притяжению электронов, зависит от материалов. Если электрон-фононное взаимодействие отрицательное и по модулю больше, чем кулоновское, то притяжение будет, и возникает сверхпроводящая неустойчивость. При этом ниже определенной температуры металл переходит в сверхпроводящее состояние. Если же электрон-фононный член по модулю меньше, чем

кулоновский, то возникает эффективное отталкивание электронов, а не притяжение. В этом случае металл никогда не переходит в сверхпроводящее состояние (например, Cu). Далее мы будем предполагать, что величины электрон - фононного взаимодействия достаточно, чтобы перебить величину кулоновского.

Мы будем рассматривать упрощенную модель сверхпроводимости, стандартную теорию микроскопической сверхпроводимости БКШ (Бардина-Купера-Шриффера). Основное предположение этой теории состоит в том, что полный потенциал двухчастичного взаимодействия можно представить так:

$$V_{e-ph} + V_{ee} = \begin{cases} 0, & |\varepsilon(k_1), \varepsilon(k_1 + q) - \varepsilon_F| > \hbar\Omega_q, \\ -g, & |\varepsilon(k_1), \varepsilon(k_1 + q) - \varepsilon_F| < \hbar\Omega_q \end{cases} \quad (2.21)$$

Иными словами, взаимодействие электронов (притяжение) происходит только в тонком слое толщиной $\hbar\Omega_q$ вблизи поверхности Ферми. Эта модель достаточно грубая, но, несмотря на это, очень хорошо работает в большинстве низкотемпературных сверхпроводников. Итак, мы пришли к упрощенному гамильтониану нашей системы, который состоит из одночастичного члена и взаимодействия, выражающегося с помощью 2.21 в рамках модели БКШ.

Глава 3

Ферми жидкость Ландау.

В предыдущей главе мы выяснили, что в металлах может быть притяжение между электронами и научились описывать его с помощью вторичного квантования. Теперь давайте посмотрим, к чему приводит такое притяжение между электронами. Иными словами, как перестраивается основное состояние металла с учетом найденного притяжения? Для ответа на этот вопрос мы будем позже решать задачу Купера: это задача об одной электронной паре над поверхностью Ферми в присутствии описанного притягивающего взаимодействия.

Перед тем, как рассматривать непосредственно задачу Купера, познакомимся с некоторыми представлениями о ферми системах. Основное состояние ферми-газа (системы невзаимодействующих фермионов (в нашем случае - электронов) - это заполненная электронами сфера Ферми в импульсном пространстве. Если же электроны взаимодействуют, то система таких электронов называется ферми-жидкостью. Концепция, предложенная Ландау, состоит в том, что хотя электроны и взаимодействуют, но низко лежащие электронные состояния над основным состоянием

(поверхностью Ферми) могут быть описаны в терминах взаимодействующих **квазичастиц**. В теории Ландау заполненная ферми сфера - это ферми вакуум, то есть внутри нее нет ни одной квазичастицы. Квазичастицы над основным состоянием (возбуждения квазичастиц) создаются, когда мы вырываем электрон, находящийся под поверхностью ферми сферы, и выносим его за пределы сферы. Такой процесс создания возбуждения можно разделить на два этапа (3.1a):

1) Вытаскивание частицы (электрона) из состояния под поверхностью Ферми. Энергия образовавшейся дырочной квазичастицы (дырки) с импульсом $-p'$ равна $\epsilon_1 = E_F - E_1 > 0$. Импульсы электрона и дырки противоположные, так как полный импульс основного состояния равен нулю, и поэтому $p_h = 0 - p_e = 0 - p' = -p'$.

2) Добавление частицы в состояние над поверхностью Ферми. Образуется электронная квазичастица (для краткости - электрон) с энергией $\epsilon_2 = E_2 - E_F > 0$.

В результате описанного процесса образовалось 2 квазичастицы. Далее мы будем называть их "дырка" и "электрон" (и будем подразумевать не настоящие частицы, а квазичастицы). Можно записать и нарисовать спектр квазичастиц (рис. 3.1 b):

$$\epsilon_p = \begin{cases} \frac{p^2}{2m} - E_F, p > p_F \\ E_F - \frac{p^2}{2m}, p < p_F \end{cases} \quad (3.1)$$

Квазичастицы, вообще говоря, могут взаимодействовать с остальной сферой Ферми (нормальными электронами), и вследствие этого имеют конечное время жизни. Мы будем работать в области вблизи поверхности Ферми: там квазичастицы (дырки, электроны) существуют как хорошо определенные частицы. Вблизи поверхности Ферми они имеют примерно линейный спектр.

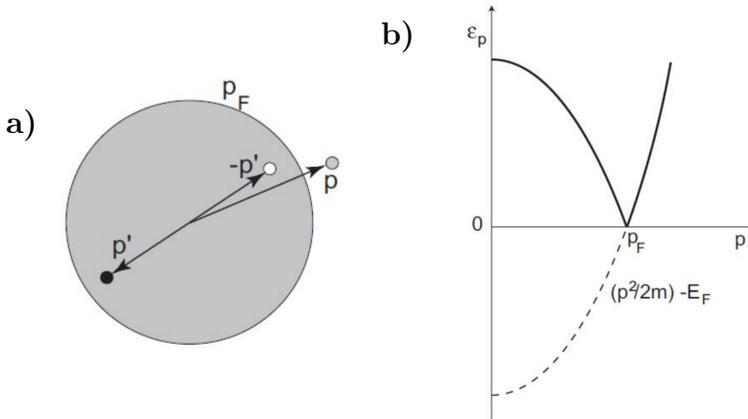


Рис. 3.1: **а:** Иллюстрация процесса создания квазичастичного возбуждения. **б:** Спектр квазичастиц. Сплошная линия при $p < p_F$: дырочная часть спектра. Сплошная линия при $p > p_F$: электронная часть спектра.

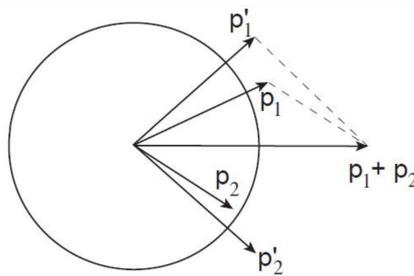


Рис. 3.2: Импульсы электронов до и после взаимодействия.

Разберем подробнее процесс, из-за которого у квазичастиц конечное время жизни. Пусть система находится в основном состоянии, и над поверхностью Ферми есть квазичастичное возбуждение (электрон) с импульсом p_1 . Этот электрон взаимодействует с электронами под поверхностью Ферми, например с электроном с импульсом p_2 (рис. 3.2). В результате взаимодействия (рассеяния друг на друге) электроны переходят в состояния с импульсами p'_1 и p'_2 . Из-за принципа Паули (все состояния под поверхностью Ферми заняты) $p'_1 > p_F$ и $p'_2 > p_F$. Запишем вероятность рассеяния электрона с импульсом p_1 согласно золотому правилу Ферми:

$$P = 2m \times \int M \delta(p_1^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2) \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}'_2) d^n p_2 d^n p_1' d^n p_2' \quad (3.2)$$

Здесь M - квадрат матричного элемента, присутствие дельта-функций означает выполнение законов сохранения энергии и импульса. Сумма производится по всем электронам под поверхностью Ферми, с которыми может провзаимодействовать электрон с импульсом p_1 , а также по всем возможным состояниям, в которые он может рассеяться. Для вычисления вероятности нам понадобятся два неравенства.

Покажем, что такое неравенство верно:

$$0 < p'_1 - p_F < (p_1 - p_F) + (p_2 - p_F) \quad (3.3)$$

Предположим, что все импульсы находятся вблизи поверхности Ферми (это предположение подтвердится конечным результатом). Тогда из ЗСЭ (в первом порядке по малой разнице импульсов) $p_i - p'_i$ получим сохранение суммы абсолютных величин импульсов:

$$\begin{aligned} p_1^2 + p_2^2 = p_1'^2 + p_2'^2 &\Rightarrow (p_1 - p'_1)(p_1 + p'_1) = (p'_2 - p_2)(p_2 + p'_2), \\ (p_1 - p'_1)2p_F = (p'_2 - p_2)2p_F &\Rightarrow p'_1 + p'_2 = p_1 + p_2 \end{aligned} \quad (3.4)$$

Тогда:

$$p'_1 = p_1 + p_2 - p'_2 < p_1 + p_2 - p_F \quad (3.5)$$

Отсюда следует (3.3).

Другое неравенство, которое нам понадобится:

$$0 < p_F - p_2 < p_1 - p_F \quad (3.6)$$

Оно следует из неравенства: $p_F - p_2 < p_1 - p'_1 < p_1 - p_F$.

Проинтегрировав 3.2 по $d^n p'_2$ (по модулю и углам), получим:

$$P = 2m \int M \delta(p_1^2 + p_2^2 - p_1'^2 - (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_1)^2) d^n p_2 d^n p'_1 \quad (3.7)$$

Интегрирование по углу убирает дельта-функцию. Далее остается проинтегрировать по модулям импульсов. Используя полученные неравенства в качестве пределов:

$$\begin{aligned} P &\propto \int dp_2 dp'_1 = \\ &= \int_0^{p_1 - p_F} d(p_F - p_2) \int_0^{(p_1 - p_F)(p_2 - p_F)} d(p'_1 - p_F) = \frac{1}{2}(p_1 - p_F)^2 \end{aligned} \quad (3.8)$$

Коэффициент пропорциональности можно выяснить из соображений размерности, так как вероятность это обратное время рассеяния: $P \sim \frac{v_F^2 (p_1 - p_F)^2}{\hbar E_F} = \frac{\epsilon^2}{\hbar E_F} = \frac{\epsilon}{\hbar} \frac{\epsilon}{E_F}$. Чтобы вероятность (обратное время жизни) была мала, энергия квазичастицы должна быть много меньше энергии Ферми, то есть частица должна находиться вблизи поверхности Ферми. При этом время жизни квазичастицы будет велико, то есть они хорошо определены, и хорошо работает концепция ферми жидкости Ландау. Притягивающее взаимодействие как раз тоже хорошо работает вблизи поверхности Ферми.

Запишем гамильтониан для электронов и дырок.

Для электронов имеем знакомую картину:

$$\hat{H}_e = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + U_0(\mathbf{r}) - \mu \quad (3.9)$$

$$\hat{H}_e u_{\epsilon, \mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{p}} u_{\epsilon, \mathbf{p}}(\mathbf{r})$$

Для дырок: $\hat{H}_h v_{\epsilon, \mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{p}} v_{\epsilon, \mathbf{p}}(\mathbf{r})$. Как мы обсуждали, $v_{\epsilon, \mathbf{p}} = u_{-\epsilon, -\mathbf{p}}$ (волновая функция дырки отвечает в.ф. электрона, который мы удалили). Заметим, что $H_e(-\mathbf{p}) = H_e^*$. Тогда $\hat{H}_e^* v_{\epsilon, \mathbf{p}}(\mathbf{r}) = -\epsilon_{\mathbf{p}} v_{\epsilon, \mathbf{p}}(\mathbf{r})$. Получается, что:

$$\hat{H}_h = -\hat{H}_e^* \quad (3.10)$$

Глава 4

Задача Купера.

Теперь перейдем к задаче, о которой мы упоминали в начале предыдущей главы. Нам интересно, как добавление притяжения электронов в нормальной системе повлияет на основное состояние этой системы. Для начала рассмотрим задачу о двух электронах над заполненной сферой Ферми. Эту задачу решил Купер, после чего получилось построить теорию сверхпроводимости.

Когда экспериментально было открыто явление сверхпроводимости (протекание электрического тока без сопротивления), то стало понятно, что для реализации такого явления все носители тока должны описываться одной волновой функцией, то есть находиться в одном квантовом состоянии. Было понятно, что для этого частицы должны быть бозонами. Также знали, что электроны это фермионы. Чтобы сделать из них бозоны, было придумано объединить их в пары за счет притяжения. Природа притяжения (электрон-фононная) также была предположена, посчитана и оценена. Но было кое-что непонятно. Оценки показывают, что полный притягивающий потенциал (с учетом кулоновского взаимодействия) довольно мал. Из квантовой

механики известно, что в 3D не любой сколь угодно малый притягивающий потенциал создает связанное состояние. В 2D же сколь угодно малое притяжение (мелкая яма) дает связанные состояния. Мы живем в 3D, и поэтому было непонятно, как могли образоваться связанные состояния в малом притягивающем потенциале. Купер же показал, что если мы рассматриваем пару электронов **над поверхностью Ферми**, то образование пары (связанного состояния) возможно при сколь угодно малом притяжении между ними. После этого микроскопическая теория сверхпроводимости стала развиваться гораздо быстрее, и за нее была получена Нобелевская премия.

Предположим наличие корреляций между электронами с импульсами \mathbf{p} и $\mathbf{p}' \approx -\mathbf{p}$. Это отвечает однородной волновой функции пары, которая для совпадающих координат электронов $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$ не зависит от конкретной пространственной точки \mathbf{r} . Тогда должны существовать корреляции между электроном с импульсом \mathbf{p} и дыркой с $-\mathbf{p}' \approx \mathbf{p}$ (рис. 3.1). Волновая функция электрона в кристалле записывается через квазиимпульс (теорема Блоха). Волновая функция дырки написана комплексно сопряженной, потому что мы уничтожения пары можно добиться двумя путями: уничтожением электрона или рождением дырки.

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} U_{\mathbf{p}} \\ v_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) &= e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} V_{\mathbf{p}}^* \end{aligned} \quad (4.1)$$

Функция пары с конкретным квазиимпульсом:

$$\Psi_{\mathbf{p}}^{pair}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}_1) v_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}_2) = e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\hbar} U_{\mathbf{p}} V_{\mathbf{p}}^* \quad (4.2)$$

Координатная волновая функция пары:

$$\begin{aligned} \Psi^{pair}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\hbar} a_{\mathbf{p}}, \\ a_{\mathbf{p}} &= U_{\mathbf{p}} V_{\mathbf{p}}^* \end{aligned} \quad (4.3)$$

В. ф. пары подчиняется уравнению Шредингера:

$$[H_e(\mathbf{r}_1) + H_h(\mathbf{r}_2) + W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)]\Psi^{pair}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\Psi^{pair}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (4.4)$$

где $H_e(\mathbf{r}_1)$ - одночастичный гамильтониан электронов, $H_h(\mathbf{r}_2)$ - одночастичный гамильтониан дырок, $W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ - взаимодействие между ними. Подставляем в.ф. пары и переходим в импульсное представление:

$$[2\epsilon_p - E_p]a_p = - \sum_{p_1} W_{p,p_1} a_{p_1}, \quad (4.5)$$

$$W_{p,p_1} = \int e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)\mathbf{r}/\hbar} W(\mathbf{r}) d^3r$$

В приближении БКШ (2.21):

$$W_{p,p_1} = \begin{cases} W, & \epsilon_p \text{ and } \epsilon_{p_1} < E_c \\ 0, & \epsilon_p \text{ or } \epsilon_{p_1} > E_c \end{cases} \quad (4.6)$$

где E_c характерный размер узкой области вблизи E_F , $E_c \ll E_F$, E_c порядка энергии Дебая. Итак, получим интегральное уравнение на волновую функцию:

$$a_p = \frac{W}{E - 2\epsilon_p} \sum_{p_1} a_{p_1} \quad (4.7)$$

Для решения интегрального уравнения просуммируем обе части по \mathbf{p} в узком диапазоне вблизи E_F , $\epsilon_p < E_c$:

$$C = W \sum_{\mathbf{p}} \frac{C}{E - 2\epsilon_p}, \quad (4.8)$$

$$C = \sum_{\mathbf{p}} a_p$$

Получим уравнение на спектр энергий, допустимых для пары:

$$\frac{1}{W} = \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{E - 2\epsilon_p} \equiv \Phi(E) \quad (4.9)$$

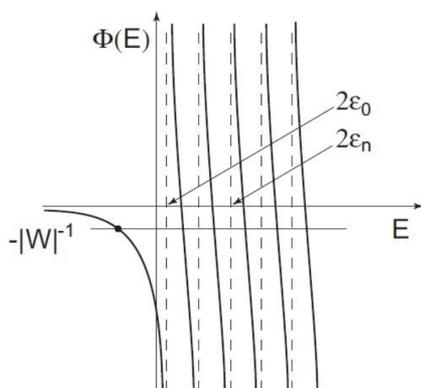


Рис. 4.1: Иллюстрация единственности решения уравнения на спектр в отрицательных областях энергий.

Решения полученного уравнения изображены на рис. 4.1. Нас интересуют связанные состояния, а потому отрицательные энергии. Видно, что решение в отрицательной области энергий (пересечение графиков) будет только при условии отрицательного взаимодействия. Итак, у нас есть только одно отрицательное решение уравнения. Оно описывает связанное состояние пары двух электронов.

Мы выяснили, что интересующее нас решение существует. Найдем его количественно.

$$\frac{1}{|W|} = \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{p}} - E} \quad (4.10)$$

Перепишем сумму через интеграл, вводя плотность состояний:

$$\sum_{\mathbf{p}} = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \int \frac{m\mathbf{p}}{2\pi^2\hbar^3} d\epsilon_{\mathbf{p}} = \int N(\epsilon) d\epsilon_{\mathbf{p}} \quad (4.11)$$

Вблизи поверхности Ферми плотность состояний почти не зависит от энергии, поэтому можно её заменить на её значение на поверхности Ферми $N(0) = \frac{m\rho_F}{2\pi^2\hbar^3}$. Это эквивалентно

замене импульса на импульс Ферми. Также помним, что ищем решение при отрицательной энергии. Получим:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|W|} &= \int_0^{E_c} \frac{mp}{2\pi^2\hbar^3} \frac{d\epsilon_{\mathbf{p}}}{2\epsilon_{\mathbf{p}} - E} = N(0) \int_0^{E_c} \frac{d\epsilon}{2\epsilon + |E|} = \\ &= \frac{N(0)}{2} \ln\left(\frac{|E| + 2E_c}{|E|}\right) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Решаем полученное уравнение на $|E|$ и получаем ответ:

$$|E| = \frac{2E_c}{e^{2/N(0)|W|} - 1} \quad (4.13)$$

Рассмотрим предельные случаи. При слабом взаимодействии (слабая связь) $N(0)|W| \ll 1$:

$$|E| = 2E_c e^{-2/N(0)|W|} \quad (4.14)$$

При сильном взаимодействии (сильная связь) $N(0)|W| \gg 1$:

$$|E| = N(0)E_c|W| \quad (4.15)$$

Из 4.14 видно, что связанное состояние существует даже при сколь угодно слабой связи, о чем мы и говорили в начале главы.

Физический вывод из решения задачи Купера состоит в том, что при наличии притяжения основное состояние системы перестраивается. Заполненная Ферми сфера становится неустойчивой и электронные состояния вблизи поверхности объединяются в пары $(\mathbf{p}, -\mathbf{p})$, каждое из которых может быть или заполнено одновременно парой электронов или пусто, или находиться в суперпозиции заполненного и пустого состояний. Возбуждения над таким основным состоянием можно создать если заполнить одно из парных состояний пустой пары электроном (рождение электронной квазичастицы) или удалить один из электронов заполненной пары (рождение дырочной квазичастицы).

Глава 5

Уравнения Боголюбова-де-Женна.

Давайте свяжем операторы рождения и уничтожения реальных электронов с операторами рождения и уничтожения квазичастичных электронов и дырок:

$$\begin{aligned}\Psi^\dagger(\mathbf{r} \uparrow) &= \sum_n [\gamma_{n\uparrow}^\dagger u_n^*(\mathbf{r}) - \gamma_{n\downarrow} v_n(\mathbf{r})] \\ \Psi^\dagger(\mathbf{r} \downarrow) &= \sum_n [\gamma_{n\downarrow}^\dagger u_n^*(\mathbf{r}) + \gamma_{n\uparrow} v_n(\mathbf{r})]\end{aligned}\tag{5.1}$$

Такое преобразование называется преобразованием Боголюбова.

В нормальном металле рождение реального электрона это либо рождение квазичастицы над поверхностью Ферми, либо уничтожение дырки под поверхностью Ферми. Функция u - единица над поверхностью Ферми, ноль под поверхностью Ферми. С v , соответственно, наоборот. Тогда вектор $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ (электронная квазичастица) либо

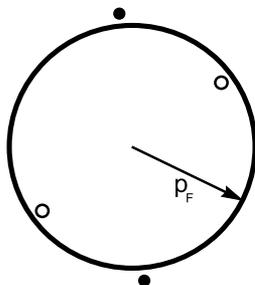


Рис. 5.1: Куперовская пара, состоящая из двух электронов.

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ (дырочная квазичастица).}$$

Электронную пару вблизи поверхности Ферми можно уничтожить двумя способами: уничтожить электрон над поверхностью Ферми или родить дырку под поверхностью Ферми (рис. 5.1). В спаренном состоянии компоненты вектора u, v могут быть не равны нулю одновременно.

Операторы рождения и уничтожения реальных электронов подчиняются правилам антикоммутации, которые мы обсуждали в первой главе. Хотелось бы, чтобы квазичастичные электронные операторы рождения и уничтожения также подчинялись обычным правилам антикоммутации. Налагаем на них такие условия:

$$\begin{aligned} \gamma_{n,\alpha} \gamma_{m,\beta} + \gamma_{m,\beta} \gamma_{n,\alpha} &= 0 \\ \gamma_{n,\alpha}^\dagger \gamma_{m,\beta}^\dagger + \gamma_{m,\beta}^\dagger \gamma_{n,\alpha}^\dagger &= 0 \\ \gamma_{n,\alpha}^\dagger \gamma_{m,\beta} + \gamma_{m,\beta} \gamma_{n,\alpha}^\dagger &= \delta_{\alpha,\beta} \delta_{m,n} \end{aligned} \quad (5.2)$$

Из преобразований Боголюбова и наложенных условий получаются условия полноты (вывести их предлагается чи-

тателю):

$$\begin{aligned} \sum_n [u_n^*(\mathbf{r})u_n(\mathbf{r}') + v_n^*(\mathbf{r}')v_n(\mathbf{r})] &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \sum_n [u_n^*(\mathbf{r})v_n(\mathbf{r}') - u_n^*(\mathbf{r}')v_n(\mathbf{r})] &= 0 \end{aligned} \quad (5.3)$$

Зачем нам нужны преобразования Боголюбова? Для ответа на этот вопрос вспомним вид гамильтониана, с которым работаем.

$$\begin{aligned} H &= H_{kin} + H_{int}, \\ H_{kin} &= \sum_{\alpha} \int d^3r \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \alpha) H_e \Psi(\mathbf{r}, \alpha), \\ H_{int} &= -\frac{V}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int d^3r \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \alpha) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \beta) \Psi(\mathbf{r}, \beta) \Psi(\mathbf{r}, \alpha) \end{aligned} \quad (5.4)$$

Второй член включает в себя и электрон-фононное, и кулоновское взаимодействие. Эффективно он отвечает притяжению. Работать с четырехфермионными членами сложно, поэтому перейдем к следующему эффективному гамильтониану, называемому среднеполевым:

$$\begin{aligned} H_{eff} &= \int d^3r \sum_{\alpha} [\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \alpha) H_e \Psi(\mathbf{r}, \alpha) + U(\mathbf{r}) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \alpha) \Psi(\mathbf{r}, \alpha)] + \\ &+ \int d^3r [\Delta(\mathbf{r}) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r} \uparrow) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r} \downarrow) + \Delta^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r} \downarrow) \Psi(\mathbf{r} \uparrow) + H_0(\mathbf{r})] \end{aligned} \quad (5.5)$$

Коэффициенты U и Δ для перехода к такому гамильтониану можно найти из следующего соображения: H_{eff} должен иметь тот же минимум свободной энергии и при тех же в.ф., что и исходный гамильтониан H (чтобы статистическое среднее по Гиббсовскому ансамблю у них совпадало). Итак, параметры среднеполевого гамильтониана мы находим из вариационного принципа. Далее H_{eff} можно диагонализировать с помощью преобразований Боголюбова.

Следуя Ландау, удобно переходить к квазичастицам (истинным возмущениям над основным состоянием), чтобы гамильтониан, записанный через квазичастичные операторы, был диагонален. Иными словами, чтобы квазичастицы были почти свободные. Как раз это соображение приводит к фиксации коэффициентов в преобразовании Боголюбова, то есть к нахождению функций u и v . (Каноническое преобразование Боголюбова приводит гамильтониан к диагональному виду). Таким образом, мы требуем, чтобы гамильтониан, переписанный через операторы рождения и уничтожения квазичастиц, был диагонален:

$$H_{eff} = E_g + \sum_{n,\alpha} \epsilon_n \gamma_{n,\alpha}^\dagger \gamma_{n,\alpha} \quad (5.6)$$

При помощи высказанного соображения мы можем найти уравнения на истинные волновые функции квазичастиц, называемые уравнениями Боголюбова-де-Женна. Здесь мы приводим лишь схему вывода, а подробный вывод предлагается провести читателю.

(1) Получить коммутационные соотношения:

$$\begin{aligned} [H_{eff}, \Psi(\mathbf{r}, \uparrow)] &= -[H_e + U(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r}, \uparrow) - \Delta(\mathbf{r})\Psi^\dagger(\mathbf{r}, \downarrow) \\ [H_{eff}, \Psi(\mathbf{r}, \downarrow)] &= -[H_e + U(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r}, \downarrow) + \Delta(\mathbf{r})\Psi^\dagger(\mathbf{r}, \uparrow) \end{aligned} \quad (5.7)$$

(2) Получить коммутационные соотношения, используя диагонализированный гамильтониан:

$$\begin{aligned} [H_{eff}, \gamma_{n,\alpha}] &= -\epsilon_n \gamma_{n,\alpha} \\ [H_{eff}, \gamma_{n,\alpha}^\dagger] &= \epsilon_n \gamma_{n,\alpha}^\dagger \end{aligned} \quad (5.8)$$

(3) Подставить в ответ для п.(1) операторы реальных электронов, выраженные через операторы квазичастиц (преобразование Боголюбова). Сравнить полученное выраже-

ние с выражением п. (2). Чтобы выражения совпали, необходимо будет наложить условия на функции u и v . Условия, которые будут наложены, как раз и будут уравнениями Боголюбова-де-Женна:

$$\begin{aligned} [H_e + U(\mathbf{r})]u(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r})v(\mathbf{r}) &= \epsilon u(\mathbf{r}) \\ -[H_e^* + U(\mathbf{r})]v(\mathbf{r}) + \Delta^*(\mathbf{r})u(\mathbf{r}) &= \epsilon v(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (5.9)$$

Полученные уравнения можно переписать в матричном виде:

$$\check{\Omega} \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} = \epsilon_n \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix}, \quad \check{\Omega} = \begin{pmatrix} H_e + U & \Delta \\ \Delta^* & -[H_e^* + U] \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

Интересно отметить, что при занулении Δ и Δ^* (отключении сверхпроводимости) матрица будет диагональна в частично-дырочном пространстве. (Пространство так называется, потому что u описывает электронную часть возбуждения, а v - дырочную). Иными словами, в каждом из двух уравнений будет присутствовать либо только электронная в.ф., либо только дырочная, и значит эти две части будут независимы.

Вообще говоря, наша цель в физике - получать различные наблюдаемые. Их можно выразить как средние операторов Ψ и Ψ^\dagger , которые, в свою очередь, мы можем выразить через квазичастичные в.ф. и операторы рождения и уничтожения (преобразование Боголюбова). Квазичастицы, как мы уже говорили, это почти свободные частицы, поэтому их средние мы знаем (ферми-функция). Поэтому задача о нахождении наблюдаемых сводится к нахождению функций u и v . Получается, что уравнения Боголюбова-де-Женна - это аналог уравнений Шредингера, но для сверхпроводящей системы. Действительно, при отключении сверхпроводимости в этих уравнениях мы и видим просто уравнение Шредингера для однокомпонентной в.ф. При включении же сверхпроводимости в.ф. становится двухкомпо-

нентной (в частично-дырочном пространстве, или пространстве Намбу).

Также обсудим некоторые математические свойства уравнений БдЖ. Первое - любому решению (u, v) с энергией ϵ всегда соответствует решение $v^*, -u^*$ с энергией $-\epsilon$. В этом можно убедиться, комплексно сопрягая уравнение БдЖ и умножая $\check{\Omega}$ слева и справа на $\pm i\tau_y$. Здесь сразу упомянем стандартные обозначения: матрицы Паули принято обозначать различными буквами в зависимости от описываемого пространства: σ для спинвого, τ для частично-дырочного (и другие буквы для других пространств, если потребуется...):

$$\check{\Omega}^* \begin{pmatrix} u_n^* \\ v_n^* \end{pmatrix} = \epsilon_n \begin{pmatrix} u_n^* \\ v_n^* \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

$$i\tau_y \check{\Omega}^* (-i\tau_y) (i\tau_y) \begin{pmatrix} u_n^* \\ v_n^* \end{pmatrix} = i\tau_y \epsilon_n \begin{pmatrix} u_n^* \\ v_n^* \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

$$-\check{\Omega} \begin{pmatrix} v_n^* \\ -u_n^* \end{pmatrix} = \epsilon_n \begin{pmatrix} v_n^* \\ -u_n^* \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

Второе свойство - уравнения БдЖ сохраняют поток квазичастиц. В качестве упражнения, читателю предлагается проверить что

$$\operatorname{div} \mathbf{P} = 0 \quad (5.14)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = & u^* \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) u + u \left(i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) u^* - \\ & - v^* \left(-i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) v - v \left(i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) v^* \end{aligned} \quad (5.15)$$

Теперь выведем вид самосогласованных полей. Для этого, как писалось выше, сравниваем средние значения $\langle \check{\psi} | \check{H} | \check{\psi} \rangle$

для исходного гамильтониана и эффективного $\langle \check{\psi} | \check{H} | \check{\psi} \rangle$ и хотим, чтобы минимум этих функционалов совпадал по значению на одной и той же ψ . Нам потребуется теорема Вика. Полное изложение теоремы Вика в рамках нашего курса невозможно, его можно найти например в [2]. От этой теоремы используем следующее – среднее от любых четырех операторов разбивается на сумму всех возможных парных средних. (под средним подразумеваем среднее по состоянию или по гиббсовскому ансамблю). И знак перед этими всевозможными комбинациями отвечает фермионной симметрии (сколько перестановок потребовалось сделать, чтобы поставить требуемые операторы рядом).

$$\langle \psi_1^\dagger \psi_2^\dagger \psi_3 \psi_4 \rangle = \langle \psi_1^\dagger \psi_2^\dagger \rangle \langle \psi_3 \psi_4 \rangle + \langle \psi_1^\dagger \psi_4 \rangle \langle \psi_2^\dagger \psi_3 \rangle - \langle \psi_1^\dagger \psi_3 \rangle \langle \psi_2^\dagger \psi_4 \rangle \quad (5.16)$$

Применяем эту теорему к нашему случаю:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta} \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \alpha) \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \beta) \Psi(\mathbf{r}, \beta) \Psi(\mathbf{r}, \alpha) \rangle &= \quad (5.17) \\ &= \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \uparrow) \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle \langle \Psi(\mathbf{r}, \downarrow) \Psi(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle + \\ &\quad + \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \downarrow) \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle \langle \Psi(\mathbf{r}, \uparrow) \Psi(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle + \\ &+ \sum_{\alpha,\beta} \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \alpha) \Psi(\mathbf{r}, \alpha) \rangle \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \beta) \Psi(\mathbf{r}, \beta) \rangle - \\ &- \sum_{\alpha,\beta} \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \alpha) \Psi(\beta) \rangle \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \beta) \Psi(\mathbf{r}, \alpha) \rangle \end{aligned}$$

Дальше надо применить физические соображения. В обычных системах $\langle \Psi_1 \Psi_2 \rangle$ равны нулю (так называемые аномальные средние), а $\langle \Psi_1^\dagger \Psi_2 \rangle$ не равны нулю (нормальные средние). Но у нас это не так. Покажем, что аномальные средние не равны нулю, для чего в это среднее подставим

преобразование Боголюбова:

$$\langle \Psi_{\uparrow} \Psi_{\downarrow} \rangle = \sum_{m,n} [\langle \gamma_{n,\uparrow} \gamma_{m,\downarrow} \rangle u_n u_m + \langle \gamma_{n,\uparrow} \gamma_{m,\uparrow}^{\dagger} \rangle u_n v_m^* - \langle \gamma_{n,\downarrow}^{\dagger} \gamma_{m,\downarrow} \rangle v_n^* u_m - \langle \gamma_{n,\downarrow}^{\dagger} \gamma_{m,\uparrow}^{\dagger} \rangle v_n^* v_m^*] \quad (5.18)$$

Средние $\langle \gamma_{n,\alpha} \gamma_{m,\beta} \rangle$ и $\langle \gamma_{n,\alpha}^{\dagger} \gamma_{m,\beta}^{\dagger} \rangle$ равны нулю, так как эти операторы описывают невзаимодействующие квазичастицы. А средние $\langle \gamma_{m,\alpha}^{\dagger} \gamma_{n,\beta} \rangle = \delta_{nm} \delta_{\alpha,\beta} f_n$ описываются просто функцией Ферми $f_n = \frac{1}{e^{\varepsilon_n/T} + 1}$.

$$\langle \Psi_{\uparrow} \Psi_{\downarrow} \rangle = \sum_{n,\alpha} u_{n,\alpha} v_{n,\alpha}^* (1 - 2f_n) \quad (5.19)$$

В итоге мы получили точно такую же волновую функцию пары, как мы получали в задаче Купера, а она не ноль. То есть мы можем заключить, что аномальные средние в нашей задаче не равны нулю. Тем не менее аномальные средние $\langle \Psi_{\uparrow} \Psi_{\uparrow} \rangle$ равны нулю (это также можно увидеть из задачи Купера). В общем случае это среднее описывает триплетные пары. Так как в рассматриваемую нами систему не заложена возможность существования пар с ненулевым орбитальным моментом, то из свойств фермионной симметрии следует, что триплетных пар в нашей модели не возникает.

Теперь проварьируем среднее значение гамильтониана

по волновым функциям:

$$\begin{aligned}
 \delta\langle H \rangle &= \sum_{\alpha} \int d^3\mathbf{r} \delta\langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \alpha) \hat{H}_e \Psi(\mathbf{r}, \alpha) \rangle - & (5.20) \\
 &- V \int d^3\mathbf{r} [(\delta\langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle) \langle \Psi(\mathbf{r}, \downarrow) \Psi(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle + \\
 &\quad + \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle (\delta\langle \Psi(\mathbf{r}, \downarrow) \Psi(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle)] - \\
 &- V \int d^3\mathbf{r} [(\delta\langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \Psi(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle) \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) \Psi(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle + \\
 &\quad + \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \Psi(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle (\delta\langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) \Psi(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle)]
 \end{aligned}$$

Также проварируем H_{eff}

$$\begin{aligned}
 \delta\langle H_{eff} \rangle &= \sum_{\alpha} \int d^3\mathbf{r} \delta\langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \alpha) [H_e + U(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}, \alpha) \rangle + \\
 &+ \int d^3\mathbf{r} [\Delta(\mathbf{r}) \delta\langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle + \Delta^*(\mathbf{r}) \langle \Psi(\mathbf{r}, \downarrow) \Psi(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle]
 \end{aligned}$$

Чтобы минимум функционала совпадал на одних и тех же значениях волновой функции, вариации должны совпадать тождественно. Это позволяет нам написать выражения для $\Delta(\mathbf{r})$, $U(\mathbf{r})$:

$$U(\mathbf{r}) = -V \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \Psi(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle = -V \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) \Psi(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle \quad (5.21)$$

$$\Delta(\mathbf{r}) = -V \langle \Psi(\mathbf{r}, \downarrow) \Psi(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle = V \langle \Psi(\mathbf{r}, \uparrow) \Psi(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle \quad (5.22)$$

$$\Delta^*(\mathbf{r}) = -V \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle = V \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle \quad (5.23)$$

Полученные уравнения называются уравнениями самосогласования, потому что эти поля не внешние, а зависят от состояния системы, которое в свою очередь зависит от

них. Выразим Δ, U через решения уравнений БДЖ, используя преобразование Боголюбова. Для этого воспользуемся известным средним от невзаимодействующих боголюбовских квазичастиц (они подчиняются просто распределению Ферми):

$$\begin{aligned}\langle \gamma_{n,\alpha}^\dagger \gamma_{m,\beta} \rangle &= \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta} f_n \\ \langle \gamma_{n,\alpha} \gamma_{m,\beta} \rangle &= \langle \gamma_{n,\alpha}^\dagger \gamma_{m,\beta}^\dagger \rangle = 0\end{aligned}\quad (5.24)$$

$$f_n = \frac{1}{e^{\epsilon_n/T} + 1} \quad (5.25)$$

$$\Delta(\mathbf{r}) = V \sum_n (1 - 2f_n) u_n(\mathbf{r}) v_n^*(\mathbf{r}) \quad (5.26)$$

$$\Delta^*(\mathbf{r}) = V \sum_n (1 - 2f_n) u_n^*(\mathbf{r}) v_n(\mathbf{r}) \quad (5.27)$$

$$U(\mathbf{r}) = -V \sum_n [|u_n(\mathbf{r})|^2 f_n + |v_n(\mathbf{r})|^2 (1 - f_n)] \quad (5.28)$$

Последнее, что осталось, чтобы определить все параметры в H_{eff} - вычислить константу H_0 .

$$\begin{aligned}\langle H \rangle &= \int d^3\mathbf{r} \left[\sum_\alpha \langle \Psi_\alpha^\dagger H_e \Psi_\alpha \rangle - \frac{V}{2} 2 \langle \Psi_\uparrow^\dagger \Psi_\downarrow^\dagger \rangle \langle \Psi_\downarrow \Psi_\uparrow \rangle \right] = \\ &= \int d^3\mathbf{r} \left[\sum_\alpha \langle \Psi_\alpha^\dagger H_e \Psi_\alpha \rangle - \frac{|\Delta|^2}{V} \right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle H_{eff} \rangle &= \int d^3\mathbf{r} \left[\langle \sum_\alpha \Psi_\alpha^\dagger H_e \Psi_\alpha \rangle + \Delta \langle \Psi_\uparrow^\dagger \Psi_\downarrow^\dagger \rangle + \Delta^* \langle \Psi_\downarrow \Psi_\uparrow \rangle + H_0 \right] \\ &= \int d^3\mathbf{r} \left[\sum_\alpha \langle \Psi_\alpha^\dagger H_e \Psi_\alpha \rangle - \frac{2|\Delta|^2}{V} + H_0 \right]\end{aligned}$$

Откуда мы сразу заключаем, что $H_0 = \frac{|\Delta|^2}{V}$. Также можно отметить, что $U(\mathbf{r})$ (которое выражается через нормальные средние) всего лишь изменяет значение μ (перенормировка химического потенциала), поэтому это слагаемое отдельно не рассматривают, а работают с модифицированным μ , в который уже включили U . Также следует отметить, что химпотенциал и энергия ферми – это разные вещи. Но при низких температурах они отличаются во втором порядке по T/E_F , из-за чего при комнатных температурах это отличие порядка 10^{-4} . Поэтому про это отличие обычно не вспоминают.

Уравнение БДЖ вместе с уравнениями самосогласования – полная система, позволяющая найти все наблюдаемые в изучаемой системе. (Еще могут потребоваться граничные условия). Мы сформулировали аппарат БДЖ, теперь будем им пользоваться. Для начала выведем выражения для некоторых распространенных наблюдаемых. Начнем с электронной плотности.

$$\begin{aligned} n &= 2\langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \uparrow)\Psi(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle = \\ &= 2 \sum_n [|u_n(\mathbf{r})|^2 f_n + |v_n(\mathbf{r})|^2 (1 - f_n)] \end{aligned} \quad (5.29)$$

Здесь двойка появилась, так как мы считаем, что в системе от спина ничего не зависит. В противном случае мы бы написали сумму по разным спином (вверх и вниз). Это выражение состоит из двух слагаемых. Первое слагаемое – вклад заполненных электронных состояний. Второе слагаемое – вклад «отсутствия» дырочной квазичастицы. В заполненном парой состоянии с вероятностью v^2 рождается дырочная квазичастица, в пустом с вероятностью u^2 рождается электронная квазичастица.

Итак, уравнения БДЖ (5.9) очень часто записываются в виде (исходя из сказанного про включение U в μ):

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla - \frac{ie}{\hbar c}\mathbf{A})^2 u - E_F u + \Delta v &= \epsilon u \\ \frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + \frac{ie}{\hbar c}\mathbf{A})^2 v + E_F v + \Delta^* u &= \epsilon v \end{aligned} \tag{5.30}$$

Глава 6

Свойства однородного сверхпроводника. Наблюдаемые.

Первым объектом, к которому мы применим полученные уравнения Боголюбова-де-Женна, будет однородный сверхпроводник. Что такое однородный сверхпроводник? Это значит, что никакие наблюдаемые не зависят от координат.

6.1 Спектр возбуждений сверхпроводника

В однородном сверхпроводнике параметр порядка не зависит от координат: $\Delta = |\Delta|e^{i\chi} = \text{const}$. Ищем решение

уравнений БдЖ в виде плоских волн.

$$\begin{aligned} &[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu]u(\mathbf{r}) + \Delta v(\mathbf{r}) = \epsilon u(\mathbf{r}) \\ & -[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu]v(\mathbf{r}) + \Delta^* u(\mathbf{r}) = \epsilon v(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (6.1)$$

$$\mu = \frac{\hbar^2 \mathbf{q}_F^2}{2m} = E_F$$

$$u = e^{i\chi/2} U_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad v = e^{-i\chi/2} V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (6.2)$$

Подставляя такие плоские волны в уравнения БдЖ, получаем:

$$\begin{aligned} \xi_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} + |\Delta| V_{\mathbf{q}} &= \epsilon_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} \\ -\xi_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} + |\Delta| U_{\mathbf{q}} &= \epsilon_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \\ \xi_{\mathbf{q}} &= \frac{\hbar^2}{2m} [\mathbf{q}^2 - \mathbf{q}_F^2] \end{aligned} \quad (6.3)$$

Это однородная система, которая имеет решение, только если её детерминант обращается в ноль. Это нам даёт закон дисперсии:

$$\epsilon_{\mathbf{q}} = \pm \sqrt{\xi_{\mathbf{q}}^2 + |\Delta|^2} \quad (6.4)$$

Спектр квазичастиц в сверхпроводнике имеет щель (см. рис. 6.1). Заметим, что нет состояний с энергией $\epsilon < \Delta$, что отличает сверхпроводник от нормального состояния (где энергия возбуждения может быть любой). Значит, минимальная энергия для создания квазичастицы - 2Δ , так как они рождаются парами (разрывается куперовская пара). И эта же величина, соответственно - энергия связи куперовской пары. Из уравнения выше можно найти не только

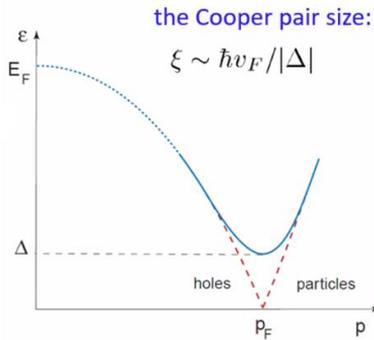


Рис. 6.1: Спектр квазичастиц. При $p < p_F$ дырочная ветвь, при $p > p_F$ - электронная. Фиолетовым пунктиром показан спектр квазичастиц в нормальном металле.

собственные энергии, но и собственные функции (нормированные), еще их иногда называют факторами когерентности.

$$U_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\xi_q}{\epsilon_q}\right)^{1/2}, \quad V_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\xi_q}{\epsilon_q}\right)^{1/2} \quad (6.5)$$

Обсудим свойства квазичастиц. Групповая скорость квазичастиц ($p = \hbar q$):

$$v_g = \frac{d\epsilon}{dp} = \frac{d\epsilon}{d\xi_p} \frac{d\xi_p}{dp} = \frac{2\xi_q}{2\sqrt{\xi_q^2 + |\Delta|^2}} \frac{d\xi_q}{dq^2} \frac{2q}{\hbar} = \pm v_F \frac{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}}{\epsilon} \quad (6.6)$$

Рассматриваемые энергии ($\xi_q \sim \Delta \sim 10^{-2 \div -4} E_F$) много меньше E_F , поэтому спектр нормального состояния можно линеаризовать, как это сделано выше. Заметим, что групповые скорости на дырочной и частичной ветвях противоположного знака: электронные квазичастицы имеют положительную групповую скорость (движутся по направлению импульса), а дырочные квазичастицы имеют отрица-

тельную групповую скорость (движутся против направления импульса).

Также мы видим, что при больших энергиях сверхпроводник похож на нормальный металл: спектр возбуждений сверхпроводника совпадает со спектром нормального металла на энергиях, больших нескольких Δ , и тогда же групповая скорость возбуждений совпадает с v_F .

Посмотрим теперь на факторы когерентности: они отвечают за то, в какой степени квазичастица является электроном и/или дыркой. Из вида этих факторов когерентности и вида спектра (6.4) можно заключить, что далеко от поверхности Ферми квазичастицы действительно являются хорошо определенными электронами (при $E > E_F$) или дырками ($E < E_F$).

Скажем пару слов о размере куперовской пары. К сожалению, он обозначается той же буквой ξ , что может вызывать некоторую путаницу. Его можно оценить из соотношения неопределенности (а точно получить из микротeorии). Используя характерные скорости $v_F \sim 10^8 \text{ cm/s}$ и величины параметра порядка $\Delta \sim 2\text{K}$, мы получим, что размер куперовской пары может достигать величин микрометра, что, по сравнению с атомарными масштабами, очень макроскопический размер.

Теперь найдем плотность состояний N реальных электронов. $Nd\epsilon$ – число электронов в данном интервале энергий. В нормальном металле на уровне Ферми плотность состояний примерно константа. Мы уже знаем, что в сверхпроводнике при $|\epsilon| < |\Delta|$ состояний нет. Найдем плотность состояний в остальной области энергий ($N(\epsilon) = \frac{d}{d\epsilon} \frac{V_{\text{all states}}}{V_{\text{one state}}} =$

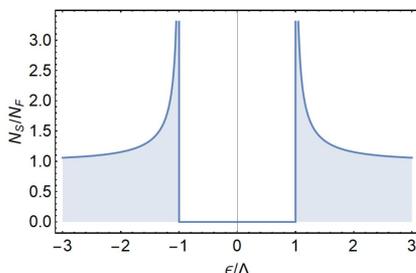


Рис. 6.2: Плотность состояний в сверхпроводнике

$\frac{d}{d\epsilon} \left(\frac{\frac{4}{3}\pi q^3}{(2\pi)^3} \right)$:

$$\begin{aligned}
 N(\epsilon) &= \frac{1}{2} \left| \frac{d}{d\epsilon} \left(\frac{q^2}{3\pi^2} \right) \right| = \frac{q^2}{2\pi^2} \left| \frac{dq}{d\epsilon} \right|^{-1} = & (6.7) \\
 &= \frac{mq}{2\pi^2 \hbar^2} \frac{|\epsilon|}{\sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}} = N_F \frac{|\epsilon|}{\sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}}
 \end{aligned}$$

где $N_F = \frac{mq_F}{2\pi^2 \hbar^2}$.

Мы видим корневую особенность – когерентный пик - на энергиях $\epsilon = \pm\Delta$. Можно сказать, что состояния, как бы вытесненные из щели, переходят в пики: действительно, общее число состояний должно сохраняться. На больших энергиях плотность состояний выходит на N_F . Найденную плотность состояний называют "плотностью состояний типа БКШ".

6.2 Структура решения с фиксированной энергией

Чтобы изучать какие-либо задачи, нужно понимать, как устроено полное решение для частицы с фиксированной энергией ϵ . Есть четыре независимых решения с $q^2 = k_F^2 +$

$\frac{2m}{\hbar^2} \xi q$, или, после линеаризации, $q_{\pm} = k_F \pm \frac{1}{\hbar v_F} \sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}$. Это означает, что решение – сумма четырех бегущих волн.

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} e^{i\chi/2} U_+^+ \\ e^{-i\chi/2} V_+^+ \end{pmatrix} e^{+iq+x} + B \begin{pmatrix} e^{i\chi/2} U_+^- \\ e^{-i\chi/2} V_+^- \end{pmatrix} e^{+iq-x} + \quad (6.8) \\ + C \begin{pmatrix} e^{i\chi/2} U_-^+ \\ e^{-i\chi/2} V_-^+ \end{pmatrix} e^{-iq+x} + D \begin{pmatrix} e^{i\chi/2} U_-^- \\ e^{-i\chi/2} V_-^- \end{pmatrix} e^{-iq-x}$$

$$U_{\pm}^+ = V_{\pm}^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}}{\epsilon} \right)^{1/2} \quad (6.9)$$

$$U_{\pm}^- = V_{\pm}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}}{\epsilon} \right)^{1/2} \quad (6.10)$$

У первых двух импульс направлен вправо, но групповая скорость у первого (электроноподобного) направлена тоже вправо, а у второго (дырочноподобного) групповая скорость направлена влево. Аналогично для третьего и четвертого, с импульсом влево, а с групповыми скоростями опять же сонаправленными с импульсом (для электроноподобного) или противоположнонаправленными (для дырочноподобного). (Верхний индекс U, V означает: электроноподобная (+) или дырочноподобная (-) квазичастица. Нижний индекс U, V означает: квазичастица движется вправо (+) или влево (-).)

6.3 Уравнение самосогласования

Теперь вспомним, что мы получили кроме уравнений БДЖ уравнение самосогласования на Δ . Но до сих пор мы считали Δ заданной константой. Теперь учтем уравнение самосогласования - проанализируем поведение Δ в однородном

сверхпроводнике.

$$\Delta(\mathbf{r}) = V \sum_n (1 - 2f_n) u_n(\mathbf{r}) v_n^*(\mathbf{r}) \quad (6.11)$$

$$uv^* = e^{ix} U_q V_q = \frac{\Delta}{2\epsilon_q} \quad (6.12)$$

$$\Delta(\mathbf{r}) = V \sum_q (1 - 2f_q) \frac{\Delta}{2\epsilon_q} \quad (6.13)$$

Заменяем сумму по импульсам на интеграл. При этом опять же считаем плотность состояний вблизи поверхности Ферми не зависящей от энергии.

$$\sum_q = \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} = \int_{-E_F}^{+\infty} \frac{mq}{2\pi^2\hbar^2} d\xi_q = N(0) \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_q \quad (6.14)$$

В равновесии

$$1 - 2f_q = \tanh\left(\frac{\epsilon_q}{2T}\right) \quad (6.15)$$

Также верно равенство $\epsilon_q d\epsilon_q = \xi_q d\xi_q$ и при изменении ξ_q от $-\infty$ до $+\infty$ положительная энергия ϵ_q меняется от Δ до $+\infty$ дважды, что в итоге даёт:

$$\Delta = N(0) \int_{|\Delta|}^{+\infty} V(\epsilon) \frac{\Delta}{\sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2T}\right) d\epsilon \quad (6.16)$$

Дальше вспомним основное предположение теории БКШ:

$$V = \begin{cases} V, & \epsilon < E_c \\ 0, & \epsilon > E_c \end{cases} \quad (6.17)$$

Получаем итоговый вид уравнения самосогласования.

$$1 = \lambda \int_{|\Delta|}^{+E_c} \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2T}\right) d\epsilon \quad (6.18)$$

Где $\lambda = N(0)V$ называется безразмерной константой спаривания. Из этого уравнения можно найти зависимость $\Delta(T)$. Для начала найдем критическую температуру T_c , т.е. температуру, при которой сверхпроводимость исчезает ($\Delta \rightarrow 0$). В этом случае выражение упрощается:

$$1 = \lambda \int_0^{+E_c} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2T_c}\right) \frac{d\epsilon}{\epsilon} \quad (6.19)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^{E_c/2T_c} \frac{\tanh x}{x} dx \quad (6.20)$$

$$\int_0^a \frac{\tanh x}{x} dx = \ln(aB), \quad B = 4\gamma/\pi \approx 2.26, \quad \gamma = e^C \quad (6.21)$$

где $C=0.577\dots$ - постоянная Эйлера.

$$T_c = \frac{2\gamma}{\pi} E_c e^{-1/\lambda} = 1.13 E_c e^{-1/\lambda} \quad (6.22)$$

Получилась неаналитическая зависимость T_c от константы спаривания. Для сколь угодно малой константы спаривания существует ненулевая критическая температура: это является характерной особенностью для теории слабой связи БКШ. (Также отметим, что из этой формулы можно оценить константу спаривания, зная критическую температуру и энергию Дебая из эксперимента).

Также можно аналитически найти значение $\Delta(T = 0)$:

$$\frac{1}{\lambda} = \int_{|\Delta|}^{+E_c} \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}} d\epsilon = \text{Arcosh} \left(\frac{E_c}{|\Delta|} \right) \approx \ln(2E_c/\Delta) \quad (6.23)$$

Сравнивая выражения для T_c и $\Delta(T = 0)$, мы получаем общую связь этих величин в рамках модели БКШ:

$$\Delta(0) = \pi/\gamma T_c = 1.76 T_c \quad (6.24)$$

Зависимость $\Delta(T)$ аналитически можно найти в двух предельных случаях $T \rightarrow T_c, T \rightarrow 0$, а полный вид - только численно. Примерная зависимость при всех T изображена на рис. 6.3.

Выше мы получили очень часто используемый экспериментальный критерий для определения того, насколько сверхпроводник описывается теорией БКШ: $2|\Delta|/T_c = 3.52$. Обычные сверхпроводники (Nb, Al) имеют очень близкое значение этого отношения к 3.52, в отличие от, например, купратов (высокотемпературные сверхпроводники).

6.4 Энергия конденсации

Теперь рассмотрим величину под названием энергия конденсации. Это энергия основного состояния сверхпроводника, отсчитанная от энергии Ферми. (Она описывает то, насколько выгоднее для системы быть в основном сверхпроводящем состоянии, чем в основном нормальном.) Найдем энергию конденсации. Энергия основного состояния сверхпроводника имеет вид:

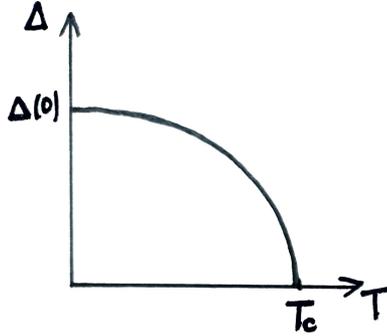


Рис. 6.3: Примерная зависимость сверхпроводящего параметра порядка от температуры.

$$\langle H \rangle_{\Delta} = \int d^3\mathbf{r} \left[\sum_{\alpha} \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \alpha) \hat{H}_e \Psi(\mathbf{r}, \alpha) \rangle_{\Delta} - \frac{|\Delta|^2}{V} \right] \quad (6.25)$$

Преобразуем первое слагаемое, используя преобразование Боголюбова и уравнения БДЖ:

$$\begin{aligned} & \int d^3\mathbf{r} \sum_{\alpha} \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \alpha) \hat{H}_e \Psi(\mathbf{r}, \alpha) \rangle_{\Delta} = \\ & = \sum_{m,n,\alpha} \left[\langle \gamma_{m\alpha}^{\dagger} \gamma_{n\alpha} \rangle \int u_m^* \hat{H}_e u_n d^3\mathbf{r} + \langle \gamma_{m\alpha} \gamma_{n\alpha}^{\dagger} \rangle \int v_m \hat{H}_e v_n^* d^3\mathbf{r} \right] = \\ & = 2 \int d^3\mathbf{r} \left\{ \sum_n [\epsilon_n (f_n |u_n|^2 - (1 - f_n) |v_n|^2) + \Delta v_n u_n^* (1 - 2f_n)] \right\} \end{aligned}$$

$$\sum_{\alpha} \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, \alpha) \hat{H}_e \Psi(\mathbf{r}, \alpha) \rangle_{\Delta} = 2 \sum_n [\epsilon_n f_n - \epsilon_n |v_n|^2] + \frac{2|\Delta|^2}{V} \quad (6.26)$$

Тогда общее выражение для плотности энергии конденсации:

$$\langle H \rangle_{\Delta} = 2 \sum_n \epsilon_n f_n - 2 \sum_n \epsilon_n |v_n|^2 + \frac{|\Delta|^2}{V} \quad (6.27)$$

Получаем три вклада. Первый – энергия квазичастичных возбуждений (при $T=0$ обращается в ноль), а второй и третий составляют энергию основного состояния сверхпроводника. Рассмотрим её:

$$E_{\Delta} = -2 \sum_n \epsilon_n |v_n|^2 + \frac{|\Delta|^2}{V} = - \sum_n (\epsilon_n - \xi_n) + \frac{|\Delta|^2}{V} = \quad (6.28)$$

$$= -2N(0) \int_0^{E_c} (\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2} - \xi) d\xi + \frac{|\Delta|^2}{V}$$

$$\begin{aligned} & \int_0^{E_c} (\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2} - \xi) d\xi = \\ & = \frac{1}{2} \left[\xi \sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2} - \xi^2 + |\Delta|^2 \ln(\xi + \sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}) \right]_0^{E_c} = \\ & = \frac{|\Delta|^2}{4} + \frac{|\Delta|^2}{2} \ln\left(\frac{2E_c}{|\Delta|}\right) = \frac{|\Delta|^2}{4} + \frac{|\Delta|^2}{2N(0)V} \end{aligned} \quad (6.29)$$

Здесь мы учли тот факт, что $|\Delta| \ll E_c$. Итак, получили энергию конденсации:

$$E_{\Delta} = \frac{-N(0)|\Delta|^2}{2} \quad (6.30)$$

То, что получилось именно такое выражение, качественно тоже можно объяснить. В основном состоянии сверх-

проводника все электронные состояния объединены в пары, поэтому для подсчета выгоды такого состояния относительно состояния, где все электронные состояния неспаренные, нужно $N(0) * \Delta$ (число пар) умножить на величину $\sim \Delta$ (энергию связи одной пары).

6.5 Плотность сверхтока.

Найдем теперь плотность тока, используя уравнения БдЖ. Общее выражение для плотности тока с учетом магнитного поля:

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar e}{2m} \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}^{\dagger} [(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A})\Psi_{\alpha}] + [(i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A})\Psi_{\alpha}^{\dagger}]\Psi_{\alpha} \quad (6.31)$$

Перепишем Ψ через преобразование Боголюбова. Выживут только слагаемые с сочетаниями $\gamma\gamma^{\dagger}$ и $\gamma^{\dagger}\gamma$, которые запишем через функции Ферми (см. главу про Уравнения БдЖ). Получим:

$$\begin{aligned} \mathbf{j} = & \frac{\hbar e}{m} \sum_n f_n u^*(\mathbf{r})(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A})u(\mathbf{r}) + \\ & + (1 - f_n)v_n(\mathbf{r})(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A})v_n^*(\mathbf{r}) + h.c. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Будем находить сверхток в равновесном состоянии. Проведём вывод спектра, аналогичный выводу спектра в начале предыдущей главы. Отличие от того вывода состоит в том, что теперь параметр порядка зависит от координаты: $\Delta = |\Delta|e^{+ikr}$. Калибровочные преобразования, аналогичные (6.2), будут иметь вид:

$$u(\mathbf{r}) = e^{i(q+k/2)r}U_q, \quad v(\mathbf{r}) = e^{i(q-k/2)r}V_q \quad (6.33)$$

Как и ранее, теперь мы подставляем полученные выражения в уравнения БдЖ, получая однородные уравнения на не зависящие от координат U_q, V_q . Из условия равенства нулю детерминанта системы уравнений, находим спектр квазичастиц:

$$\epsilon_q = \hbar q v_s \pm \sqrt{\xi_q^2 + |\Delta|^2} = \hbar q v_s + \epsilon_q^{(0)}, \quad (6.34)$$

где $v_s = \frac{\hbar k}{m}$ - сверхскорость. Обратим внимание на то, что при $\mathbf{k} = 0$ восстанавливается спектр, который был у нас до введения сверхтока, как и должно быть. Факторы когерентности, найденные из однородных уравнений на U_q, V_q , имеют вид:

$$U_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\xi_q}{\epsilon_q^{(0)}}\right)^{1/2}, \quad V_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\xi_q}{\epsilon_q^{(0)}}\right)^{1/2} \quad (6.35)$$

Посмотрим, что интересного можно заметить в спектре с учетом тока (6.34). При определенной величине сверхтока, в спектре может закрываться щель. Такая критическая скорость сверхтока определяется выражением:

$$v_s^c = -\frac{|\Delta|}{p_F} \frac{p}{p_F} \quad (6.36)$$

Продолжим находить ток. Подставим 6.33 в 6.32, получим:

$$\begin{aligned} j &= \frac{2\hbar e}{m} \sum_q [(q + k/2) f_q U_q^2 - (q - k/2)(1 - f_q) V_q^2] = \\ &= \frac{\hbar e}{m} \mathbf{k} \sum_q [f_q U_q^2 + (1 - f_q) V_q^2] + \frac{2\hbar e}{m} \sum_q \mathbf{q} [f_q U_q^2 - (1 - f_q) V_q^2] \end{aligned} \quad (6.37)$$

Представим функцию Ферми в виде $f(\epsilon_q) = f(\epsilon_q^0) + [f(\epsilon_q) - f(\epsilon_q^0)]$. Тогда ток можно переписать в таком виде:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{j} = & \frac{\hbar e}{m} \mathbf{k} \sum_{\mathbf{q}} [f(\epsilon_{\mathbf{q}}^0) U_{\mathbf{q}}^2 + (1 - f(\epsilon_{\mathbf{q}}^0)) V_{\mathbf{q}}^2] + \\
 & + \frac{2\hbar e}{m} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} [f(\epsilon_{\mathbf{q}}^0) U_{\mathbf{q}}^2 - (1 - f(\epsilon_{\mathbf{q}}^0)) V_{\mathbf{q}}^2] + \\
 & + \frac{\hbar e}{m} \mathbf{k} \sum_{\mathbf{q}} (f(\epsilon_{\mathbf{q}}) - f(\epsilon_{\mathbf{q}}^0)) (U_{\mathbf{q}}^2 - V_{\mathbf{q}}^2) + \\
 & + \frac{2\hbar e}{m} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} (f(\epsilon_{\mathbf{q}}) - f(\epsilon_{\mathbf{q}}^0)) (U_{\mathbf{q}}^2 + V_{\mathbf{q}}^2)
 \end{aligned} \tag{6.38}$$

Второе и третье слагаемые равны нулю. Сумма в первом слагаемом тока соответствует плотности электронов (5.29), а само первое слагаемое - току в однородном сверхпроводнике $\mathbf{j}_0 = nev_s$, который переносится всеми электронами. При этом в рамках двухжидкостной модели можно записать $\mathbf{j} = n_s e \mathbf{v}_s = \mathbf{j}_0 - \mathbf{j}_n = e \mathbf{v}_s (n - n_n)$. Здесь $\mathbf{j}_n = en_n \mathbf{v}_s$ - ток, который переносился бы нормальными электронами. Сравнивая это выражение с выведенным нами выражением для сверхтока, получим следующее выражение с учетом нормировки $U_{\mathbf{q}}^2 + V_{\mathbf{q}}^2 = 1$:

$$\mathbf{j}_n = \frac{2\hbar e}{m} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} (f(\epsilon_{\mathbf{q}}^0) - f(\epsilon_{\mathbf{q}})) \tag{6.39}$$

Разложим функцию распределения до первого порядка по величине сверхскорости:

$$f(\epsilon_{\mathbf{q}}) = f(\epsilon_{\mathbf{q}}^0) + (\epsilon_{\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{q}}^0) \frac{df}{d\epsilon_{\mathbf{q}}}(\epsilon_{\mathbf{q}}^0) = f(\epsilon_{\mathbf{q}}^0) + \hbar \mathbf{q} \mathbf{v}_s \frac{df}{d\epsilon_{\mathbf{q}}}(\epsilon_{\mathbf{q}}^0) \tag{6.40}$$

Подставим:

$$\mathbf{j}_n = -\frac{2\hbar^2 e}{m} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q}(\mathbf{q}\mathbf{v}_s) \frac{df}{d\epsilon_q}(\epsilon_q^0) \quad (6.41)$$

Тогда концентрация имеет вид:

$$\begin{aligned} n_n &= -\frac{2p_F^2}{3m} \sum_{\mathbf{q}} \frac{df}{d\epsilon_q}(\epsilon_q^0) = -\frac{2p_F^2}{3m} N(0) \int \frac{df}{d\epsilon_q}(\epsilon_q^0) d\xi_q = \\ &= -n \int \frac{df}{d\epsilon_q}(\epsilon_q^0) d\xi_q = -2n \int_{|\Delta|}^{+\infty} \frac{\epsilon_q}{\sqrt{\epsilon_q^2 - |\Delta|^2}} \frac{df}{d\epsilon_q}(\epsilon_q^0) d\epsilon_q \end{aligned} \quad (6.42)$$

В последнем переходе использовалось равенство $\epsilon d\epsilon = \xi d\xi$. Итак, мы получили выражение для тока, переносимого нормальными электронами в двухжидкостной модели. Можно заметить, что $n_n(\Delta = 0) = n$, как и должно быть, исходя из физических соображений. Итоговое выражение для сверхтока:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_0 - \mathbf{j}_n = ne\mathbf{v}_s + 2n \int_{|\Delta|}^{+\infty} \frac{\epsilon_q}{\sqrt{\epsilon_q^2 - |\Delta|^2}} \frac{df}{d\epsilon_q}(\epsilon_q^0) d\epsilon_q \quad (6.43)$$

Глава 7

Теорема Андерсона.

В этой главе мы обсудим влияние примесей (немагнитных) на сверхпроводимость. Существует теорема, называемая теоремой Андерсона, гласящая следующее: немагнитные примеси не влияют на обычную s -волновую изотропную синглетную однозонную сверхпроводимость (не подавляют её). Теорема работает в случае, когда примесей не слишком много (чтобы не было эффектов локализации).

Давайте получим доказательство этой теоремы. Доказательство также приведено, например, в соответствующем разделе в книге П. Де Женна [3].

Запишем уже знакомые нам уравнения БдЖ в случае отсутствия магнитного поля:

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \mu + U(\mathbf{r})\right]u(\mathbf{r}) + \Delta v(\mathbf{r}) &= \varepsilon u(\mathbf{r}) \\ \left[\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mu - U(\mathbf{r})\right]v(\mathbf{r}) + \Delta^* u(\mathbf{r}) &= \varepsilon v(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{7.1}$$

где $U(\mathbf{r})$ - потенциал, включающий в себя, в том числе, и потенциал примесей.

Также запишем УШ для электронных волновых функций нормального металла с примесями:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \mu + U(\mathbf{r})\right]\omega_n(\mathbf{r}) = \xi_n \omega_n(\mathbf{r}) \quad (7.2)$$

Решения такой системы уравнений БдЖ и УШ для нормального металла зависят от координат одинаково. Положим:

$$\begin{aligned} u_n(\mathbf{r}) &= \omega_n(\mathbf{r})u_n \\ v_n(\mathbf{r}) &= \omega_n(\mathbf{r})v_n \end{aligned} \quad (7.3)$$

Подставив эти два уравнения в систему уравнений БдЖ, получим:

$$\begin{aligned} (\varepsilon_n - \xi_n)u_n - \Delta v_n &= 0 \\ -(\varepsilon_n + \xi_n)v_n + \Delta^* u_n &= 0 \end{aligned} \quad (7.4)$$

Отсюда можно получить спектр:

$$\varepsilon_n = \sqrt{\xi_n^2 + |\Delta|^2} \quad (7.5)$$

Уравнение самосогласования 5.26 можно записать в виде:

$$\Delta = V \sum_n |\omega_n|^2 (1 - 2f_n) \frac{\Delta}{2\varepsilon_n} \quad (7.6)$$

Теперь введем плотность состояний в нормальном металле:

$$N(\mathbf{r}, \xi) = \sum_n |\omega_n(\mathbf{r})|^2 \delta(\xi - \xi_n) \quad (7.7)$$

Тогда уравнение самосогласование можно переписать так:

$$\Delta(\mathbf{r}) = V \int d\xi N(\mathbf{r}, \xi) (1 - 2f_n) \frac{\Delta}{2\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}} \quad (7.8)$$

Далее, т.к. мы не учитываем эффекты локализации, плотность состояний $N(\mathbf{r}, \xi)$ мало отличается от своего усредненного по координате значения $\bar{N}(\xi)$.

$$\Delta = V \int d\xi \bar{N}(\xi) (1 - 2f_n) \frac{\Delta}{2\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}} \quad (7.9)$$

При выводе теоремы Андерсона делается следующее важное предположение: $\bar{N}(\xi)$ это то же самое, что и плотность состояний без примесей. Если это верно, то выражение 7.9 совпадает с уравнением для чистого сверхпроводника (без примесей), и, следовательно, параметр порядка (а значит, и T_c) в случае наличия примесей не будет отличаться от параметра порядка в случае без примесей. Таким образом, немагнитные примеси не влияют на T_c .

Стоит отметить, что это предположение теоремы Андерсона выполняется с хорошей точностью для обычных материалов в размерности 3D. В 2D $N(\xi)$ зависит от примесей и в материалах с специфическими особенностями электронного спектра – тоже.

Глава 8

Андреевское отражение.

Рассмотрим границу между нормальным металлом (N) и сверхпроводником (S). Пусть на неё из области нормального металла налетает электрон, причем энергия электрона $\varepsilon < \Delta$ (см. рис. 8.1). Что произойдет, когда электрон долетит до N/S границы? Для начала будем считать, что на границе нет никакого дополнительного потенциала (есть лишь потенциал, связанный с Δ). Имея такую маленькую энергию $\varepsilon < \Delta$, электрон не может просто пройти через границу: в сверхпроводнике из-за наличия щели нет уровней энергии, на которые он мог бы сесть. С другой стороны, просто отразиться от границы электрон тоже не может: в этом случае изменение импульса в процессе отражения было бы равно удвоенному импульсу электрона $\sim 2p_F$, а слабый барьер $\sim \Delta$ не способен так сильно изменить импульс. Для получения на барьере $\Delta p \sim p_F$ надо иметь барьер, который действует на электрон с силой $F \sim U/a$, где a - атомный масштаб барьера, в течение времени $\Delta t \sim a/v_F$, откуда получаем, что высота барьера, достаточная для изменения импульса электрона на величину $\sim 2p_F$, должна быть $U \sim E_F$. Ответ на вопрос о том, что же происходит в таком случае, состоит в следующем: электрон отразится

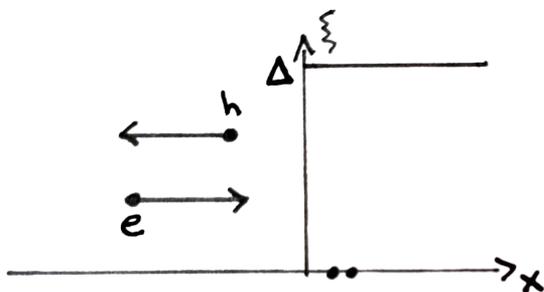


Рис. 8.1: Схематическая иллюстрация процесса Андреевского отражения

от границы, как дырка, а в сверхпроводник пройдет куперовская пара. Физически такой процесс можно представлять следующим образом. Налетающая электронная квазичастица при перелете через границу находит себе второй электрон (который оставляет после себя дырку в области N) и переходит в область S вместе с ним, образуя пару.

Процесс такого отражения (и, как следствие, течения электрического тока через S/N границу) был впервые теоретически предсказан А.Ф. Андреевым [4], и поэтому называется андреевским отражением.

Опишем такой процесс в рамках квазиклассического приближения уравнений БДЖ - уравнений Андреева. Квазиклассичность подхода здесь будет заключаться в том, что мы представим волновые функции электронной и дырочной квазичастиц как произведение быстро осциллирующей функции ($k \sim k_F$) на медленно осциллирующую огибающую (масштаб осцилляций $1/\xi$) и получим уравнения на огибающую:

$$\begin{pmatrix} u(\mathbf{r}) \\ v(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \begin{pmatrix} U(\mathbf{r}) \\ V(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (8.1)$$

Уравнения БдЖ в отсутствие потенциала:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2 k_F}{2m}u(\mathbf{r}) + \Delta v(\mathbf{r}) &= \varepsilon u(\mathbf{r}) \\ \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 v(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k_F}{2m}v(\mathbf{r}) + \Delta^* u(\mathbf{r}) &= \varepsilon v(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (8.2)$$

Подставим выражение 8.1 в уравнения БдЖ. Для этого вычислим:

$$\begin{aligned} \nabla u(\mathbf{r}) &= [i\mathbf{k}U(\mathbf{r}) + \nabla U(\mathbf{r})]e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \\ \nabla^2 u(\mathbf{r}) &= [-k^2 U(\mathbf{r}) + 2i\mathbf{k}\nabla U(\mathbf{r}) + \nabla^2 U(\mathbf{r})]e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (8.3)$$

Сравнивая все три слагаемых, можно заметить, что $\nabla U(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{\xi} \ll k$, откуда следует, что второе слагаемое много меньше первого, а третье – второго. Пренебречь и вторым и третьим нельзя – тогда уравнения перестанут иметь производные вообще. Поэтому пренебрежем членом $\nabla^2 U(\mathbf{r})$. После подстановки уравнения БдЖ примут вид:

$$\begin{aligned} -i\hbar(\mathbf{v}_F \nabla_e)U(\mathbf{r}) + \Delta V(\mathbf{r}) &= \varepsilon U(\mathbf{r}) \\ i\hbar(\mathbf{v}_F \nabla_h)V(\mathbf{r}) + \Delta^* U(\mathbf{r}) &= \varepsilon V(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (8.4)$$

Мы получили уравнения Андреева - уравнения на огибающие. Если бы в задаче фигурировало магнитное поле, то надо было бы преобразовать производные в "удлиненные производные": $\nabla_e \rightarrow \nabla - \frac{ie\mathbf{A}}{\hbar c}$, $\nabla_h \rightarrow \nabla + \frac{ie\mathbf{A}}{\hbar c}$. Обратим внимание, что $\frac{\hbar v_F}{L} \sim \Delta$, а значит масштаб изменения огибающей действительно получился $L \sim \frac{\hbar v_F}{\Delta} \sim \xi$, и наше предположение о медленной огибающей оказалось верным.

Теперь перейдем к количественному описанию андреевского отражения на SN границе (границе сверхпроводник/нормальный металл). Для этого предположим следующую модельную зависимость Δ от координаты:

$$\begin{cases} \Delta(x) = \Delta, & x > 0 \\ \Delta(x) = 0, & x < 0 \end{cases} \quad (8.5)$$

Также будем считать параметр порядка действительным: как было показано ранее, постоянную фазу Δe^{ix} можно убрать калибровочным преобразованием. Запишем уравнения Андреева для нашей задачи:

$$-i\hbar v_x \frac{dU}{dx} + \Delta(x)V(x) = \varepsilon U(x) \quad (8.6)$$

$$i\hbar v_x \frac{dV}{dx} + \Delta(x)U(x) = \varepsilon V(x) \quad (8.7)$$

Пусть на границу из нормального металла ($x < 0$) падает электрон с энергией $\varepsilon > \Delta$. Запишем общее решение для электрона в нормальном металле:

$$\begin{pmatrix} U(x) \\ V(x) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\lambda_N x} + A_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\lambda_N x}, \quad \lambda_N = \frac{\varepsilon}{\hbar v_x} \quad (8.8)$$

Также запишем общее решение в сверхпроводнике:

$$\begin{pmatrix} U(x) \\ V(x) \end{pmatrix} = B_1 \begin{pmatrix} \tilde{U} \\ \tilde{V} \end{pmatrix} e^{i\lambda_S x} + B_2 \begin{pmatrix} \tilde{V} \\ \tilde{U} \end{pmatrix} e^{-i\lambda_S x}, \quad \lambda_S = \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}}{\hbar v_x} \quad (8.9)$$

где $\tilde{U}, \tilde{V} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \pm \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}}{\varepsilon})^{1/2}$ - уже известные нам факторы когерентности. Мы рассматриваем задачу о падающем электроне, поэтому возьмем $A_1 = 1$, B_2 же обязано быть равно нулю, т.к. это соответствует возбуждению, налетающему справа из сверхпроводника (чего у нас быть не должно). Тогда имеем:

$$x < 0 : \quad \begin{pmatrix} U(x) \\ V(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\lambda_N x} + a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\lambda_N x} \quad (8.10)$$

$$x > 0 : \quad \begin{pmatrix} U(x) \\ V(x) \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \tilde{U} \\ \tilde{V} \end{pmatrix} e^{i\lambda_S x} \quad (8.11)$$

Обратите внимание, что в классической задаче рассеяния (в уравнении Шредингера или БдЖ) отраженное решение имеет противоположный импульс, т.е. на границе запутываются два направления импульса частицы. Здесь же все частицы, которые описаны выше, имеют почти один импульс $p_x > 0$. Два направления импульса запутались бы, если бы на границе был барьер. Но для рассмотрения задачи с барьером требуется вывести еще и граничное условие, этим мы будем заниматься позже. В том, что мы правильно выбрали падающее, отраженное и прошедшее решение, можно убедиться, вычислив поток:

$$\begin{aligned} P &= \frac{1}{2m} (u^* (-i\hbar\nabla)u + u (+i\hbar\nabla)u^* - v^* (-i\hbar\nabla)v - v (+i\hbar\nabla)v^*) \\ &= \frac{1}{2m} (2U^* p_F U - 2V^* p_F V) = v_F (|U|^2 - |V|^2) \end{aligned}$$

Действительно, получаем поток для падающего решения v_F , для отраженного (андреевски) $-v_F$, для прошедшего $v_F (|\tilde{U}|^2 - |\tilde{V}|^2) > 0$, для того, которое мы выкинули $v_F (|\tilde{V}|^2 - |\tilde{U}|^2) < 0$. Теперь, сшивая полученные решения по непрерывности в точке $x = 0$, находим коэффициент андреевского отражения a :

$$\begin{cases} 1 = c\tilde{U} \\ a = c\tilde{V} \end{cases} \quad \rightarrow \quad \begin{cases} c = \frac{1}{\tilde{U}} \\ a = \frac{\tilde{V}}{\tilde{U}} \end{cases} \quad (8.12)$$

До сих пор мы рассматривали одномерную задачу, в которой у нас фигурировала v_x . В реальности, электрон может падать на границу под углом $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$. Тогда в процессе рассеяния компонента k_y сохраняется и мы можем написать:

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}_F \pm \frac{\varepsilon}{v_F} \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} \quad (8.13)$$

$$e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = e^{ik_y y} e^{i(k_x + \frac{\varepsilon}{v_x})x} \quad (8.14)$$

Т.е. вся зависимость от y просто выразится в мнимой экспоненте $e^{ik_y y}$, причем общей для всех уравнений. Иными словами, уравнения выше справедливы для падающей под углом траектории, если v_x означает нормальную компоненту скорости.

Итоговый коэффициент андреевского отражения принял вид:

$$a = \frac{\tilde{V}}{\tilde{U}} = \sqrt{\frac{1 - \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}}{\varepsilon}}{1 + \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}}{\varepsilon}}} \quad (8.15)$$

Этот коэффициент стремится к 1 при энергии, стремящейся к Δ , и к нулю при $\varepsilon \rightarrow \infty$.

Теперь рассмотрим $|\varepsilon| < \Delta$. Тогда $\lambda_S = i \frac{\sqrt{\Delta^2 - \varepsilon^2}}{\hbar v_x}$,

$$\tilde{U}, \tilde{V} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 \pm \frac{i\sqrt{\Delta^2 - \varepsilon^2}}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (8.16)$$

Дальнейшие аналогичные случаю $|\varepsilon| > \Delta$ вычисления приводят нас к тому же самому ответу для коэффициента андреевского отражения 8.15 (если быть более точным, то к его аналитическому продолжению). При $|\varepsilon| < \Delta$ коэффициент андреевского отражения по модулю всегда равен 1, но имеет фазу.

Теперь важно понять, что происходит с законом сохранения заряда при андреевском отражении. Рассмотрим для примера $\varepsilon < \Delta$. Ток электрона и дырки одинаков и направлен в **одну** сторону, так как хотя дырка и движется в сторону от границы, она имеет противоположный относительно электрона заряд. То есть к границе подходит заряд $2e$. Согласно же нашим уравнениям, в сверхпроводник ничего не проходит. Это кажущееся противоречие разрешается, если мы вспомним о существовании в системе куперовских пар. При отражении электрона в виде дырки от SN границы в нормальный металл, образуется одна куперовская пара в сверхпроводнике. Она уходит в конденсат, как раз унося заряд $2e$. В нашем формализме эти пары просто не видны. Их возможно учесть, если вспомнить, к чему приводит сверхток (переносимый куперовскими парами) в однородном сверхпроводнике - к градиенту параметра порядка. Т.е. полное решение можно получить, если рассматривать неоднородный (зависящий от r) параметр порядка в сверхпроводнике (как в разделе 6.5) и искать решение уравнений в этом случае. Но это уже гораздо более сложная задача.

Глава 9

Андреевские уровни в SNS контакте.

Ток-фазовая характеристика SNS контакта.

Теперь рассмотрим более сложную систему - два полубесконечных сверхпроводника (они часто называются берегами), разделенные слоем нормального металла толщиной d . В отличие от задачи про SN контакт (предыдущая глава), в такой задаче нельзя избавиться от фазы χ параметра порядка при помощи выбора начала отсчета фазы, потому что здесь есть два сверхпроводящих берега, на которых она может быть разной. В дальнейшем, для удобства, будем считать параметр порядка на двух берегах $\Delta e^{\pm i\chi/2}$. Наша цель будет состоять в том, чтобы найти решения уравнений Андреева для этой системы (и, используя их, найти ток, протекающий через нормальную прослойку). Сначала приведем качественные рассуждения.

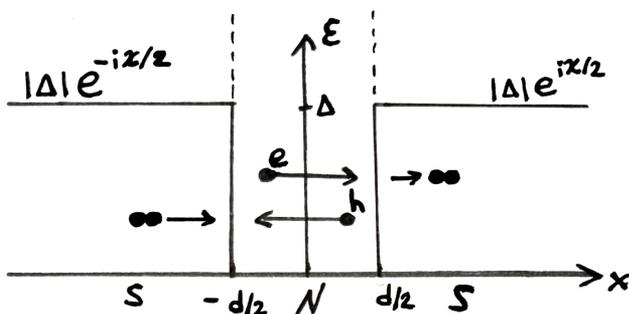


Рис. 9.1: Схематичная иллюстрация процесса переноса сверхтока в SNS контакте. Куперовские пары уходят в конденсат.

Пусть в нормальном слое летит электрон с энергией $\varepsilon < \Delta$. Подлетая к одному сверхпроводящему берегу, он андреевски отражается и в виде дырки летит обратно. Потом отражается от второго берега и снова летит к первому сверхпроводнику. Получается картина, аналогичная картине при квантовании Бора: для некоторых соотношений длины волны и толщины N слоя возможна конструктивная интерференция. Тогда при некоторых энергиях электрона в N слое будут образовываться связанные состояния.

Отличие описанных состояний от обычных состояний в резонаторах состоит в том, что здесь они образуются за счет андреевского, а не обычного отражения. За счет этого связанное состояние может переносить ток. Действительно, при однократном андреевском отражении от каждого берега, одна куперовская пара переносится из первого сверхпроводника во второй (рис. 9.1). Именно этот процесс обеспечивает бездиссипативный ток через SNS контакт.

Можно отметить, что приведенные выше рассуждения относятся к чистому случаю. В диффузном случае уровней как таковых нет, но существует аналогичная величина - токнесущая плотность состояний - которая обеспечивает

перенос тока через грязный SNS контакт.

Итак, переходим к количественному описанию системы. Пусть $|\varepsilon| < |\Delta|$. Решение уравнений Андреева в нормальном слое ($-d/2 < x < d/2$) при $k_x > 0$ имеет вид:

$$\begin{pmatrix} U(x) \\ V(x) \end{pmatrix} = A \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\lambda_N x} + a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\lambda_N x} \right], \quad (9.1)$$

$$\lambda_N = \frac{\varepsilon}{\hbar v_x}$$

Запишем решение в области сверхпроводника при $x > d/2$. Проводим калибровочное преобразование, чтобы избавиться от фазы параметра порядка в уравнениях Андреева:

$$\begin{pmatrix} U(x) \\ V(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{U}(x)e^{i\chi/4} \\ \tilde{V}(x)e^{-i\chi/4} \end{pmatrix} \quad (9.2)$$

Решение при $x > d/2$:

$$\begin{pmatrix} U(x) \\ V(x) \end{pmatrix} = d_1 \begin{pmatrix} \tilde{U}e^{i\chi/4} \\ \tilde{V}e^{-i\chi/4} \end{pmatrix} e^{-\lambda_S x}, \quad (9.3)$$

$$\lambda_S = \frac{\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}}{\hbar v_x}$$

Факторы когерентности:

$$\tilde{U}, \tilde{V} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 \pm \frac{i\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (9.4)$$

Решение при $x < -d/2$:

$$\begin{pmatrix} U(x) \\ V(x) \end{pmatrix} = d'_1 \begin{pmatrix} \tilde{V}e^{-i\chi/4} \\ \tilde{U}e^{i\chi/4} \end{pmatrix} e^{\lambda_S x} \quad (9.5)$$

Производим сшивку решений на границах по непрерывности (приравниваем решения справа и слева от границы для U, V отдельно). Для границы $x = d/2$:

$$\begin{aligned} U : Ae^{i\lambda_N d/2} &= d_1 e^{-\lambda_S d/2} \tilde{U} e^{i\chi/4}, \\ V : Aa e^{-i\lambda_N d/2} &= d_1 e^{-\lambda_S d/2} \tilde{V} e^{-i\chi/4} \end{aligned} \quad (9.6)$$

Делим нижнее уравнение на верхнее, получая уравнение на коэффициент a . Так же поступаем и с аналогичными уравнениями для границы $x = -d/2$. Получим два уравнения:

$$\begin{aligned} a e^{-i\lambda_N d} &= \frac{\tilde{V}}{\tilde{U}} e^{-i\chi/2}, \quad x = d/2 \\ a e^{i\lambda_N d} &= \frac{\tilde{U}}{\tilde{V}} e^{i\chi/2}, \quad x = -d/2 \end{aligned} \quad (9.7)$$

Делим нижнее уравнение на верхнее, подставляем факторы когерентности. Получаем условие существования связанных состояний:

$$e^{2i(\lambda_N d - \chi/2)} = \frac{\varepsilon + i\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}}{\varepsilon - i\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}} \quad (9.8)$$

Перепишем это условие, введя обозначения $\sin(\alpha)$, $\cos(\alpha)$:

$$\begin{aligned} \sin(\alpha) &= \frac{\varepsilon}{|\Delta|}, \quad \cos(\alpha) = \frac{\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}}{|\Delta|}, \quad |\alpha| < \frac{\pi}{2} : \\ \frac{\varepsilon + i\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}}{\varepsilon - i\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}} &= \frac{(\varepsilon + i\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2})^2}{\varepsilon^2 + |\Delta|^2 - \varepsilon^2} = \\ &= \left(\frac{\varepsilon + i\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}}{|\Delta|} \right)^2 = (\sin \alpha + i \cos \alpha)^2 = \\ &= (i(\cos \alpha - i \sin \alpha))^2 = e^{-2i\alpha + i\pi} \end{aligned} \quad (9.9)$$

Тогда:

$$\begin{aligned} e^{2i(\lambda_N d - \chi/2)} &= e^{-2i\alpha + i\pi}, \\ 2(\lambda_N d - \chi/2) &= -2\alpha + \pi + 2\pi l \end{aligned} \quad (9.10)$$

После подстановки λ_N , получим уравнение на энергии для $k_x > 0$:

$$\varepsilon = \hbar\omega \left[\frac{\chi}{2} - \arcsin \left(\frac{\varepsilon}{|\Delta|} \right) + \pi \left(l + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (9.11)$$

Получению уравнения для $k_x < 0$ посвящена одна из задач домашнего задания.

Общий вид уравнения для $k_x > 0$ ($k_x < 0$):

$$\varepsilon = \pm \hbar\omega \left[\frac{\chi}{2} \mp \arcsin \left(\frac{\varepsilon}{|\Delta|} \right) + \pi \left(l \pm \frac{1}{2} \right) \right] \quad (9.12)$$

Теперь рассмотрим предельные случаи: случай короткого контакта ($\Delta \ll \hbar\omega = \frac{\hbar v_F}{d}$, $d \ll \frac{\hbar v_F}{\Delta} \sim \xi$) и случай длинного контакта ($\Delta \gg \hbar\omega = \frac{\hbar v_F}{d}$, $d \gg \frac{\hbar v_F}{\Delta} \sim \xi$). ξ - длина когерентности в чистом случае.

Случай короткого контакта.

Мы рассматриваем ситуацию, когда электрон имеет энергию $\varepsilon < \Delta$ (налетает ниже барьера). В то же время, в случае короткого контакта $\Delta \ll \hbar\omega$. Это приводит к тому, что скобка в выражении 9.12 должна стремиться к нулю. Получим (рис. 9.2):

$$\varepsilon = \mp |\Delta| \cos \chi/2 \quad (9.13)$$

Случай длинного контакта.

В этом случае $\frac{\varepsilon}{|\Delta|} \ll 1$, поэтому пренебрегаем арксинусом. Получаем уравнение на энергии (эквидистантные уровни) (рис. 9.3):

$$\varepsilon = \pm \hbar\omega \left(\frac{\chi}{2} \pm \frac{\pi}{2} \right) \pm \pi \hbar\omega l \quad (9.14)$$

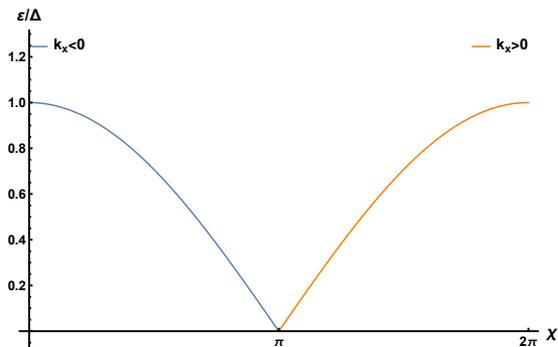


Рис. 9.2: Зависимость энергии от фазы в случае короткого контакта для $k_x > 0$ и $k_x < 0$.

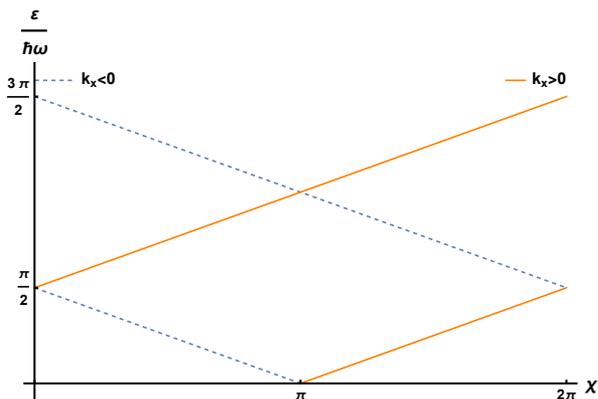


Рис. 9.3: Зависимость энергии от фазы в случае длинного контакта для $k_x > 0$ и $k_x < 0$.

Мы уже говорили о том, что если волновая функция $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ соответствует энергии ε , то волновая функция $\begin{pmatrix} -v^* \\ u \end{pmatrix}$ будет соответствовать энергии $-\varepsilon$. Используя этот факт, полученные зависимости можно продлить на область отрицательных энергий.

Теперь переходим к нахождению сверхтока через SNS контакт. Его переносят андреевские состояния. Происходит это по механизму, показанному на рис. 9.1. Общее выражение для тока:

$$\begin{aligned} \mathbf{j} = & \frac{-i\hbar e}{m} \sum_n f_n u_n^*(\mathbf{r}) \nabla u_n(\mathbf{r}) + \\ & +(1 - f_n) v_n(\mathbf{r}) \nabla v_n^*(\mathbf{r}) + h.c. \end{aligned} \quad (9.15)$$

Переходим к факторам когерентности:

$$\begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} = e^{ik_n r} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} \quad (9.16)$$

Ток вдоль оси Oх:

$$\begin{aligned} I_x = & -\frac{e}{\hbar} \sum_n (1 - 2f_n) 2|A|^2 v_x \hbar = \\ = & -\frac{e}{\hbar} \sum_n (1 - 2f_n) \frac{\hbar v_x \sqrt{\Delta^2 - \varepsilon_n^2}}{\hbar v_x + d\sqrt{\Delta^2 - \varepsilon_n^2}} \end{aligned} \quad (9.17)$$

При переходе к последней формуле мы подставили коэффициент нормировки:

$$|A|^2 = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\Delta^2 - \varepsilon^2}}{\hbar v_x + d\sqrt{\Delta^2 - \varepsilon^2}}, \quad (\varepsilon < \Delta) \quad (9.18)$$

Распишем сумму отдельно для $k_x > 0$ и $k_x < 0$:

$$I_x = -\frac{e}{\hbar} \left[\sum_{k_x > 0} (1 - 2f(\varepsilon_{>})) \frac{\hbar |v_x| \sqrt{\Delta^2 - \varepsilon_{>}^2}}{\hbar v_x + d \sqrt{\Delta^2 - \varepsilon_{>}^2}} - \sum_{k_x < 0} (1 - 2f(\varepsilon_{<})) \frac{\hbar |v_x| \sqrt{\Delta^2 - \varepsilon_{<}^2}}{\hbar v_x + d \sqrt{\Delta^2 - \varepsilon_{<}^2}} \right] \quad (9.19)$$

Отдельно рассмотрим случай т.н. точечного контакта, который удовлетворяет условиям $d \ll \frac{v_F}{\Delta}$ и еще имеет поперечные размеры $a \ll \frac{v_F}{\Delta}$. В этом случае

$$|A|^2 = \frac{\sqrt{\Delta^2 - \varepsilon^2}}{2\hbar v_F}, \quad (\varepsilon < \Delta) \quad (9.20)$$

Ток в случае точечного контакта имеет вид:

$$\begin{aligned} I_x &= -\frac{e}{\hbar} \left[\sum_{k_x > 0} (1 - 2f(\varepsilon_{>})) \sqrt{\Delta^2 - \varepsilon_{>}^2} - \sum_{k_x < 0} (1 - 2f(\varepsilon_{<})) \sqrt{\Delta^2 - \varepsilon_{<}^2} \right] \frac{|v_x|}{v_F} = \\ &= \frac{e|\Delta| \sin(\chi/2)}{\hbar} \operatorname{th} \left(\frac{|\Delta| \cos(\chi/2)}{2T} \right) \sum_{v_x > 0} \frac{v_x}{v_F} \end{aligned} \quad (9.21)$$

Полученная зависимость тока от фазы параметра порядка схематично изображена на рис. 9.4.

Заметим, что условие $\chi(\mathbf{r}) = \text{const}$, которое мы используем, выполняется в случае, когда ширина контакта мала. Под шириной мы здесь подразумеваем величину, измеренную в направлении вдоль плоскости сверхпроводящих берегов.

Распишем сумму, полученную в предыдущем выражении:

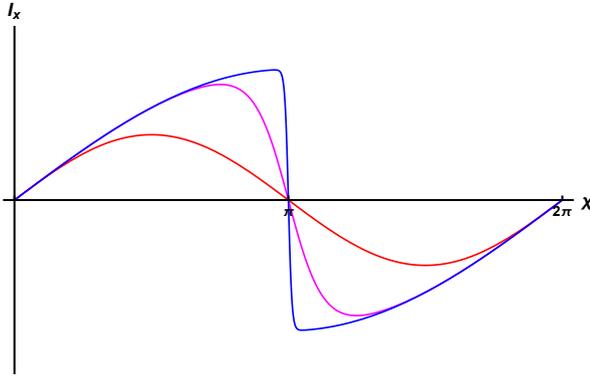


Рис. 9.4: Зависимость тока вдоль оси Ox от фазы параметра порядка при различных значениях соотношения $\frac{|\Delta|}{T}$. Красная кривая достигается при $\frac{|\Delta|}{T} \ll 1$. При увеличении параметра $\frac{|\Delta|}{T}$ зависимость переходит от синусоидальной формы (красная) к пилообразной форме (синяя).

$$\begin{aligned}
 \sum_n &\rightarrow 2\pi\hbar N(0)v_F S \int_{\varepsilon>0} d\varepsilon \frac{d\Omega}{4\pi} [\delta(\varepsilon - \varepsilon_>) + \delta(\varepsilon - \varepsilon_<)], \\
 \sum_{v_x>0} \frac{v_x}{v_F} &= 2\pi\hbar N(0)v_F S \int_{\varepsilon>0} d\varepsilon \times \\
 \times \int_{v_x>0} \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{v_x}{v_F} &[\delta(\varepsilon - \varepsilon_>) + \delta(\varepsilon - \varepsilon_<)] = \\
 &= 2\pi\hbar N(0)v_F S \int_{v_x>0} \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{v_x}{v_F}
 \end{aligned} \tag{9.22}$$

Получаем выражение для суммы:

$$\sum_{v_x>0} \frac{v_x}{v_F} = \frac{\pi\hbar N(0)v_F S}{2} \tag{9.23}$$

Тогда выражение для тока вдоль оси Ox для точечного контакта принимает вид:

$$I_x = \frac{\pi|\Delta|\sin(\chi/2)}{eR_{sh}}th\left(\frac{|\Delta|\cos(\chi/2)}{2T}\right), \quad (9.24)$$

$$\frac{1}{R_{sh}} = \frac{N_{>}}{R_0}, \quad N_{>} = \frac{\pi k_F^2 S}{(2\pi)^2},$$

где $N_{>}$ - число мод, проходящих направо, $R_0 = \frac{\pi\hbar}{e^2}$ - квантовое сопротивление. Отсюда можно получить критический ток для предельных случаев:

$$I_c = \frac{\pi|\Delta|}{eR_{sh}}, \quad T = 0 \quad (9.25)$$

$$I_c = \frac{\pi|\Delta|^2}{4eR_{sh}T}, \quad T \rightarrow T_c$$

В случае длинного контакта ($d \gg \frac{\Delta}{v_F}$ или, иными словами, $|\omega| \ll \Delta$) при наложении дополнительного условия $|\omega| \ll T \ll \Delta$:

$$I = I_c \sin(\chi)$$

$$I_c = \frac{1}{2eR_{sh}} \frac{8\hbar v_F}{d} e^{-d/\xi_N}, \quad (9.26)$$

где $\xi_N = \frac{\hbar v_F}{2\pi T}$ - глубина проникновения сверхпроводящих корреляций в нормальный металл.

Глава 10

Модель ВТК

Рассмотрим NS контакт и найдем его ВАХ. Мы будем работать в уравнениях БдЖ и учитывать конечную прозрачность барьера. Это называется моделью ВТК [5]. Модель ВТК – очень популярная (и среди теоретиков, и среди экспериментаторов) модель для описания множества систем с не полностью прозрачной границей. Эта модель названа в честь трех ученых: Blonder-Tinkham-Klapwijk. Мы предполагаем следующее: Δ опять имеет вид ступеньки $\Delta(x) = \Delta\theta(x)$, и в дополнение на границе существует потенциал барьера $U(x) = V\delta(x)$. Отметим, что уравнения Андреева здесь нам не подойдут. Как указывалось выше, для решения задач с неидеальными границами нужны граничные условия, которые выводятся из уравнений БдЖ. Так что нам здесь проще сразу решить задачу в формализме БдЖ. Сначала рассмотрим энергии $\epsilon > \Delta$. Задача у нас трехмерная. Однако от двух координат, которые параллельны SN границе, можно избавиться, представив решение в виде:

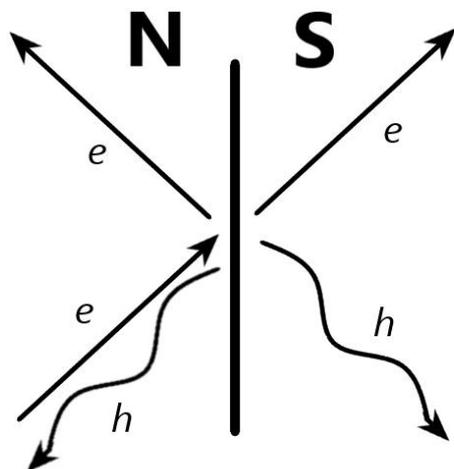


Рис. 10.1: Возможные каналы рассеяния электрона падающего из N слоя. Обычное отражение, андреевское отражение, обычное и андреевское прохождения.

$$\begin{pmatrix} u(x, y, z) \\ v(x, y, z) \end{pmatrix} = e^{i(k_y y + k_z z)} \begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix} \quad (10.1)$$

Тогда ур-ия БдЖ принимают вид:

$$\begin{cases} [-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - E_x]u + \Delta v = \epsilon u \\ -[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - E_x]v + \Delta u = \epsilon v \end{cases}, \quad E_x = E_F - \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + k_z^2) \quad (10.2)$$

С фиксированными p_y, p_z , которые не меняются при прохождении границы, в силу трансляционной инвариантности в этих направлениях, есть 4 независимых решения в

каждой области – падающие и отраженные электроно- и дырочноподобные квазичастицы. Исходя из вышесказанного, запишем общее решение.

Четыре различных процесса могут быть реализованы: электроноподобная квазичастица падает из N слоя (процесс 1, рис. 10.1), электроноподобная квазичастица падает из сверхпроводника (процесс 2), из N или S слоёв падает дырочноподобная квазичастица (процессы 3 и 4). Нам придется найти коэффициенты рассеяния для всех четырех процессов. Начнем с первого. Решение в N слое запишется так:

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix} = e^{iq_+(N)x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + ae^{iq_-(N)x} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + be^{-iq_+(N)x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10.3)$$

$$q_{\pm}(N) = k_x \pm \frac{\epsilon}{\hbar v_x}$$

Важно отметить, что здесь нет четвертого возможного линейно независимого решения - дырки, двигающейся к границе. Его нет потому, что оно не соответствует поставленной задаче рассеяния (электрон налетает на границу из N области). a, b - коэффициенты андреевского и обычного отражений, соответственно. Теперь запишем решение в S слое:

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix} = ce^{iq_+(S)x} \begin{pmatrix} \tilde{U} \\ \tilde{V} \end{pmatrix} + de^{-iq_-(S)x} \begin{pmatrix} \tilde{V} \\ \tilde{U} \end{pmatrix} \quad (10.4)$$

$$q_{\pm}(S) = k_x \pm \frac{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}}{\hbar v_x}$$

\tilde{U}, \tilde{V} - обыкновенные факторы когерентности. Нам потребуются лишь выражения: $\tilde{U}^2 - \tilde{V}^2 = \frac{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}}{\epsilon}$, $\tilde{U}\tilde{V} = \frac{\Delta}{2\epsilon}$.

Для сшивки решений на SN границе мы должны воспользоваться непрерывностью решения и известной величиной скачка производной решения на границе. (Тут мы не можем говорить о непрерывности производной, как ранее, т.к. у нас теперь есть дельта барьер на границе.)

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix}_{x=+0} = \begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix}_{x=-0} \quad (10.5)$$

$$\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix}_{x=+0} - \frac{d}{dx} \begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix}_{x=-0} = 2|k_x|Z \begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix}_{x=0} \quad (10.6)$$

Здесь $Z = \frac{mV}{\hbar^2|k_x|}$ - туннельность границы - основной параметр, характеризующий границу в модели ВТК. После решения данной системы уравнений мы получаем следующий ответ:

$$\begin{cases} a = D^{-1}\tilde{U}\tilde{V} \\ b = D^{-1}(\tilde{U}^2 - \tilde{V}^2)(Z^2 + iZ) \\ c = D^{-1}(1 - iZ)\tilde{U} \\ d = D^{-1}iZ\tilde{V} \\ D = \tilde{U}^2 + (\tilde{U}^2 - \tilde{V}^2)Z^2 \end{cases} \quad (10.7)$$

Проверим полученный ответ на разумность. При $Z = 0$ (случай прозрачной границы) мы получаем коэффициенты, ранее выведенные для случая без дельта-барьера 8.12. При $\Delta \rightarrow 0$ наша задача переходит в известную из курса квантовой механики задачу о рассеянии электрона на

дельта-барьере, и наш ответ для случая $\Delta \rightarrow 0$ совпадает с ответом на эту квантовомеханическую задачу: $b = \frac{Z}{1-iZ}$.

Нетрудно получить ответ для $\epsilon < \Delta$. В этом случае прошедших решений нет, $|a|^2 + |b|^2 = 1$,

$$|a|^2 = \frac{\Delta^2}{\epsilon^2 + (\Delta^2 - \epsilon^2)(1 + 2Z^2)^2} \quad (10.8)$$

Мы разобрались только с первым процессом – электроном, падающим из нормального металла. Перейдем ко второму процессу – электрону, падающему из сверхпроводника (рассматриваем только $\epsilon > \Delta$, так как налетать электрон может только над барьером).

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix}_S = e^{-iq_+(S)x} \begin{pmatrix} \tilde{U} \\ \tilde{V} \end{pmatrix} + a_2 e^{-iq_-(S)x} \begin{pmatrix} \tilde{V} \\ \tilde{U} \end{pmatrix} + b_2 e^{iq_+(S)x} \begin{pmatrix} \tilde{U} \\ \tilde{V} \end{pmatrix} \quad (10.9)$$

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix}_N = c_2 e^{-iq_+(N)x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + d_2 e^{+iq_-(N)x} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.10)$$

Решение можно выразить через найденные выше коэффициенты: $a_2 = -a^*$, $b_2 = b^*$, $c_2 = \frac{v_g(S)}{v_g(N)} c^*$, $d_2 = -\frac{v_g(S)}{v_g(N)} d^*$. Трудолюбивому читателю предлагаем самостоятельно вывести $a_{3,4}$, $b_{3,4}$, $c_{3,4}$, $d_{3,4}$ (коэффициенты для случаев падения дырки из области N и из области S).

Теперь вычислим ток через NS границу, используя найденные коэффициенты:

$$j = -\frac{i\hbar e}{m} \sum_{n,p} [f_{n,p}(u_{n,p}^* \nabla u_{n,p}) + (1 - f_{n,p})(v_{n,p} \nabla v_{n,p}^*) - h.c.] \quad (10.11)$$

Где сумма по $n = 1, 2, 3, 4$ - сумма по вышеописанным четырем процессам. Мы не предполагаем никаких рассеиваний, поэтому $f_{1,3,p}$ равна функции распределения в глубине нормального слоя $f_p(x \rightarrow -\infty)$. Аналогично $f_{2,4,p} = f_p(x \rightarrow +\infty)$. Так как мы интересуемся ВАХ контакта, то будем считать $f_p(x \rightarrow -\infty) = f_0(\epsilon_p - eV)$, $f_p(x \rightarrow +\infty) = f_0(\epsilon_p)$, где V - приложенное напряжение. Подставим найденные нами коэффициенты a_n, b_n :

$$\begin{aligned} -iu_{1,p}^* \nabla u_{1,p} + c.c &= 2k_x(1 - |b|^2) \\ -iv_{1,p} \nabla v_{1,p}^* + c.c &= -2k_x|a|^2 \end{aligned} \quad (10.12)$$

$$I_{NIS} = AeN(0)v_F S \int_{-\infty}^{\infty} (1 - |b|^2 + |a|^2)(f_0(\epsilon - eV) - f_0(\epsilon))d\epsilon \quad (10.13)$$

Здесь A - геометрический фактор. Обратите внимание, что наличие $|a|^2$ - андреевского отражения - увеличивает проходящий ток. Вспомним: каждое андреевское отражение одного электрона приводит к прохождению куперовской пары (по сути двух электронов) в сверхпроводник, что и объясняет увеличение тока.

Для начала рассмотрим несверхпроводящий контакт ($\Delta = 0$). Тогда $a = 0$ и:

$$I_{NIN} = \frac{AeN(0)v_F S}{1 + Z^2} \int_{-\infty}^{\infty} (f_0(\epsilon - eV) - f_0(\epsilon))d\epsilon = \frac{V}{R_N} \quad (10.14)$$

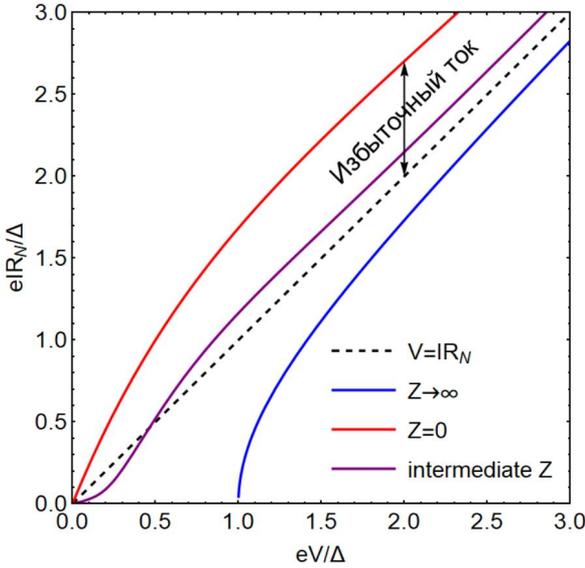


Рис. 10.2: Качественная вольт-амперная характеристика SN границы в модели ВТК.

где мы ввели $R_N = \frac{Ae^2N(0)v_F S}{1+Z^2}$ - нормальное сопротивление контакта. Такое выражение можно получить, взяв вышеуказанный интеграл. Теперь перейдем к NIS контакту. Для случая $Z \gg 1$ (низкопрозрачный барьер):

$$|b|^2 = 1 - \frac{1}{Z^2(\tilde{U}^2 - \tilde{V}^2)} = 1 - Z^{-2} \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}} \quad (10.15)$$

где последнее отношение можно переписать как $\frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}} = \frac{N_S(\epsilon)}{N(0)}$, то есть оно представляет собой отношение сверхпроводящей и нормальной плотностей состояний на данной энергии. В то же время $|a|^2 \sim \frac{1}{Z^4} \rightarrow 0$ - можно пренебречь.

$$I_{NIS} = \frac{1}{eR_N} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{N_S(\epsilon)}{N(0)} (f_0(\epsilon - eV) - f_0(\epsilon)) d\epsilon \quad (10.16)$$

При $T \ll T_c$ можно представить f_0 ступенькой и получить часто встречающуюся классическую ВАХ для NS контакта:

$$I_{NIS} = \frac{\sqrt{(eV)^2 - \Delta^2}}{eR_N} \theta(eV - \Delta) \quad (10.17)$$

Теперь проанализируем случай $Z \rightarrow 0$. В этом случае, по крайней мере при малых токах, вклад в ток дают малые энергии (процессы андреевского отражения при $\epsilon < \Delta$), для которых $|a| = 1$, $|b| = 0$, тогда ВАХ примет вид $I_{NIS} = 2 \frac{V}{R_N}$ при $eV \ll \Delta$. При больших напряжениях ВАХ, разумеется, выйдет на нормальное сопротивление $\frac{dV}{dI} = R_N$. Однако начальный, более быстрый, рост тока никуда не денется, асимптотика будет иметь вид $I_{NIS} = \frac{V}{R_N} + \text{const}$. Данное превышение называется избыточным током и ассоциируется с андреевским отражением. Качественный вид ВАХ NIS контакта приведен на рис. 10.2

Глава 11

Метод Гриневских функций

11.1 Основные понятия о функции Грина.

В математике Гриневские функции используются для решения дифференциальных линейных неоднородных уравнений. Рассмотрим уравнение

$$\hat{L}\psi(r) = f(r) \quad (11.1)$$

где \hat{L} - дифференциальный оператор, например в уравнении Шредингера это $\hat{L} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)$. Тогда функцией Грина $G(r, r')$ называется решение уравнения

$$\hat{L}G(r, r') = \delta(r - r') \quad (11.2)$$

тогда решение уравнения 11.1 будет:

$$\psi(r) = \int G(r, r') f(r') dr' \quad (11.3)$$

В этом нетрудно убедиться, напрямую подставив решение в 11.1. Также следует отметить, что функция Грина тесно связана с задачей на собственные значения. Пусть ϕ_n - набор собственных функций оператора \hat{L} - как известно, он образует базис (по крайней мере для эрмитовых операторов).

$$\hat{L}\phi_n = \lambda_n\phi_n \quad (11.4)$$

Рассмотрим уравнение

$$\hat{L}G(r, r') - \lambda G(r, r') = \delta(r - r') \quad (11.5)$$

Ищем решение для гриновской функции в виде разложения по базису $\{\phi_n\}$:

$$G(r, r') = \sum_n c_n(r') \phi_n(r) \quad (11.6)$$

Разложение единицы в рассматриваемом базисе имеет вид:

$$\delta(r - r') = \sum_n \phi_n^*(r) \phi_n(r') \quad (11.7)$$

Отсюда можно найти, что

$$c_n(r) = \frac{\phi_n^*(r)}{\lambda_n - \lambda} \quad (11.8)$$

т. е. функция Грина имеет полюса при $\lambda = \lambda_n$ - нам это пригодится в дальнейшем.

Что с точки зрения физики означает тот факт, что нам удалось представить решение уравнения 11.1 через функцию Грина? Сама функция Грина - решение уравнения, когда источник $f(r) = \delta(r - r')$, т. е. когда мы имеем дело с точечным источником в точке $r = r'$. Это означает, что полное решение представляется как суперпозиция решений для точечных источников, на которые мы можем разложить полный источник. Этот принцип - вторичных точечных источников - используется везде. Например, в оптике он известен под названием "принцип Гюйгенса-Френеля". Для уравнения Гельмгольца, кстати, функцией Грина является $G(r, r') = \frac{e^{\pm ik|r-r'|}}{|r-r'|}$ - сходящаяся или расходящаяся сферическая электромагнитная волна или, по другому, излучение точечного источника.

Рассмотрим уравнение вида

$$(\nabla^2 + U(r))\psi = E\psi \quad (11.9)$$

это может быть и уравнение Шредингера, и уравнения Максвелла в среде (роль U тогда играет диэлектрическая проницаемость), и многое другое. Для произвольного вида U решение очевидно неизвестно. Тогда воспользуемся теорией возмущений, считая возмущением $U(r)\psi(r)$. Важно отметить, что такой метод хорошо подойдет в случае потенциала вида "холмик", но не к яме - связанные состояния, которые бывают в ямах, по теории возмущений получить может оказаться сложно. Введем гриновскую функцию невозмущенного уравнения $G(r, r')$. Тогда полное решение принимает вид:

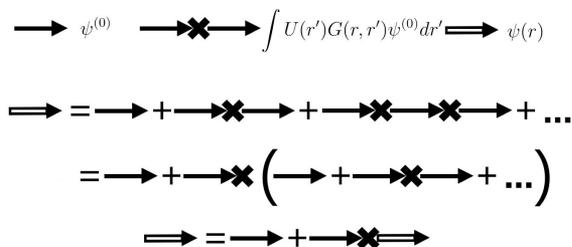


Рис. 11.1: Иллюстрация суммирования ряда поправок в диаграммной технике. Обозначения: стрелка - невозмущенное решение $\psi^{(0)}$, крестик обозначает интеграл с потенциалом, толстая стрелка - полное решение. (Более строго - такой ряд должен суммироваться для функции Грина, а не для ψ)

$$\psi(r) = \int G(r, r')U(r')\psi(r')dr' \quad (11.10)$$

Как и обычно, ищем решение для ψ в виде разложения:

$$\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \psi^{(3)} + \dots \quad (11.11)$$

$$\psi_i = \int G(r, r')U(r')\psi_{i-1}(r')dr' \quad (11.12)$$

И если такой ряд сойдется - мы получили ответ. Часто такие ряды записывают в виде диаграмм, см. рис. 11.1. Эта методика напоминает суммирование геометрической прогрессии по следующему принципу:

$$\begin{aligned}
 S = 1 + q + q^2 + q^3 + \dots &\Rightarrow S = 1 + q(1 + q + q^2 + \dots) \Rightarrow \\
 \Rightarrow S = 1 + qS &\Rightarrow S = \frac{1}{1 - q}
 \end{aligned} \quad (11.13)$$

Изложение методов диаграммной техники в наш курс не входит, мы всего лишь хотели продемонстрировать, что функции Грина тесно связаны с данной методикой. Некоторые общие вопросы теории многократного рассеяния волн, в том числе применение диаграммной техники к таким процессам, рассмотрены, например, в книге [6].

11.2 Функция Грина невзаимодействующих электронов.

Все изложенное в предыдущем разделе относилось к одночастичным задачам, а описание сверхпроводимости точно является многочастичной задачей. Напомним, что в дополнение к многочастичному уравнению Шредингера, для описания многочастичной системы надо помнить условия, налагаемые на волновую функцию - симметричность для бозонов или антисимметричность для фермионов (в дальнейшем мы всегда будем работать с электронами, поэтому будем рассматривать только антисимметричный случай).

$$\psi(\dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots) = -\psi(\dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots) \quad (11.14)$$

где $\xi = r, \sigma$ - совокупность координатных и спиновых переменных. Напрямую условия симметрии учитывать очень сложно. К счастью, мы можем вспомнить, что в первой главе этого курса мы построили формализм вторичного квантования, где симметрия волновой функции учтена автоматически. Поэтому, для построения метода функций Грина, нам необходимо использовать вторичное квантование. Напомним выражение для полевых операторов:

$$\Psi(r) = \sum_n \psi_n(r) a_n, \quad \Psi^\dagger(r) = \sum_n \psi_n^*(r) a_n^\dagger \quad (11.15)$$

Зададимся вопросом: если в момент времени t_1 электрон был в точке r_1 , с какой амплитудой вероятности он окажется в момент времени $t_2 > t_1$ в точке r_2 . Состояние электрона в точке r_1 можно описать как $\Psi^\dagger(r_1)|0\rangle$, в точке r_2 - $\Psi^\dagger(r_2)|0\rangle$. Тогда скалярное произведение:

$$\langle 0|\Psi(r_2)\Psi^\dagger(r_1)|0\rangle \quad (11.16)$$

это почти то, что нас интересует. Нас не устраивает в данном выражении то, что в нем не фигурирует время. Чтобы учесть зависимость от времени, необходимо перейти в представление Гейзенберга.

$$\Psi_H = e^{i\hat{H}t}\Psi_{Sh}e^{-i\hat{H}t} \quad (11.17)$$

В дальнейшем индекс H , указывающий на представление Гейзенберга, писать не будем. Есть еще одна тонкость - если гамильтониан зависит от времени, то выражение $e^{i\hat{H}t}$ по сути не определено, потому что гамильтониан в разные моменты времени с собой не коммутирует:

$$[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] \neq 0 \quad (11.18)$$

Необходимо воспользоваться T-упорядочением. Оператор T означает, что следующие за ним операторы должны быть расставлены в определенном порядке согласно их аргументу со значением времени: чем правее стоит оператор, тем более раннему моменту времени он соответствует. Покажем, что оператор упорядочения возникает естественным образом у $e^{-i\hat{H}t}$:

$$i \frac{d\psi}{dt} = \hat{H}\psi, \Rightarrow \psi(t_0 + dt_1) = \psi(t_0) - i\hat{H}\psi(t_0)dt_1 \quad (11.19)$$

$$\begin{aligned} \psi(t = t_0 + dt_1 + \dots + dt_N) &= (1 - i\hat{H}dt_N)(1 - i\hat{H}dt_{N-1}) \times \\ &\dots \times (1 - i\hat{H}dt_2)(1 - i\hat{H}dt_1)\psi(t_0) = T e^{-i \int \hat{H} dt} \end{aligned} \quad (11.20)$$

В итоге мы приходим к следующему выражению для амплитуды вероятности электрона перейти из (r_1, t_1) в (r_2, t_2) :

$$G(r_1, t_1, r_2, t_2) = \langle 0 | T \Psi(r_2, t_2) \Psi^\dagger(r_1, t_1) | 0 \rangle \quad (11.21)$$

Почти эта величина называется причинной функцией Грина. В чем важность этого выражения? Любые наблюдаемые, квадратичные по полевым операторам, могут быть выражены через почти такие же функции. Этими наблюдаемыми могут быть плотность частиц, ток частиц и многое другое.

Также отметим, что при $t_1 > t_2$ операторы должны быть переставлены. В этом случае мы будем иметь дело с выражением $\Psi|0\rangle$, которое будет описывать уже дырку, а не электрон. Таким образом, причинная функция Грина позволяет контролировать оба типа интересующих нас возбуждений: и дырочные, и электронные.

Теперь дадим строгое определение причинной функции Грина:

$$G_{\alpha,\beta} = -i \langle T \Psi_\alpha(X_1) \Psi_\beta^\dagger(X_2) \rangle, \quad X = r, t \quad (11.22)$$

T-упорядочение можно расписать в явном виде:

$$G_{\alpha\beta} = \begin{cases} -i\langle\Psi_\alpha(X_1)\Psi_\beta^\dagger(X_2)\rangle, & t_1 > t_2 \\ -\nu i\langle\Psi_\alpha(X_1)\Psi_\beta^\dagger(X_2)\rangle, & t_2 > t_1 \end{cases} \quad (11.23)$$

где $\nu = 1$ для бозонов и -1 для фермионов.

В физике твердого тела часто используют модифицированный гамильтониан с учетом возможности несохранения числа частиц: $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$. Далее везде под гамильтонианом мы будем понимать именно \hat{H}' . Под скобками $\langle\dots\rangle$ в определении гриновской функции мы пока понимаем запись $\langle 0|\dots|0\rangle$, то есть усреднение по основному состоянию, так как пока мы работаем при $T = 0$. Позже мы рассмотрим технику функций Грина для конечных (ненулевых) температур.

Зададимся вопросом: что было бы, если бы мы определили функцию Грина без T-упорядочения? Для ответа на такой вопрос рассмотрим величину

$$F = \frac{1}{N}\langle\Psi_\alpha(X_1)\Psi_\beta^\dagger(X_2)\rangle \quad (11.24)$$

При совпадающих временах, такое выражение эквивалентно выражению для матрицы плотности! В принципе, при решении задач можно работать и с ней. Однако, если мы, например, рассматриваем нестационарную теорию возмущения, то естественным образом в ответе все же получится T-упорядочение. И в целом работать с функцией Грина просто удобнее.

Давайте теперь свяжем матрицу плотности с функцией Грина и заодно получим некоторые полезные формулы.

$$\rho_{\alpha\beta}(r_1, r_2) = -\frac{i}{N}G_{\alpha\beta}(t, r_1; t + 0, r_2) \quad (11.25)$$

Отметим, что если в системе не присутствует магнетизм (система не ферромагнитна, не находится во внешнем поле и т. п.), то спиновая зависимость сводится к

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \delta_{\alpha\beta}G(X_1, X_2) \quad (11.26)$$

Также отметим полезный факт: в задаче, которая является пространственно однородной и однородной по времени, гриновская функция зависит только от разности координат $r = r_1 - r_2$ и разности времен $t = t_1 - t_2$ (а не от самих значений r_1, r_2, t_1, t_2).

Используя факт про однородность пространства и времени, а также обговоренную спиновую зависимость 11.26, запишем выражение на основе 11.25:

$$\rho(r) = -\frac{i}{N}G(t = -0, r) \quad (11.27)$$

Тогда выражение для плотности числа частиц имеет вид:

$$n = \frac{N}{V} = 2N \rho(0) = -2iG(t = -0, r = 0) \quad (11.28)$$

При этом в импульсном пространстве распределение частиц по импульсам будет иметь вид:

$$\begin{aligned} N(p) &= N \int \rho(r_1, r_2) e^{-ip(r_1 - r_2)} d^3(r_1 - r_2) = \\ &= -i \int G(t = -0, r) e^{-ipr} d^3r \end{aligned} \quad (11.29)$$

Нашей задачей сейчас будет получить уравнение на функцию Грина. Она имеет в своем составе Ψ -операторы, поэтому для начала рассмотрим их свойства. Вспомним антикоммутатор:

$$\{\Psi_\alpha(r, t), \Psi_\beta^\dagger(r', t)\} = \delta_{\alpha\beta}\delta(r - r') \quad (11.30)$$

На этом моменте может возникнуть вопрос: как будет выглядеть антикоммутатор, если времена не совпадают? Увы, в таком случае ничего определенного сказать про антикоммутатор будет нельзя.

Из курса квантовой механики известно уравнение Гейзенберга для Ψ :

$$-i\frac{\partial}{\partial t}\Psi_\alpha(r, t) = [\hat{H}, \Psi_\alpha(r, t)] \quad (11.31)$$

Дальнейшие выкладки, для примера, сделаем для гамильтониана невзаимодействующих частиц.

$$-i\frac{\partial}{\partial t}\Psi_\alpha(r, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\right)\Psi_\alpha(r, t) \quad (11.32)$$

Продифференцировав функцию Грина по одному из времен, мы получаем:

$$\frac{d}{dt_1}G_{\alpha\beta} = -i\langle T\frac{d\Psi_\alpha(X_1)}{dt_1}\Psi_\beta^\dagger(X_2)\rangle + \left[G_{\alpha\beta}\Big|_{t_1=t_2+0} - G_{\alpha\beta}\Big|_{t_1=t_2-0}\right] \quad (11.33)$$

где второе слагаемое в правой части получилось из-за T-упорядочения (в точке $t_1 = t_2$ функция разрывна). Вычислим его:

$$\begin{aligned} \left[G_{\alpha\beta}\Big|_{t_1=t_2+0} - G_{\alpha\beta}\Big|_{t_1=t_2-0}\right] &= -i\langle\Psi_\alpha(t_1, r_1)\Psi_\beta^\dagger(t_1, r_2)\rangle + \\ &+ \Psi_\beta^\dagger(t_1, r_2)\Psi_\alpha(t_1, r_1)\rangle = -i\delta_{\alpha\beta}\delta(r_1 - r_2) \end{aligned} \quad (11.34)$$

Сделаем преобразование Фурье (хотя это разумеется необязательно - можно работать и в координатном и в импульсном пространстве).

$$G(t, r) = \int G(\omega, p) e^{i(pr - \omega t)} \frac{d\omega d^3p}{(2\pi)^3} \quad (11.35)$$

$$G(\omega, p) = \int G(t, r) e^{-i(pr - \omega t)} d^3r dt \quad (11.36)$$

Уравнение для функции Грина примет вид:

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu) G(t, r) = \delta(t) \delta(r) \quad (11.37)$$

$$(\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu) G(\omega, p) = 1 \quad (11.38)$$

$$G(\omega, p) = \frac{1}{\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu + i0 \operatorname{sign} \omega} \quad (11.39)$$

Заметьте, мы добавили бесконечно малую мнимую добавку определенного знака в знаменатель. Она нужна для корректного обхода полюса при обратном преобразовании Фурье. Мы хотим, чтобы $N(p) = \theta(p_F - p)$. Для вычисления используем выражение, которое уже знаем:

$$N(p) = -i \lim_{t \rightarrow -0} \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega, p) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} \quad (11.40)$$

Замыкать контур нужно в верхней полуплоскости. Тогда, если $p < p_F$, то полюс функции Грина попадает в верхнюю полуплоскость, и мы получаем ненулевой интеграл, что и ожидалось из $N(p) = \theta(p_F - p)$. Если же $p > p_F$, то полюс попадает в нижнюю полуплоскость, и тогда $N(p) = 0$.

Теперь надо понять, как выглядит функция Грина, зависящая от времени в явном виде. Она состоит из полевых операторов, поэтому давайте вначале поймем, как выглядит их зависимость от времени. Иными словами, надо найти, чему равно выражение:

$$\hat{\Psi}(r, t) = e^{i\hat{H}t} \hat{\Psi}(r) e^{-i\hat{H}t} \quad (11.41)$$

Чтобы преобразовать это выражение, нужно правую экспоненту "протащить" через полевой оператор и взаимно уничтожить с левой экспонентой. Как мы уже знаем, полевой оператор определяется следующим образом: $\hat{\Psi}(r) = \sum_{p,\alpha} \hat{a}_{p,\alpha} \psi_{p,\alpha}(r)$. Тогда нам нужно понять, как связаны следующие два выражения:

$$\hat{a}_{p,\alpha} e^{-it \sum_{p,\alpha} \varepsilon_p \hat{a}_{p,\alpha}^\dagger \hat{a}_{p,\alpha}} |\phi\rangle \quad (11.42)$$

$$e^{-it \sum_{p,\alpha} \varepsilon_p \hat{a}_{p,\alpha}^\dagger \hat{a}_{p,\alpha}} \hat{a}_{p,\alpha} |\phi\rangle \quad (11.43)$$

Это можно посчитать при помощи коммутатора, либо можно провести следующее рассуждение. В первом выражении матричная экспонента действует на состояние $|\phi\rangle$. Во втором выражении матричная экспонента действует на состояние $\hat{a}_{p,\alpha} |\phi\rangle$. Тогда во втором выражении матричная экспонента действует на состояние, в котором на одну частицу меньше, чем в состоянии первого выражения. Тогда отличие результатов двух выражений будет лишь в множителе $e^{-i(\frac{p^2}{2m} - \mu)t}$. У нас получилось:

$$\hat{\Psi}(r, t) = \sum_{p, \alpha} \hat{a}_{p, \alpha} \psi_{p, \alpha}(r) e^{-i(\frac{p^2}{2m} - \mu)t} \quad (11.44)$$

Тогда функция Грина, зависящая в явном виде от времени, будет иметь вид:

$$\begin{aligned} G(r, t) &= -\frac{i}{V} \begin{cases} \sum_p e^{ipr - i(\varepsilon_p - \mu)t} \langle a_p a_p^\dagger \rangle, & t > 0 \\ -\sum_p e^{ipr - i(\varepsilon_p - \mu)t} \langle a_p^\dagger a_p \rangle, & t < 0 \end{cases} = \\ &= -\frac{i}{V} \sum_p e^{ipr - i(\varepsilon_p - \mu)t} \begin{cases} 1 - n_p \\ -n_p \end{cases} \quad (11.45) \\ n_p = \langle a_p^\dagger a_p \rangle &= \begin{cases} n, & p < p_F \\ 0, & p > p_F \end{cases} \end{aligned}$$

Функцию Грина в Фурье-представлении можно написать в виде:

$$\begin{aligned} G(\omega, p) &= -i \left(-\int_{-\infty}^0 e^{i\omega t - i(\varepsilon - \mu)t} dt \theta(p_F - p) + \right. \\ &\quad \left. + \theta(p - p_F) \int_0^{+\infty} e^{i\omega t - i(\varepsilon - \mu)t} dt \right) \quad (11.46) \end{aligned}$$

Получившиеся интегралы можно регуляризовать, добавив малую мнимую величину в показатель и устремив ее потом к нулю:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} e^{ist - \delta t} dt = i \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{s + i\delta} = \frac{i}{s + i0} \quad (11.47)$$

Таким образом, получим выражение для функции Грина невзаимодействующих электронов:

$$G(\omega, p) = \frac{\theta(p - p_F)}{\omega - \varepsilon + \mu + i0} + \frac{\theta(p_F - p)}{\omega - \varepsilon + \mu - i0} \quad (11.48)$$

Заметим, что это выражение совпадает с выражением 11.39, полученным ранее. Действительно, знак ω зависит от того, какой знак у выражения $(p_F - p)$, так как закон дисперсии имеет вид $\omega = \varepsilon_p - \mu = \frac{p^2}{2m} - \frac{p_F^2}{2m}$. Спектр возбуждений (квазичастиц) снова можно получить, приравняв к нулю знаменатель функции Грина, то есть из полюсов функции Грина.

11.3 Функция Грина фононов.

Мы уже немного говорили о фононах в главе 2 этого конспекта. Фононы - это квазичастицы, соответствующие колебаниям в системе взаимодействующих ионов. Они имеют акустические (1 продольная и 2 поперечные) и оптические моды колебаний. При рассмотрении длинноволновых колебаний кристалл можно рассматривать как непрерывную среду. Тогда можно говорить о задаче, используя приближение деформационного потенциала. Деформационный потенциал определяет энергию взаимодействия электронов с колебаниями решетки.

Запишем оператор вектора смещения:

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{R}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2mN}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}| \sqrt{\omega(\mathbf{k})}} [\hat{b}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R} - i\omega t} + \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R} + i\omega t}] \quad (11.49)$$

Запишем энергию взаимодействия электронов с фононами:

$$E = \int n(\mathbf{r}) \operatorname{div} \mathbf{u}(\mathbf{r}') k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \quad (11.50)$$

где поляризация пропорциональна смещению $\operatorname{div} \mathbf{P} \sim \operatorname{div} \mathbf{u}$, а взаимодействие $k(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ обычно берут точечным: $k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sim \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$.

Чтобы записать функцию Грина фононов, вначале запишем аналог Гейзенберговского оператора для фононного поля:

$$\phi(R, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k \sqrt{\frac{\omega_0(k)}{2}} [\hat{b}_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{R} - i\omega t} + \hat{b}_k^\dagger e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R} + i\omega t}] \quad (11.51)$$

Функция Грина в общем виде:

$$D(x, x') = -i \langle T \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(x') \rangle \quad (11.52)$$

После подстановки операторов:

$$D(R, t) = -\frac{i}{V} \sum_k \frac{\omega_0(k)}{2} \begin{cases} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R} - i\omega t}, & t > 0 \\ e^{i\mathbf{k}\mathbf{R} + i\omega t}, & t < 0 \end{cases} \quad (11.53)$$

После Фурье-преобразования получим выражение:

$$D(\omega, k) = \frac{\omega_0^2(k)}{\omega^2 - \omega_0^2(k) + i0} \quad (11.54)$$

11.4 Спектральное разложение для функций Грина.

Чтобы записать функцию Грина, воспользуемся соображением о том, что выражение $\langle n | \Psi^\dagger \Psi | m \rangle$ можно записать

через матричные элементы $\langle n|\Psi^\dagger|m\rangle$, $\langle n|\Psi|m\rangle$. Выделим из этих матричных элементов зависимость от времени, используя операторы эволюции, как мы уже делали раньше:

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{\Psi}_\alpha(t, r)|m\rangle &= e^{i\omega_{nm}t}\langle n|\hat{\Psi}_\alpha(r)|m\rangle, \\ \omega_{nm} &= E_n - E_m - \mu(N_n - N_m) \end{aligned} \quad (11.55)$$

Отметим, что матричный элемент будет не нулевым только тогда, когда $m = n + 1$, так как иначе состояния будут ортогональны. Тогда последнюю строчку можно переписать так:

$$\omega_{nm} = E_n(N) - E_m(N + 1) + \mu \quad (11.56)$$

Аналогично выделению зависимости от времени, мы можем вынести зависимость от координаты. Для этого будем использовать оператор трансляции:

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{\Psi}_\alpha(0)|m\rangle &= \langle n|e^{ipr}\hat{\Psi}_\alpha(r)e^{-ipr}|m\rangle = \\ &= e^{ik_{nm}r}\langle n|\hat{\Psi}_\alpha(r)|m\rangle, \\ k_{nm} &= p_n - p_m \end{aligned} \quad (11.57)$$

В итоге, с учетом обоих проделанных шагов (вынесения зависимости от времени и от координаты), матричный элемент будет иметь вид:

$$\langle n|\hat{\Psi}_\alpha(t, r)|m\rangle = e^{i(\omega_{nm}t - k_{nm}r)}\langle n|\hat{\Psi}_\alpha(0)|m\rangle \quad (11.58)$$

Теперь запишем функцию Грина через матричные элементы, используя свойство $(\langle n|\hat{\Psi}|m\rangle)^* = \langle m|\hat{\Psi}^\dagger|n\rangle$.

$$G(t, r) = \frac{1}{2}G_{\alpha\alpha} = -\frac{i}{2}\sum_m \langle 0|\hat{\Psi}_\alpha(x_1)|m\rangle \langle m|\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(x_2)|0\rangle \quad (11.59)$$

$$\begin{cases} G(t, r) = -\frac{i}{2} \sum_m |\langle 0 | \hat{\Psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2 e^{i(\omega_{0m}t + p_m r)}, & t > 0 \\ G(t, r) = \frac{i}{2} \sum_m |\langle m | \hat{\Psi}_\alpha(0) | 0 \rangle|^2 e^{i(\omega_{m0}t + p_m r)}, & t < 0 \end{cases} \quad (11.60)$$

$$\begin{aligned} \omega_{0m} &= E_0(N) - E_m(N+1) + \mu \\ \omega_{m0} &= E_m(N+1) - E_0(N) + \mu \end{aligned}$$

В последнем выражении учитывается, что $p_0 = 0$, то есть импульс равен нулю в основном состоянии. После выполнения преобразования Фурье получим:

$$\begin{aligned} G(\omega, t) = \frac{(2\pi)^3}{2} \sum_m \left[\frac{A_m \delta(p - p_m)}{[\omega + \mu + E_0(N) - E_m(N+1) + i0]^+} + \right. \\ \left. + \frac{B_m \delta(p + p_m)}{\omega + \mu + E_m(N-1) - E_0(N) - i0} \right] \end{aligned} \quad (11.61)$$

Добавление мнимых $\pm i0$ в знаменатель произошло по тем же самым причинам, что и раньше – в показатели экспонент надо добавить бесконечно малые поправки, чтобы обеспечить затухание на бесконечности. Также отметим полезный факт: при $\omega \rightarrow +\infty$, $G \rightarrow \frac{1}{\omega}$. Теперь рассмотрим поподробнее энергии, связанные с частотами ω_{m0}, ω_{0m} .

$$\begin{aligned} \varepsilon_m^+ &= E_m(N+1) - E_0(N) \\ \varepsilon_m^- &= E_0(N) - E_m(N-1) \end{aligned} \quad (11.62)$$

Строго говоря, спектры для N и $N+1$ частиц разные. Добавим и вычтем из первого выражения одну и ту же величину $E_0(N+1)$. То же самое сделаем со вторым выражением и величиной $E_0(N-1)$. Используем определение химпотенциала $E_0(N+1) - E_0(N) = \frac{\partial E_0}{\partial N} = \mu$. Получим:

$$\begin{aligned} \varepsilon_m^+ &= E_m(N+1) - E_0(N+1) + \mu > \mu \\ \varepsilon_m^- &= E_0(N-1) - E_m(N-1) + \mu < \mu \end{aligned} \quad (11.63)$$

Теперь скажем пару слов по поводу спектра. Как мы уже знаем, спектр частиц определяется выражением $G^{-1}(\varepsilon - \mu, p) = 0$. Если полюса функции Грина действительные, то это значит, что частицы невзаимодействующие, $E = \sum_i n_i \varepsilon_i$.

Если же частицы взаимодействующие, то у полюсов будет мнимая часть. А значит, появится и мнимая энергия, которая приведет к затуханию. Как следствие, моды не будут жить бесконечно долго. Чем больше затухание, тем меньше время жизни частиц. В некоторых задачах удаётся перейти от рассмотрения взаимодействующих частиц к рассмотрению невзаимодействующих частиц, с эффективными параметрами. Например, в теории Ферми-жидкости это скорость Ферми $\varepsilon = v_F^* |p - p_F|$ и эффективная масса m^* . Про Ферми-жидкость Ландау мы говорили в главе 3. В главе про уравнения БдЖ мы также осуществляли переход к диагонализированному гамильтониану невзаимодействующих квазичастиц. К сожалению, сделать переход к невзаимодействующим или почти невзаимодействующим частицам получается не в любой задаче.

Теперь посчитаем мнимую часть полученной функции Грина.

$$\text{Im}[G(\omega, p)] = \begin{cases} -4\pi^4 \sum_m A_m \delta(p - p_m) \delta(\omega + \mu - \varepsilon_m^+), & \omega > 0 \\ 4\pi^4 \sum_m B_m \delta(p + p_m) \delta(\omega + \mu - \varepsilon_m^-), & \omega < 0 \end{cases} \quad (11.64)$$

Плотность состояний, вообще говоря, выражается как $\sum_m \delta(E - E_m)$. Отсюда видно, что мнимая часть функции Грина связана с плотностью состояний. Однако, при установлении этой связи надо использовать не причинную функцию Грина, а запаздывающие или опережающие функции Грина, о которых мы поговорим чуть дальше.

Теперь скажем пару слов про теорию Ферми-жидкости,

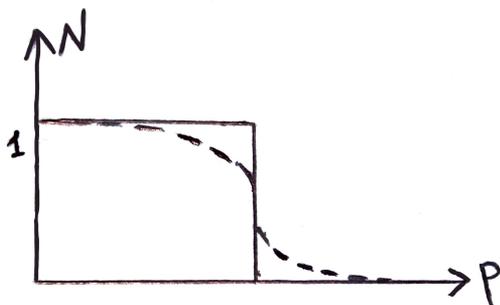


Рис. 11.2: Схематичная иллюстрация размытия ступенчатой зависимости при $T = 0$ из-за добавления взаимодействия между частицами. Сплошная линия: невзаимодействующие частицы, ступенчатая зависимость. Пунктирная линия: взаимодействие частиц приводит к появлению размытия, "хвостов" у графика, уменьшению скачка (теперь он < 1).

которую вспоминали выше. В ней осуществляется переход к линейному спектру невзаимодействующих частиц с эффективной скоростью Ферми. Запишем функцию Грина для такой системы.

$$G(\omega, p) = \frac{Z}{\omega - v_F^* |p - p_F| + i0 \operatorname{sign}(\omega)} + g(\omega, p), \quad (11.65)$$

где функция $g(\omega, p)$ не имеет особенностей. Такая функция Грина похожа на первый взгляд на функцию Грина невзаимодействующих частиц, которую мы находили. Отличие заключается в том, что теперь появился некий Z , который может содержать полюсы.

Рассмотрим задачу: вычислить скачок заполнения состояний под поверхностью Ферми и над поверхностью Ферми. Для невзаимодействующих частиц при $T = 0$ скачок должен быть равен 1, но мы имеем дело с взаимодействующими частицами. Взаимодействие будет размывать гра-

фик даже при нулевой температуре, см. Рис. 11.2. Скачок вычисляется по формуле:

$$N(p_F - q) - N(p_F + q)|_{q \rightarrow +0} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{Z}{\omega + v_F^* q - i0} - \frac{Z}{\omega - v_F^* q + i0} \right] \quad (11.66)$$

где $q = -|p - p_F|$. В зависимости от Z (конкретного характера взаимодействия) скачок будет разный. Наличие Z обеспечивает уменьшение ступеньки и появление "хвоста", о котором говорилось выше, и поэтому скачок будет < 1 . Если будет $T > 0$, то к картине основного состояния, которая наблюдается при $T = 0$, добавится размытие из-за возникновения квазичастиц, которые находятся над основным состоянием.

11.5 Функция Грина при конечной температуре.

Перейдем к рассмотрению функции Грина при конечной (ненулевой) температуре. Сразу отметим, что существует понятие "температурная функция Грина", которое несет другой смысл, а именно, это функция Грина в мацубаровском представлении. О температурной функции Грина мы поговорим позже. Будем говорить вначале, для определенности, про Ферми-частицы. Для Бозе-частиц формулы будут похожи с точностью до некоторых знаков.

Итак, чтобы говорить о функции Грина при конечной температуре, выпишем вначале состояние системы при этой температуре. Раньше мы записывали его как $\langle 0 | \dots | 0 \rangle$. При $T \neq 0$ состояние системы будет записываться как $\sum_n w_n \langle n | \dots | n \rangle$, где $w_n = e^{(\Omega - E'_n)/T}$, E'_n - собственное значение гамильтониана $H' = H - \mu N$, Ω - термодинамический потенциал (для

11.5 Функция Грина при конечной температуре 115

фиксированного числа частиц вместо Ω была бы свободная энергия).

Теперь рассмотрим полезные функции G^R, G^A . Для начала поговорим о G^R .

$$iG_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = \begin{cases} \langle \hat{\Psi}_\alpha(x_1) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(x_2) + \hat{\Psi}_\beta^\dagger(x_2) \hat{\Psi}_\alpha(x_1) \rangle, & t_1 > t_2 \\ 0, & t_1 < t_2 \end{cases} \quad (11.67)$$

В этом выражении под $\langle \dots \rangle$ подразумевается усреднение по распределению Гиббса. Как и раньше, выделяем зависимость от спина и переходим к разности координат.

$$G_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = \delta_{\alpha\beta} G^R(x), \quad x = x_1 - x_2 \quad (11.68)$$

Делаем преобразование Фурье:

$$G^R(\omega, p) = \int_0^{+\infty} dt \int d^3x e^{i\omega t - pr} G^R(t, r) \quad (11.69)$$

Записываем через матричные элементы:

$$iG^R = \frac{1}{2} \sum_{nm} w_n \left[e^{-i(\omega_{mn}t - k_{mn}r)} \langle n | \hat{\Psi}_\alpha(0) | m \rangle \langle m | \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(0) | n \rangle + e^{i(\omega_{mn}t - k_{mn}r)} \langle n | \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(0) | m \rangle \langle m | \hat{\Psi}_\alpha(0) | n \rangle \right] \quad (11.70)$$

где $\omega_{mn} = E'_m - E'_n$, $k_{mn} = p_m - p_n$. Заменяем $N_m = N_n + 1$ или $N_n = N_m + 1$ в зависимости от слагаемого. Получаем для $t > 0$:

$$iG^R = \frac{1}{2} \sum_{nm} w_n e^{-i(\omega_{mn}t - k_{mn}r)} A_{mn} (1 + e^{-\omega_{mn}/T}), \quad (11.71)$$

$$A_{mn} = |\langle n | \hat{\Psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2$$

После Фурье-преобразования:

$$G^R(\omega, p) = \frac{(2\pi)^3}{2} \sum_{mn} \frac{w_n A_{mn} \delta(p - k_{mn})}{\omega - \omega_{mn} + i0} (1 + e^{-\omega_{mn}/T}) \quad (11.72)$$

Такая функция называется запаздывающей (retarded) функцией Грина. Она аналитична в верхней полуплоскости, относящейся к ω . В нижней полуплоскости у нее есть полюса. Такая функция (и G^A) удобна в использовании потому, что в знаменателе теперь нет $\text{sign } \omega$, в отличие от обычной функции Грина. Также эти функции удовлетворяют соотношениям Крамерса-Кронига:

$$\text{Re}[G^R](\omega, p) = \frac{1}{\pi} \int_{+\infty}^{-\infty} \frac{\text{Im}[G^R](u, p)}{u - \omega} du \quad (11.73)$$

В справедливости последнего равенства можно убедиться, используя формулу Сохотского.

Для опережающей функции Грина G^A (advanced) можно написать все то же самое, что было написано для G^R .

$$iG_{\alpha\beta}^A(x_1, x_2) = \begin{cases} 0, & t_1 > t_2 \\ -\langle \hat{\Psi}_\alpha(x_1) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(x_2) + \hat{\Psi}_\beta^\dagger(x_2) \hat{\Psi}_\alpha(x_1) \rangle, & t_1 < t_2 \end{cases} \quad (11.74)$$

G^A и G^R связаны соотношением:

$$G^A(\omega^*) = (G^R(\omega))^* \quad (11.75)$$

Запишем еще одно полезное выражение:

$$\begin{cases} G^R \\ G^A \end{cases} = \text{Re}G \pm i \text{ctg}\left(\frac{\omega}{2T}\right) \text{Im}G$$

$$G = \begin{cases} G^R, \omega > 0 \\ G^A, \omega < 0 \end{cases} \quad (11.76)$$

$$G^{R,A} = \frac{1}{\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu \pm i0}$$

Мы в основном работаем с Ферми-частицами, и поэтому до этого, как уже отмечалось, все формулы были записаны для них. Но в сверхпроводимости мы также имеем дело с бозонами (фононами), поэтому нам может пригодиться и функция Грина для них. Запишем запаздывающую функцию Грина для Бозе-частиц:

$$iG_{\alpha\beta}^R(x_1, x_2) = \begin{cases} \langle \hat{\Psi}_\alpha(x_1) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(x_2) - \hat{\Psi}_\beta^\dagger(x_2) \hat{\Psi}_\alpha(x_1) \rangle, & t_1 > t_2 \\ 0, & t_1 < t_2 \end{cases} \quad (11.77)$$

11.6 Температурные функции Грина.

Как уже говорилось в предыдущей главе, температурные функции Грина это не то же самое, что функции Грина при конечной температуре. Когда мы говорим о температурных функциях Грина, мы осуществляем переход к мнимому времени $it \rightarrow \tau$. Тогда зависимость полевых операторов от времени будет выглядеть так:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_\alpha^M(\tau, r) &= e^{\tau H'} \hat{\Psi}_\alpha(r) e^{-\tau H'} \\ \hat{\Psi}_\alpha^{\dagger M}(\tau, r) &= e^{\tau H'} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(r) e^{-\tau H'} \end{aligned} \quad (11.78)$$

Заметим, что $\hat{\Psi}^M \neq (\hat{\Psi}^M)^\dagger$. Функция Грина в Мацубаровском представлении:

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}^M(\tau_1, r_1, \tau_2, r_2) &= -\langle T_\tau \hat{\Psi}_\alpha^M(\tau_1, r_1) \hat{\Psi}_\beta^M(\tau_2, r_2) \rangle \\ G_{\alpha\beta}^M &= -Tr \left[\hat{w} T_\tau \hat{\Psi}_\alpha^M(\tau_1, r_1) \hat{\Psi}_\beta^M(\tau_2, r_2) \right], \\ \hat{w} &= e^{(\Omega - \hat{H}')/T}, \quad \tau = \tau_1 - \tau_2 \end{aligned} \quad (11.79)$$

Запишем функцию Грина при различных знаках времени. В выражении одновременно учитываются случаи для фермионов и для бозонов.

$$\begin{aligned} G &= \pm \frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} Tr \left[e^{-H'/T} e^{\tau_2 H'} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(r_2) e^{(-\tau_2 + \tau_1) H'} \hat{\Psi}_\alpha(r_1) e^{-\tau_1 H'} \right], \quad \tau < 0, \\ G &= -\frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} Tr \left[e^{-H'(\frac{1}{T} - \tau)} \hat{\Psi}_\alpha(r_1) e^{-\tau H'} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(r_2) \right] = \\ &= -\frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} Tr \left[e^{-H'\tau} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(r_2) e^{-H'(\frac{1}{T} - \tau)} \hat{\Psi}_\alpha(r_1) \right], \quad \tau > 0 \end{aligned} \quad (11.80)$$

Верхний знак в \pm соответствует фермионам, нижний - бозонам. Множитель $1/2$, записанный в скобках, появляется в случае фермионов.

Обратим внимание на интересное свойство, которое выполняется при $-\frac{1}{T} \leq \tau \leq \frac{1}{T}$:

$$\tau < 0: \quad G(\tau) = \mp G\left(\tau + \frac{1}{T}\right) \quad (11.81)$$

Из этого свойства следует:

$$\begin{cases} \tau = -\frac{1}{T}: & G(-\frac{1}{T}) = \mp G(0) \\ \tau = 0: & G(0) = \mp G(\frac{1}{T}) \end{cases} \rightarrow G(\frac{1}{T}) = G(-\frac{1}{T}) \quad (11.82)$$

При помощи этого свойства можно ввести отрицательные температуры. Тогда можно написать по симметричным пределам выражение:

$$G(\tau, r) = T \sum_{s=-\infty}^{+\infty} e^{i(pr - \omega_s \tau)} G(\omega_s, p) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \quad (11.83)$$

Причем мадубаровские частоты можно записать так:

$$\begin{aligned} \text{Ферми-системы: } \omega_s &= (2s + 1)\pi T \\ \text{Бозе-системы: } \omega_s &= 2s\pi T \end{aligned} \quad (11.84)$$

Такое выражение получается потому, что из-за свойства 11.82 пропадают либо четные, либо нечетные частоты из $\frac{2\pi}{T}n = \pi nT$. Функция Грина для идеального Ферми-газа:

$$\begin{aligned} G(\omega_s, p) &= G^R(i\omega_s, p), \quad \omega_s > 0 \\ G(\omega_s, p) &= \frac{1}{i\omega_s - \frac{p^2}{2m} + \mu} \end{aligned} \quad (11.85)$$

Плотность частиц:

$$\frac{N}{V} = \pm T \sum_{s=-\infty}^{+\infty} \int G(\omega_s, p) e^{-i\omega_s \tau} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \Big|_{\tau \rightarrow -0} \quad (11.86)$$

Последняя формула определяет N как функцию μ, T, V . Из нее можно получить $\Omega(\mu, T, V)$ интегрированием равенства $N = -\partial\Omega/\partial\mu$.

Плотность тока:

$$\mathbf{j} = \frac{e}{m} \lim_{t' \rightarrow t+0} (\nabla_{r'} - \nabla_r) G_{\alpha\alpha}(t, t', r, r')(r_2) - \frac{Ne^2}{m} \mathbf{A} \quad (11.87)$$

Первое слагаемое тока - это парамагнитный ток. В сверхпроводнике при $T = 0$ этот член равен нулю. Второе слагаемое тока - это диамагнитный ток. Оно связано с Первым уравнением Лондонов: $\mathbf{E} = \frac{m}{ne^2} \frac{d}{dt} \mathbf{j}$, $\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$.

Напоследок немного поговорим о плотности состояний. Как мы уже упоминали, она связана с мнимой частью функции Грина. Выразим эти соображения в формульном виде.

$$\begin{cases} \nu(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^R(r_1, r_2, \omega = E) \\ G^R = \sum_n \frac{|\psi_n(r)|^2}{\omega + i0 - \varepsilon'_n} \end{cases} \rightarrow \nu(E) = \sum_n |\psi_n(r)|^2 \delta(E - \varepsilon_n) \quad (11.88)$$

Выведенная величина называется локальной плотностью состояний. Плотность состояний - это важная величина хотя бы потому, что ее можно измерить экспериментально. В туннельных SIS или SIN контактах легко измеряют кондактанс, из которого можно восстановить плотность состояний.

Глава 12

Уравнение Горькова. Связанное состояние на магнитной примеси

Теперь применим описанные выше функции Грина к сверхпроводящим системам. Уравнение на функции Грина для сверхпроводящих систем называется уравнением Горькова. В этом разделе мы выведем само уравнение и применим его к нахождению энергии связанного состояния на магнитной примеси в сверхпроводнике. (Выше мы обсуждали теорему Андерсона и тогда говорили, что магнитные примеси, в отличие от немагнитных, подавляют обыкновенную сверхпроводимость. Такое подавление тесно связано с наличием связанных состояний на этих примесях). Исследование состояний на магнитной примеси стало популярным в последние годы благодаря появившейся экспериментальной технике по высаживанию одиночных магнитных примесей на поверхность сверхпроводника. Это позволяет реализовывать искусственные периодические системы, в которых, при гибридизации упомянутых связанных состояний, возникают целые зоны. В присутствии спин-

орбитального взаимодействия или нарушения симметрии по отношению к инверсии может возникать топологическая сверхпроводимость, майорановские фермионы и много другой интересной и актуальной физики.

12.1 Уравнение Горькова

Для начала выведем уравнение Горькова, что по сути будет повторять вывод 11.31-11.38. Важно отметить, что рассматриваемый нами в этом разделе гамильтониан

$$\hat{H} = \int d^3r \left[\Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 - \mu + U_{\alpha}(\mathbf{r}) \right) \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) + \right. \\ \left. + (\Delta(r) \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \Psi_{\downarrow}^{\dagger} + \Delta^*(r) \Psi_{\downarrow} \Psi_{\uparrow}) \right] \quad (12.1)$$

содержит спин-зависимый потенциал магнитной примеси $U_{\alpha}(\mathbf{r})$, имеющий вид $\begin{pmatrix} U_{\uparrow} & 0 \\ 0 & U_{\downarrow} \end{pmatrix}$ в спиновом пространстве, так как мы можем направить ось z вдоль спина рассматриваемой примеси. Подчеркнем, что мы имеем дело с гейзенберговскими полевыми операторами. Также у нас многочастичная задача, поэтому в гамильтониане присутствует слагаемое $-\mu N$.

Поскольку в гамильтониане есть не только слагаемые вида $\Psi^{\dagger} \Psi$, но и вида $\Psi \Psi$, то стоит ожидать, что нам будут важны при выводе не только обычные средние $\langle \Psi^{\dagger} \Psi \rangle$, но и аномальные средние $\langle \Psi \Psi \rangle$. Поэтому понадобится ввести четыре функции Грина, а именно две обычные и две аномальные:

$$\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2) &= -i\langle T\Psi_\alpha(r_1, t_1)\Psi_\beta^\dagger(r_2, t_2)\rangle \\
F_{\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2) &= -i\langle T\Psi_\alpha(r_1, t_1)\Psi_\beta(r_2, t_2)\rangle \\
\tilde{F}_{\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2) &= -i\langle T\Psi_\alpha^\dagger(r_1, t_1)\Psi_\beta^\dagger(r_2, t_2)\rangle \\
\tilde{G}_{\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2) &= -i\langle T\Psi_\alpha^\dagger(r_1, t_1)\Psi_\beta(r_2, t_2)\rangle
\end{aligned} \tag{12.2}$$

Сразу укажем физический смысл этих функций Грина. Как мы уже знаем из прошлой главы, $G_{\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2)$ - пропагатор - амплитуда вероятности найти электрон в точке r_2, t_2 , если он был в точке r_1, t_1 . $\tilde{G}_{\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2)$ - то же самое, но для дырок, а не для электронов. $F_{\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2)$, $\tilde{F}_{\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2)$ - аномальные средние - не являются амплитудой вероятности чего-либо. Они отвечают за парные корреляции.

Для большего удобства написания выкладок перейдем к матричному представлению.

$$\check{\Psi} = \begin{pmatrix} \Psi_\uparrow \\ \Psi_\downarrow \\ \Psi_\uparrow^\dagger \\ \Psi_\downarrow^\dagger \end{pmatrix}, \quad \check{G}(r_1, t_1, r_2, t_2) = -i\langle T\check{\Psi}(r_1, t_1)\check{\Psi}^\dagger(r_2, t_2)\rangle \tag{12.3}$$

В такой записи матричная функция Грина включает все четыре упомянутые выше функции Грина. Как и в прошлой главе, дифференцируем функцию Грина по первому временному аргументу и, используя выражение для коммутатора $[\hat{H}, \Psi]$, получаем:

$$\frac{dG_{\alpha\beta}}{dt_1} = -i\langle T\frac{d\Psi_\alpha}{dt_1}\Psi_\beta^\dagger\rangle - i\delta_{\alpha\beta}\delta(r_1 - r_2)\delta(t_1 - t_2) \tag{12.4}$$

Напомним, что дельта-функции возникают из-за скачка (разрыва) при $t_1 = t_2$.

$$\begin{aligned}
 i \frac{d\Psi_\alpha}{dt} &= -[\hat{H}, \Psi_\alpha] = -\left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\Psi_\alpha + U_\alpha(r)\Psi_\alpha + \Delta(r)\Psi_{-\alpha}^\dagger \operatorname{sign}(\alpha) \\
 i \frac{d\Psi_\alpha^\dagger}{dt} &= -[\hat{H}, \Psi_\alpha^\dagger] = \left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\Psi_\alpha^\dagger - U_\alpha(r)\Psi_\alpha^\dagger - \Delta^*(r)\Psi_{-\alpha} \operatorname{sign}(\alpha)
 \end{aligned}$$

Подставим производные полевых операторов в дифференциальное уравнение на функцию Грина. Свернем комбинации полевых операторов в введенные функции Грина, получим:

$$\begin{aligned}
 [i \frac{d}{dt_1} + \frac{\nabla_{r_1}^2}{2m} + \mu - U_\alpha(r_1)]G_{\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2) - \Delta(r_1) \operatorname{sign}(\alpha)\tilde{F}_{-\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2) &= \delta_{\alpha\beta}\delta_{r_1, r_2}\delta_{t_1, t_2} \\
 [i \frac{d}{dt_1} + \frac{\nabla_{r_1}^2}{2m} + \mu - U_\alpha(r_1)]F_{\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2) - \Delta(r_1) \operatorname{sign}(\alpha)\tilde{G}_{-\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2) &= 0 \\
 [i \frac{d}{dt_1} - \frac{\nabla_{r_1}^2}{2m} - \mu + U_\alpha(r_1)]\tilde{F}_{\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2) + \Delta^*(r_1) \operatorname{sign}(\alpha)G_{-\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2) &= 0 \\
 [i \frac{d}{dt_1} - \frac{\nabla_{r_1}^2}{2m} - \mu + U_\alpha(r_1)]\tilde{G}_{\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2) + \Delta^*(r_1) \operatorname{sign}(\alpha)F_{-\alpha\beta}(r_1, t_1, r_2, t_2) &= \delta_{\alpha\beta}\delta_{r_1, r_2}\delta_{t_1, t_2}
 \end{aligned} \tag{12.5}$$

Запишем эти уравнения через введенную нами матричную функцию Грина \check{G} :

$$\check{G} = \begin{pmatrix} \hat{G} & \hat{F} \\ \hat{F} & \hat{G} \end{pmatrix} \tag{12.6}$$

где $\hat{G}, \hat{F}, \hat{F}, \hat{G}$ определяются следующим образом:

$$\hat{G} = -i \begin{pmatrix} \langle \text{T} \Psi_\uparrow \Psi_\uparrow^\dagger \rangle & \langle \text{T} \Psi_\uparrow \Psi_\downarrow^\dagger \rangle \\ \langle \text{T} \Psi_\downarrow \Psi_\uparrow^\dagger \rangle & \langle \text{T} \Psi_\downarrow \Psi_\downarrow^\dagger \rangle \end{pmatrix} \tag{12.7}$$

$$\hat{F} = -i \begin{pmatrix} \langle T\Psi_{\uparrow}\Psi_{\uparrow} \rangle & \langle T\Psi_{\uparrow}\Psi_{\downarrow} \rangle \\ \langle T\Psi_{\downarrow}\Psi_{\uparrow} \rangle & \langle T\Psi_{\downarrow}\Psi_{\downarrow} \rangle \end{pmatrix} \quad (12.8)$$

$$\hat{\tilde{F}} = -i \begin{pmatrix} \langle T\Psi_{\uparrow}^{\dagger}\Psi_{\uparrow}^{\dagger} \rangle & \langle T\Psi_{\uparrow}^{\dagger}\Psi_{\downarrow}^{\dagger} \rangle \\ \langle T\Psi_{\downarrow}^{\dagger}\Psi_{\uparrow}^{\dagger} \rangle & \langle T\Psi_{\downarrow}^{\dagger}\Psi_{\downarrow}^{\dagger} \rangle \end{pmatrix} \quad (12.9)$$

$$\hat{\tilde{G}} = -i \begin{pmatrix} \langle T\Psi_{\uparrow}^{\dagger}\Psi_{\uparrow} \rangle & \langle T\Psi_{\uparrow}^{\dagger}\Psi_{\downarrow} \rangle \\ \langle T\Psi_{\downarrow}^{\dagger}\Psi_{\uparrow} \rangle & \langle T\Psi_{\downarrow}^{\dagger}\Psi_{\downarrow} \rangle \end{pmatrix} \quad (12.10)$$

Часто говорят, что $\hat{\tilde{G}}$ это матрица в прямом произведении спинового и частично-дырочного пространств. Частично-дырочное пространство часто еще называют пространством Намбу. Договоримся обозначать матрицы Паули в спиновом пространстве как σ , а в частично-дырочном как τ . Введем следующие обозначения:

$$\hat{U}(r) = \begin{pmatrix} U_{\uparrow}(r) & 0 \\ 0 & U_{\downarrow}(r) \end{pmatrix} \quad (12.11)$$

$$\hat{H}_0 = -\left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) + \hat{U}(r) \quad (12.12)$$

$$\begin{cases} [i\frac{d}{dt_1} - \hat{H}_0(r_1)]\hat{G} - \Delta(r_1)i\sigma_y\hat{F} = \delta(r_1 - r_2)\delta(t_1 - t_2) \\ [i\frac{d}{dt_1} - \hat{H}_0(r_1)]\hat{F} - \Delta(r_1)i\sigma_y\hat{G} = 0 \\ [i\frac{d}{dt_1} + \hat{H}_0(r_1)]\hat{F} + \Delta^*(r_1)i\sigma_y\hat{G} = 0 \\ [i\frac{d}{dt_1} + \hat{H}_0(r_1)]\hat{G} + \Delta^*(r_1)i\sigma_y\hat{F} = \delta(r_1 - r_2)\delta(t_1 - t_2) \end{cases} \quad (12.13)$$

Что можно переписать с помощью матриц Паули более компактным способом:

$$\left[i \frac{d}{dt_1} - \hat{H}_0(r_1)\tau_z - \Delta(r_1)i\sigma_y\tau_+ + \Delta^*(r_1)i\sigma_y\tau_- \right] \check{G} = \delta(r_1 - r_2)\delta(t_1 - t_2) \quad (12.14)$$

где $\tau_{\pm} = (\tau_x \pm i\tau_y)/2$. Это уже почти финальный вид уравнения Горькова, но для удобства работы с ним "подвернем" функцию Грина, чтобы уравнение стало диагональным в спиновом пространстве.

$$\check{G}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i\sigma_y \end{pmatrix} \check{G} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i\sigma_y \end{pmatrix} \quad (12.15)$$

Тогда уравнение Горькова примет вид:

$$\left[i \frac{d}{dt_1} \tau_z + \left(\frac{\nabla_{r_1}^2}{2m} + \mu - U_0(r_1) \right) - U_z(r_1)\sigma_z\tau_z + \Delta(r_1)\tau_+ - \Delta^*(r_1)\tau_- \right] \check{G}' = \delta(r_1 - r_2)\delta(t_1 - t_2) \quad (12.16)$$

Здесь мы представили потенциал примеси в виде $\hat{U}(r) = U_0(r)\sigma_0 + U_z(r)\sigma_z$. Это и есть финальный вид уравнения Горькова. Далее мы всегда будем работать с \check{G}' и опускать штрих. Сначала рассмотрим однородный сверхпроводник (без примеси, $\hat{U}(r) = 0$) и найдем для него функцию Грина $\check{G}_0(r_1 - r_2, t_1 - t_2)$. Для этого сделаем преобразование Фурье.

$$\check{G}_0(r_1 - r_2, t_1 - t_2) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \check{G}_0(\mathbf{p}, \varepsilon) e^{i\mathbf{p}(r_1 - r_2) - i\varepsilon(t_1 - t_2)} \quad (12.17)$$

Уравнение Горькова примет вид:

12.2 Связанное состояние на магнитной примеси 27

$$[\varepsilon\tau_z - (\frac{p^2}{2m} - \mu) + \Delta\tau_+ - \Delta^*\tau_-]\check{G}_0 = 1 \quad (12.18)$$

У нас получилось просто матричное уравнение 2×2 в частично-дырочном пространстве, без координатной зависимости. Для его решения надо просто обратить эту матрицу. Как всегда, введем энергию квазичастиц в нормальном металле, отсчитанную от химпотенциала, $\xi = \frac{p^2}{2m} - \mu$, и тогда исконая функция Грина однородного сверхпроводника \check{G}_0 примет вид:

$$\check{G}_0(\mathbf{p}, \varepsilon) = \frac{\varepsilon\tau_z - \xi + \Delta\tau_+ - \Delta^*\tau_-}{\varepsilon^2 - (\xi^2 + |\Delta|^2)} \quad (12.19)$$

Используя такую функцию Грина, можно найти, например, привычную нам плотность состояний сверхпроводника с целью, перейдя к запаздывающей функции Грина $\varepsilon \rightarrow \varepsilon + i\delta$ и используя знакомую нам формулу $N = -\frac{1}{\pi}\text{Im}G^R$.

12.2 Связанное состояние на магнитной примеси

Теперь применим уравнение Горькова для нахождения энергии связанного состояния на магнитной примеси. Для магнитной примеси, расположенной в начале координат, запишем: $U_0 = 0$, $U_z(r) = -V\delta(r)$. Уравнение Горькова имеет вид:

$$\hat{H}\check{G} = \delta_{r_1, r_2} \quad (12.20)$$

$$\hat{H} = \left[\varepsilon \tau_z + \left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) + \Delta \tau_+ - \Delta^* \tau_- \right] + \quad (12.21)$$

$$+ V \sigma_z \tau_z \delta(r) = \hat{H}_0(r) + \hat{V}(r)$$

Излагаемая далее техника называется Т-матричный подход.

$$\hat{H}_{r_1}^0 \check{G}_{r_1, r_2}^0 = \delta_{r_1, r_2} \quad (12.22)$$

$$(\hat{H}_{r_1}^0 + \hat{V}_{r_1}) \check{G}_{r_1, r_2} = \delta_{r_1, r_2} \quad (12.23)$$

Ищем решение для \check{G} через Т-матрицу:

$$\check{G}_{r_1, r_2} = \check{G}_{r_1, r_2}^0 + \check{G}_{r_1, r'}^0 \check{T}_{r', r''} \check{G}_{r'', r_2}^0 \quad (12.24)$$

По повторяющимся индексам подразумевается интегрирование, иными словами, эта запись равносильна:

$$\check{G}(r_1, r_2) = \check{G}^0(r_1 - r_2) + \int \check{G}^0(r_1 - r') \check{T}(r', r'') \check{G}^0(r'' - r_2) d^3 r' d^3 r'' \quad (12.25)$$

Подставляя в этом виде \check{G} в уравнение Горькова, получаем:

$$\hat{H}_{r_1}^0 \check{G}_{r_1, r_2}^0 + \hat{H}_{r_1}^0 \check{G}_{r_1, r'}^0 \check{T}_{r', r''} \check{G}_{r'', r_2}^0 + \hat{V}_{r_1} \check{G}_{r_1, r_2}^0 + \quad (12.26)$$

$$+ \hat{V}_{r_1} \check{G}_{r_1, r'}^0 \check{T}_{r', r''} \check{G}_{r'', r_2}^0 = \delta_{r_1, r_2}$$

Воспользуемся 12.22, сократив часть уравнения без приме-
 си

12.2 Связанное состояние на магнитной примеси 29

$$\hat{H}_{r_1}^0 \check{G}_{r_1, r'}^0 \check{T}_{r', r''} \check{G}_{r'', r_2}^0 + \hat{V}_{r_1} \check{G}_{r_1, r_2}^0 + \hat{V}_{r_1} \check{G}_{r_1, r'}^0 \check{T}_{r', r''} \check{G}_{r'', r_2}^0 = 0 \quad (12.27)$$

Снова воспользуемся 12.22, чтобы упростить первое слагаемое

$$\check{T}_{r_1, r''} \check{G}_{r'', r_2}^0 + \hat{V}_{r_1} \check{G}_{r_1, r_2}^0 + \hat{V}_{r_1} \check{G}_{r_1, r'}^0 \check{T}_{r', r''} \check{G}_{r'', r_2}^0 = 0 \quad (12.28)$$

Умножим уравнение на $\hat{H}_{r_2}^0$ справа и снова воспользуемся 12.22:

$$\check{T}_{r_1, r_2} + \hat{V}_{r_1} \delta_{r_1, r_2} + \hat{V}_{r_1} \check{G}_{0r_1, r'} \check{T}_{r', r_2} = 0 \quad (12.29)$$

Теперь нам надо угадать вид \check{T}_{r_1, r_2} . Предположим, что мы воспользовались теорией возмущений. (Хотя мы этого не делаем - потенциал V не предполагается малым!) Тогда первым же слагаемым у нас получится слагаемое вида $V_{r_1} \delta(r_1 - r_2)$. Предположим, что T -матрица пропорциональна этой дельта-функции: $\check{T}_{r_1, r_2} = \check{T}(r_1) \delta_{r_1, r_2}$. Помним, что $\check{T}(r_1)$ все равно остается матрицей в частично-дырочном и спиновом пространствах! Так же вспомним, что примесь у нас точечная: $\hat{V}_{r_1} = \hat{V} \delta(r_1)$, тогда $\check{T}_{r_1, r_2} = \check{T}(r_1) \delta_{r_1, r_2} = \check{T} \delta_{r_1, 0} \delta_{r_1, r_2}$, а матрица в частично-дырочном и спиновом пространствах \check{T} уже не зависит от координат и подчиняется уравнению:

$$\check{T} + \hat{V} + \hat{V} \check{G}^0(r_1 = r_2 = 0) \check{T} = 0 \quad (12.30)$$

$$\check{T} = - \left(1 + \hat{V} \check{G}^0(0) \right)^{-1} \hat{V} \quad (12.31)$$

Теперь мы можем написать полное решение для \check{G}

$$\check{G}(r_1, r_2) = \check{G}^0(r_1 - r_2) - \int G^0(r_1 - r') \left(1 + \hat{V}\check{G}^0(0)\right)^{-1} \hat{V}G^0(r' - r_2) dr' \quad (12.32)$$

Давайте поинтересуемся энергиями связанного состояния (связанные состояния, очевидно, должны быть в щели $|\varepsilon| < |\Delta|$). Как мы выяснили в предыдущей главе, любое состояние приводит к полюсу функции Грина. В данном случае полюс может иметь только скобка

$$\left(1 + \hat{V}\check{G}^0(0)\right)^{-1} \quad (12.33)$$

Когда детерминант матрицы обратится в ноль, то обратная матрица будет иметь полюс. Тогда условие на энергию связанного состояния принимает вид:

$$\det \left(1 + \hat{V}\check{G}^0(0)\right) = 0 \quad (12.34)$$

Нам надо найти $\check{G}^0(0)$:

$$\check{G}^0(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \check{G}^0(\mathbf{p}) = N_F \int d\xi \check{G}^0(\xi) \quad (12.35)$$

Напомним:

$$\check{G}_0 = \frac{\varepsilon\tau_z - \xi + \Delta\tau_+ - \Delta^*\tau_-}{\varepsilon^2 - (\xi^2 + |\Delta|^2)} \quad (12.36)$$

Следующий интеграл легко берется (мы оставили только четную по ξ часть, так как нечетная часть занулится):

$$\int \frac{d\xi}{\varepsilon^2 - (\xi^2 + |\Delta|^2)} = \frac{-\pi}{\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}} \quad (12.37)$$

12.2 Связанное состояние на магнитной примеси 31

$$\check{G}^0(0) = \frac{-N_F \pi}{\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}} [\varepsilon \tau_z + \Delta \tau_+ - \Delta^* \tau_-] \quad (12.38)$$

Детерминант достаточно брать по частично-дырочному пространству, так как в спиновом все диагонально. Далее так и делаем, а $\sigma = \pm 1$ соответствует рассматриваемому спину.

$$\left(1 + \hat{V} \check{G}^0(0)\right) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{V \sigma N_F \pi \varepsilon}{\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}} & -\frac{V \sigma N_F \pi \Delta}{\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}} \\ -\frac{V \sigma N_F \pi \Delta^*}{\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}} & 1 - \frac{V \sigma N_F \pi \varepsilon}{\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}} \end{pmatrix} \quad (12.39)$$

$$\det \left(1 + \hat{V} \check{G}^0(0)\right) = 1 - V^2 N_F^2 \pi^2 - \frac{2V \sigma N_F \pi \varepsilon}{\sqrt{|\Delta|^2 - \varepsilon^2}} = 0 \quad (12.40)$$

Это уравнение легко решается, и мы получаем:

$$\varepsilon = \pm |\Delta| \frac{1 - V^2 N_F^2 \pi^2}{1 + V^2 N_F^2 \pi^2} \quad (12.41)$$

Для каждого спина мы получили два решения, однако истинно только одно из них, а второе возникло при возведении в квадрат в процессе решения. Итак, мы получили уровни связанного состояния, возникшие из-за наличия единичной примеси, которые называются уровнями Ю-Шибы-Русинова (YSR):

$$\varepsilon_\sigma = \sigma |\Delta| \frac{1 - V^2 N_F^2 \pi^2}{1 + V^2 N_F^2 \pi^2} \quad (12.42)$$

Проанализируем полученное решение. Во-первых, энергия связанного состояния всегда под щелью, как и должно быть для связанного состояния. При нулевой силе примеси связанное состояние "поджимается" к краям ветвей спектра (под когерентный пик), и мы получаем непрерывный спектр (иными словами, без примеси нет связанного состояния). Также отметим, что всегда есть два симметричных решения для двух спинов соответственно.

Литература

- [1] <https://chair.itp.ac.ru/biblio/lectures/phil/LecturesPhonons.pdf>
- [2] Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. "Методы квантовой теории поля в статистической физике"
- [3] П. Де Женн. "Сверхпроводимость металлов и сплавов"; раздел "Немагнитные сплавы. Теорема Андерсона"
- [4] Андреев А. Ф. "Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. — М., 1964. Т. 46. С. 1823"
- [5] G. E. Blonder, M. Tinkham, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **25**, 4515 (1982).
- [6] С. М. Рытов, Ю. А. Кравцов, В. И. Татарский, "Введение в статистическую радиофизику" , часть 2 (Случайные поля).