Р-99

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Н.Н.БОГОЛЮБОВ

О НОВОМ МЕТОДЕ В ТЕОРИИ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

III

ЖЭТФ. -1958. -Т.34, вып. 1. - с. 73-79

1 9 5 7 год

За последнее время большие успехи были достигнуты в решении задач статистической физики методом суммирования важнейших графов.

В настоящей статье мы покажем, что в теории сверхпроводимости этим методом также можно получить те результаты, которые были найдены в предыдущих работах (I,2) с помощью канонического преобразования и принципа компенсации графов с "опасным" энергетическим знаменателем.

Как было показано В.В.Толмачевым и С.В.Тябликовым(2), вместо гамильтониана Фрелиха можно рассматривать гамильтониан Бардина, так как оба они по существу совершенно эквивалентны для учета влияния электронно-фононного взаимодействия на динамику электронов вблизи поверхности Ферми. При этом иметь дело с гамильтонианом Бардина значительно проще.

Поэтому для достижения большей наглядности и установления связи с идеями работы Бардина, Купера и Шриффера(3) мы будем исходить из гамильтониана Бардина:

$$H_B = \sum_{k,s} E(k)\, a^+_{ks} a_{ks} -$$

$$- \frac{J}{V} \sum_{(k_1,k_2,k'_1,k'_2)} a^+_{k_1,-\frac{1}{2}}\, a^+_{k_2,\frac{1}{2}}\, a_{k'_2,\frac{1}{2}}\, a_{k'_1,-\frac{1}{2}}\, \theta(k_1)\theta(k_2)\theta(k'_1)\theta(k'_2)\Delta(k_1+k_2-k'_1-k'_2)$$

где

$$\theta(k) = \begin{cases} 1, & E(k_F)-\omega < E(k) < E(k_F)+\omega \\ 0, & |E(k)-E(k_F)| > \omega \end{cases}$$

$$\Delta(k) = \begin{cases} 1, & k = 0 \\ 0, & k \neq 0 \end{cases}$$

и где $E(k)$ – радиально симметричная функция, представляющая энергию электрона с импульсом K,

$\mathcal{Y}$ и ω – параметры Бардина.

В модели Фрелиха мы должны положить (2):

$$\mathcal{Y} = g^2, \quad \omega = \frac{\tilde{\omega}}{2}$$

Величину N полного числа электронов будем учитывать с помощью химического потенциала λ, для чего добавим к H_B член $-\lambda N$. Таким образом получим гамильтониан

$$H = H_0 + H_{int}$$

$$H_0 = \sum_{k,s} \{E(k) - \lambda\} \overset{+}{a}_{ks} a_{ks}$$

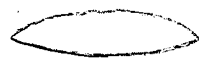
$$H_{int} =$$

(I)

$$= -\frac{\mathcal{Y}}{V} \sum \overset{+}{a}_{k_1,-\frac{1}{2}} \overset{+}{a}_{k_2,\frac{1}{2}} a_{k_2',\frac{1}{2}} a_{k_1',-\frac{1}{2}} \theta(k_1)\theta(k_2)\theta(k_1')\theta(k_2') \Delta(k_1 + k_2 - k_1' - k_2')$$

для которого и будем рассматривать вопрос о суммировании важнейших графов. Так как взаимодействие эффективно лишь в малой окрестности сферы Ферми и только между частицами (электронами или дырками) с противоположно направленными спинами видим, что особо важную роль будут играть графы типа, изображенного на фиг.I. Графы эти построены из "неразложимого комплекса" (см.фиг.2).

Фиг.I



Фиг.2

состоящего из пары частиц с импульсами $\pm k$ и спинами $\pm \frac{1}{2}$.

Для суммирования их воспользуемся методом приближенного вторичного квантования, т.е. построим упрощенный гамильтониан, у которого будут графы только того класса, который мы желаем просуммировать и притом с тем же вкладом, что и у настоящего гамильтониана.

Так как в рассматриваемых нами графах комплексы из пары частиц $(\pm k, \pm \frac{1}{2})$ не разрываются естественно сопоставить им квантовые амплитуды b_k, b_k^+ с перестановочными соотношениями:

$$[b_k, b_{k'}] = 0, \quad [b_k^+, b_{k'}^+] = 0, \quad [b_k^+, b_{k'}] = 0; \quad k \neq k' \tag{2}$$

Далее, так как не существует несколько пар с одним и тем же значением $\vec{k}$, мы должны принять

$$b_k^2 = 0, \quad b_k^{+2} = 0, \quad b_k b_k^+ + b_k^+ b_k = 1 \tag{3}$$

Заметим еще, что собственная энергия комплекса будет

$$2\{E(k) - \lambda\} b_k^+ b_k$$

и что матричный элемент гамильтониана (I) для перехода будет пропорционален $-\frac{g}{V}$.

Из этих соображений получаем упрощенный гамильтониан вида

$$H = H_0 + H_{int}$$

$$H_0 = \sum_k 2\{E(k) - \lambda\} b_k^+ b_k \tag{4}$$

$$H_{int} = -\frac{g}{V} \sum_{(k \neq k')} b_k^+ b_{k'} \theta(k) \theta(k')$$

содержащей операторы b_k, b_k^+, с перестановочными соотношениями (2), (3), которые мы условимся называть операторами Паули. Взяв выражение любого порядка

$$H_{int}(H_0-E)^{-1}H_{int}\ldots(H_0-E)^{-1}H_{int}$$

нетрудно теперь проверить непосредственно, что сумма вкладов от графов рассматриваемого типа для гамильтониана (I) будет равна сумме вкладов всех графов для упрощенного гамильтониана (4). Итак, задача суммирования специального класса графов для гамильтониана (I) оказывается эквивалентной задаче о модельной динамической системе, характеризуемой гамильтонианом (4).

Приступим к построению асимптотически точного решения этой последней задачи, пренебрегая лишь величинами, исчезающими в процессе предельного перехода $V\to\infty$. Будем различать пары электронов и пары дырок, для чего введем новые операторы Паули, положив

$$\beta_k = b_k, \quad E(k) \geq \lambda$$

$$\beta_k = b_k^+, \quad E(k) < \lambda$$

Получим

$$H = U + 2\sum_k |E(k)-\lambda|\,\beta_k^+\beta_k -$$

$$-\frac{\mathcal{Y}}{V}\sum_{k\neq k'}\Theta(k)\Theta(k')\left\{\Theta_G(k)\beta_k^+ + \Theta_F(k)\beta_k\right\}\left\{\Theta_G(k')\beta_{k'} + \Theta_F(k')\beta_{k'}^+\right\} \tag{5}$$

где

$$\Theta_F(k) + \Theta_G(k) = 1$$

$$\Theta_F(k) = \begin{cases} 1, & E(k) < \lambda \\ 0, & E(k) > \lambda \end{cases}$$

$$U = 2\sum_k \left\{E(k)-\lambda\right\}\Theta_F(k)$$

Рассмотрим волновую функцию C, для которой все числа заполнения

$$n_k = \overset{+}{\beta}_k \beta_k$$

равны нулю. Тогда

$$\beta_k C = 0 .$$

Покажем, что эта волновая функция является асимптотически точной собственной функцией гамильтониана H , дающей ему значение U . Имеем в самом деле:

$$H = H' + H'' + U$$

$$H' = 2\sum_k |E(k) - \lambda| \overset{+}{\beta}_k \beta_k -$$

$$- \frac{\gamma}{V} \sum_{k \neq k'} \theta(k)\theta(k') \left\{ \theta_G(k) \overset{+}{\beta}_k + \theta_F(k) \beta_k \right\} \theta_G(k') \beta_{k'} -$$

$$- \frac{\gamma}{V} \sum_{k \neq k'} \theta(k)\theta(k') \theta_F(k) \theta_F(k') \overset{+}{\beta}_k \beta_k$$

$$H'' = - \frac{\gamma}{V} \sum_{k \neq k'} \theta(k)\theta(k') \theta_G(k) \theta_F(k') \overset{+}{\beta}_k \overset{+}{\beta}_{k'} .$$

Но очевидно

$$H' C = 0$$

С другой стороны

$$\langle \overset{*}{C} |H''|^2 C \rangle = \langle \overset{*}{C} \overset{+}{H}'' H'' C \rangle =$$

$$= \frac{\gamma^2}{V^2} \sum \theta(k)\theta(k')\theta_G(k)\theta_F(k') < \mathrm{const}$$

$$V \longrightarrow \infty$$

Но в процессе предельного перехода $V \to \infty$, H должно быть пропорционально V, а $|H''|^2$, как мы заметили, остается конечной. Поэтому действительно C является асимптотически точной собственной функцией H, дающей ему значение U. Имеем далее

$$\overline{N} = \langle \overset{*}{C} N C \rangle = \sum_{E(k) \leqslant \lambda} 2$$

Приравняв это выражение полному числу электронов в сфере Ферми

$$\sum_{E(k) < E_F} 2$$

видим, что

$$\lambda = E_F = E(k_F)$$

Проанализируем теперь вопрос об устойчивости состояния C. Рассмотрим сначала случай, когда

$$\gamma < 0 \tag{6}$$

Дополним двойную сумму в (5) членами, для которых $k = k'$, поскольку этим мы не вносим величин, дающих вклад при переходе к пределу $V \to \infty$. Заметим тогда, что $H - U$ равняется существенно положительной форме. Значение U будет следовательно минимальным и состаяние C тем самым должно быть устойчивым. Иное положение будет в случае

$$\gamma > 0 \tag{7}$$

Заметим, что так в состоянии C все числа заполнения $n_k = \overset{+}{\beta}_k \beta_k$ равны нулю, мы можем при вычислении энергии элементарных возбуждений считать операторы Паули β, $\overset{+}{\beta}$ бозевскими. Нам остается тогда только диагонализовать квадратичную форму из операторов β, $\overset{+}{\beta}$, представляющую $H - U$ (5). Эта диагонализация может быть проведена, например, с помощью метода, изложенного в нашей монографии[4].

Получим для определения энергии E элементарного возбуждения следующее секулярное уравнение

$$1 = \frac{\mathcal{Y}}{V} \sum_{k} \theta(k) \left\{ \frac{\theta_F(k)}{\epsilon_k - E} + \frac{\theta_G(k)}{\epsilon_k + E} \right\}$$

$$\epsilon_k = 2 \left| E(k) - E(k_F) \right|$$

откуда, упрощая, найдем

$$1 = \frac{\mathcal{Y}}{V} \sum_{(E_F < E(k) < E_F + \omega)} \frac{2\epsilon_k}{\epsilon_k^2 - E^2}$$

или

$$1 = \frac{\rho}{2} \int_0^{\omega} k^2 \frac{dk}{dE} \cdot \frac{2z\,dz}{z^2 - \frac{E^2}{4}} \tag{8}$$

где

$$\rho = \frac{\mathcal{Y}}{(2\pi^2)} \left(k^2 \frac{dk}{dE} \right)_{k = k_F}$$

Как видно, это уравнение в рассматриваемом случае (7), ~~(8)~~ всегда имеет отрицательный корень для E^2. Получаем, следовательно, чисто мнимое значение для энергии E

$$E \sim i 2 \omega e^{-\frac{1}{\rho}} . \tag{9}$$

Итак, состояние С оказывается неустойчивым. Чтобы найти устойчивое основное состояние с минимальной энергией, введем новые Паули-амплитуды β_k, $\overset{+}{\beta}_k$ не тривиальным образом, как раньше, а с помощью соотношений

$$\beta_k = u_k v_k (2\overset{+}{b}_k b_k - 1) + u_k^2 b_k - v_k^2 \overset{+}{b}_k$$

$$\overset{+}{\beta}_k = u_k v_k (2\overset{+}{b}_k b_k - 1) - v_k^2 b_k + u_k^2 \overset{+}{b}_k \tag{I0}$$

где u_k, v_k – вещественные числа, связанные равенством

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \tag{II}$$

Нетрудно заметить, что амплитуды (I0), действительно, удовлетворяют всем перестановочным соотношениям операторов Паули.

Обращая преобразования (I0), найдем

$$b_k = u_k v_k (1 - 2\overset{+}{\beta}_k \beta_k) + u_k^2 \beta_k - v_k^2 \overset{+}{\beta}_k$$

$$\overset{+}{b}_k = u_k v_k (1 - 2\overset{+}{\beta}_k \beta_k) - v_k^2 \beta_k + u_k^2 \overset{+}{\beta}_k \tag{I2}$$

$$\overset{+}{b}_k b_k = v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)\overset{+}{\beta}_k \beta_k + u_k v_k (\beta_k + \overset{+}{\beta}_k) .$$

Подставляя эти выражения в гамильтониан (4), найдем

$$H = U + \sum_k \left\{ 2(E(k) - \lambda) u_k v_k - \frac{y}{V} \theta(k)(u_k^2 - v_k^2) \sum_{k'} \theta(k') v_{k'} u_{k'} \right\} (\beta_k + \overset{+}{\beta}_k)$$

$$+ \sum_k 2E_{\circledast}(k) \overset{+}{\beta}_k \beta_k - \tag{I3}$$

$$- \frac{y}{V} \sum_{(k_1 \neq k_2)} \left\{ u_{k'}^2 \overset{+}{\beta}_{k'} - v_{k'}^2 \beta_{k'} - 2u_{k_1} v_{k_1} \overset{+}{\beta}_{k_1} \beta_{k_1} \right\} \left\{ u_{k_2}^2 \beta_{k_2} - v_{k_2}^2 \overset{+}{\beta}_{k_2} - 2u_{k_2} v_{k_2} \overset{+}{\beta}_{k_2} \beta_{k_2} \right\} \theta(k_1) \theta(k_2)$$

где

$$U=\sum_{k} 2\{E(k)-\lambda\}V_k^2-\frac{y}{V}\sum_{k_1,k_2}\theta(k_1)\theta(k_2)u_{k_1}V_{k_1}u_{k_2}V_{k_2} \qquad (I4)$$

$$E_e(k)=(E(k)-\lambda)(u_k^2-V_k^2)+\theta(k)u_kV_k\frac{2y}{V}\sum_{k'}\theta(k')u_{k'}V_{k'}. \qquad (I5)$$

Обратим в нуль коэффициенты при $\beta_k + \beta_k^+$ в выражении (I3). Получим тогда уравнение

$$2(E(k)-\lambda)u_kV_k-\frac{y}{V}\theta(k)(u_k^2-V_k^2)\sum_{k'}\theta(k')u_{k'}V_{k'}=0 \qquad (I6)$$

найденное в работе (2) с помощью принципа компенсации опасных графов. Замечая, что с требуемой здесь точностью $\lambda=E(k_F)$ имеем, как и в (2).

$$u^2(k)=\frac{1}{2}\left\{1+\frac{E(k)-E(k_F)}{\sqrt{\{E(k)-E(k_F)\}^2+\theta(k)C^2}}\right\}$$

$$V^2(k)=\frac{1}{2}\left\{1+\frac{E(k_F)-E(k)}{\sqrt{\{E(k)-E(k_F)\}^2+\theta(k)C^2}}\right\}$$

$$C=2\omega e^{-\frac{1}{\rho}} \qquad (I7)$$

$$E_e(k)=\sqrt{\{E(k)-E(k_F)\}^2+\theta(k)C^2}$$

Гамильтониан (I3) может теперь быть представлен в виде:

$$H=H_0+H'+H''+U$$

где

$$H_0 = \sum_{K} 2E_2(K) \overset{+}{\beta}_K \beta_K$$

$$H' = -\frac{\mathcal{J}}{V} \sum_{(K_1 \neq K_2)} \theta(K_1)\theta(K_2)\left\{U_{K_1}^2 \overset{+}{\beta}_{K_1} - V_{K_1}^2 \beta_{K_1}\right\}\left\{U_{K_2}^2 \beta_{K_2} - V_{K_2}^2 \overset{+}{\beta}_{K_2}\right\}$$

$$H'' = \frac{2\mathcal{J}}{V} \sum_{(K_1 \neq K_2)} \theta(K_1)\theta(K_2)\left\{U_{K_2}^2 \beta_{K_2} - V_{K_2}^2 \overset{+}{\beta}_{K_2} - 2U_{K_2}V_{K_2}\overset{+}{\beta}_{K_2}\beta_{K_2}\right\}U_{K_1}V_{K_1}\overset{+}{\beta}_{K_1}\beta_{K_1} + \tag{I8}$$

$$+ \frac{2\mathcal{J}}{V} \sum_{(K_1 \neq K_2)} \theta(K_1)\theta(K_2)\left\{U_{K_1}^2 \overset{+}{\beta}_{K_1} - V_{K_1}^2 \beta_{K_1} - 2U_{K_1}V_{K_1}\overset{+}{\beta}_{K_1}\beta_{K_1}\right\}U_{K_2}V_{K_2}\overset{+}{\beta}_{K_2}\beta_{K_2} \,.$$

Возьмем волновую функцию C, для которой все числа заполнения

$$\nu_K = \overset{+}{\beta}_K \beta_K$$

равны нулю. Покажем, как и раньше, что с точностью до величин, исчезающих в процессе предельного перехода $V \longrightarrow \infty$, C является собственной функцией гамильтониана H, дающей ему значение U. Имеем, действительно,

$$(H_0 + H'')C = 0$$

и

$$\langle C^* | H' |^2 C \rangle = \frac{\mathcal{Y}^2}{V^2} \sum \theta(K_1)\theta(K_2)\left\{U_{K_1}^4 V_{K_2}^4 + U_{K_1}^2 V_{K_1}^2 U_{K_2}^2 V_{K_2}^2\right\} \underset{V \to \infty}{<} const$$

Перейдем теперь к рассмотрению элементарных возбуждений. Так как в состоянии C все числа заполнения ν_K равны нулю, то при вычислении энергии элементарных возбуждений мы можем считать операторы Паули β_K, $\overset{+}{\beta}_K$ бозевскими и в выражении гамильтониана (I8) ограничиться квадратичной формой $H_0 + H'$.

Проводя диагонализацию ее ранее упоминавшимся методом (4), приходим к системе линейных уравнений:

$$(E-2E_e(k))\varphi_k=\Theta(k)u_k^2\frac{y}{V}\sum_{k'}\left\{u_{k'}^2\varphi_{k'}-v_{k'}^2\chi_{k'}\right\}\Theta(k')-$$

$$-\Theta(k)v_k^2\frac{y}{V}\sum_{k'}\left\{u_{k'}^2\chi_{k'}-v_{k'}^2\varphi_{k'}\right\}\Theta(k')$$

$$-(E+2E_e(k))\chi_k=\Theta(k)u_k^2\frac{y}{V}\sum_{k'}\left\{u_{k'}^2\chi_{k'}-v_{k'}^2\varphi_{k'}\right\}\Theta(k') \quad (19)$$

$$-\Theta(k)v_k^2\frac{y}{V}\sum_{k'}\left[u_{k'}^2\varphi_{k'}-v_{k'}^2\chi_{k'}\right]$$

с условием нормировки

$$\sum_k\left\{|\varphi_k|^2-|\chi_k|^2\right\}=1 \quad (20)$$

Отсюда получаем секулярное уравнение

$$\left\{1+\frac{y}{V}\sum_k\Theta(k)\left[\frac{u_k^4}{2E_e(k)+E}+\frac{v_k^4}{2E_e(k)-E}\right]\right\}\times$$

$$\times\left\{1+\frac{y}{V}\sum_k\Theta(k)\left[\frac{v_k^4}{2E_e(k)+E}+\frac{u_k^4}{2E_e(k)-E}\right]\right\}-\left\{\frac{y}{V}\sum_k\Theta(k)u_k^2v_k^2\left[\frac{1}{2E_e(k)+E}+\frac{1}{2E_e(k)-E}\right]\right\}^2 \quad (21)$$

Нетрудно заметить, что при

$$|E|<2\min E_e(k)=2E_e(k_F)$$

это уравнение не имеет решений, так как вычитаемое в (21) тогда меньше уменьшаемого. При

$$|E|>2E_e(k_F)$$

имеется непрерывный спектр

$$E = \pm 2E_e(k) + O\left(\frac{1}{V}\right)$$

$$O\left(\frac{1}{V}\right) \to 0 \quad \text{при} \quad V \to \infty$$

Как видно из (I9) знак − не согласуется с условием нормировки (20).

Итак, все E положительны (что, впрочем, можно усмотреть, непосредственно заметив, что рассматриваемая квадратичная форма является определенно положительной) и отделены от нуля щелью

$$E = 2E_e(k) \geqslant 2E_e(k_F) = 2C = 4\omega e^{-\frac{1}{\rho}}. \tag{22}$$

Мы получаем здесь опять те же результаты Бардина, как и в предыдущих работах(I,2). Как мы видим, метод суммирования графов оказывается весьма наглядным и позволяет установить связь с идеями работы Бардина-Купера-Шриффера.

Однако, по нашему мнению метод канонического преобразования является более гибким, позволяя легко получать высшие приближения, и, кроме того, допускает различные обобщения, например, для расчета термодинамических величин.

В заключение я хотел бы поблагодарить Д.Н.Зубарева, В.В.Толмачева, С.В.Тябликова и Ю.А.Церковникова за ценные обсуждения.

Литература

1. Н.Н.Боголюбов, ЖЭТФ (в печати).

2. В.В.Толмачев и С.В.Тябликов, ЖЭТФ (в печати).

3. J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 106, 162 (1957)

4. Н.Н.Боголюбов "Лекции по квантовой статистике", Киев, I949, стр.206-2I4.