28/IV-84

объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P17-84-52

Н.Н.Боголюбов (мл.), А.С.Шумовский,
В.И.Ярославцев

НЕЭКВИВАЛЕНТНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ АЛГЕБРЫ НАБЛЮДАЕМЫХ В МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ ДВУХЖИДКОСТНОЙ МОДЕЛИ СВЕРХПРОВОДНИКА

Направлено в журнал
"Теоретическая и математическая физика"

1984

1. ВВЕДЕНИЕ

Согласно современным воззрениям, конечная доля электронов в сверхпроводящем состоянии сконцентрирована в "сверхпроводящую компоненту", образованную сверхтекучим состоянием фермионной системы и находящуюся в равновесии с "нормальной компонентой" /1,2/. Эта последняя представляет собой совокупность тепловых возбуждений электронов в одиночные квазичастичные состояния. Сверхпроводящая и нормальная компоненты проникают друг в друга.

Двухжидкостные представления лежат в основе феноменологических теорий Гортера-Казимира, Лондонов, Гинзбурга-Ландау, Пиппарда /см. /2,3,4/ /, широко применяются при описании сверхпроводников второго рода /5/, в частности, в связи с проблемой описания движения вихревых нитей.

Экспериментально взаимное проникновение нормального и сверхпроводящего фазовых состояний наблюдается в сверхпроводниках второго рода /5/ и в некоторых сверхпроводниках первого рода (Al, Sn, In) /6,7/. В этом отношении весьма перспективной представляется методика, основанная на непосредственном исследовании изменений в пространственном распределении электронной плотности при изменении фазового состояния /8/.

Микроскопическая теория сверхпроводимости основывается, как известно, на использовании модельного гамильтониана Боголюбова-БКШ, описывающего эффективное притяжение электронов, обусловленное электрон-фононным обменом /9/. Важным свойством такого гамильтониана является вырождение основного состояния вследствие инвариантности относительно градиентного преобразования первого рода /10,11/. Точное в термодинамическом пределе решение для сверхпроводящего состояния /12-14/ получается с помощью введения так называемого аппроксимирующего гамильтониана, уже не инвариантного относительно указанного градиентного преобразования. В этом смысле переход к аппроксимирующему гамильтониану соответствует процедуре квазиусреднения /10,11/.

С точки зрения концепции квазисредних Боголюбова разным фазовым состояниям системы соответствуют различные /по свойствам симметрии/ вакуумные состояния, реализующие неэквивалентные представления алгебры локальных наблюдаемых /10,11,15,16/. Именно таким способом и следует вводить различие в описание нормальной и сверхпроводящей компонент /17/. Квазиусреднение можно вводить различными способами /18,19/, однако в каждом случае сверхпроводящее состояние оказывается однородным в фазовом смысле, т.е. совершенно лишенным макроскопических зародышей нормальной компоненты. Поэтому при макроскопическом описании гетерофазных состояний в сверхпроводниках помимо квазиусреднения необходимо воспользоваться также условием равновесия между компонентами и предположением о равномерном перемешивании в системе при $t \to +\infty$, где t - время наблюдения [20-24]. В заметке [25] в рамках такого подхода была предложена микроскопическая двухжидкостная модель сверхпроводящего состояния. В настоящей работе мы подробно остановимся на математической формулировке такой модельной задачи и на тех особенностях в поведении системы, которые могут быть описаны только в рамках микроскопической двухжидкостной модели.

2. СТРУКТУРА МОДЕЛЬНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА

Гамильтониан в модели Боголюбова - БКШ имеет вид

$$H = \int d\vec{r} \sum_{\sigma} \psi^{+}_{\sigma}(\vec{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu \right\} \psi_{\sigma}(\vec{r}) + \frac{1}{2V} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \sum_{\sigma,\sigma'} \psi^{+}_{\sigma}(\vec{r}) \psi^{+}_{\sigma'}(\vec{r}') \Phi(\vec{r},\vec{r}') \psi_{\sigma'}(\vec{r}') \psi_{\sigma}(\vec{r}) . \qquad /1/$$

Здесь $\psi^{+}_{\sigma}(\vec{r})$ - оператор рождения электрона со спином σ в точке $\vec{r}$, μ - химический потенциал и Φ - ядро эффективного парного притяжения. Интегрирование в /1/ производится по всему объему V системы /которая рассматривается в пределе $V \to +\infty$ [14] /. Операторы ψ, ψ^{+} удовлетворяют обычным антикоммутационным соотношениям

$$\{\psi_{\sigma}(\vec{r}), \psi_{\sigma'}(\vec{r}')\} = 0, \quad \{\psi_{\sigma}(\vec{r}), \psi^{+}_{\sigma'}(\vec{r}')\} = \delta_{\sigma\sigma'}\delta(\vec{r}-\vec{r}') . \qquad /2/$$

При $V \to \infty$ мы имеем дело с макроскопическим вакуумным состоянием системы Ψ; оно не меняется при выведении из системы конечного /микроскопического/ числа электронов. Полный ортонормированный набор таких вакуумных состояний можно параметризовать с помощью непрерывного индекса a $(0 \le a \le 2\pi)$ [15]. Такая возможность обусловлена инвариантностью гамильтониана /1/ по отношению к унитарной однопараметрической группе $U(1)$. Простая физическая интерпретация этой параметризации, связанная с переходом к квазиспиновому представлению, рассматривалась в [26,27]. Каждому значению непрерывного параметра a соответствует гильбертово пространство $\mathcal{H}^{(a)}$, содержащее вакуумное состояние $\Psi^{(a)}$ и получаемые из него возбужденные состояния. В силу свойств инвариантности гамильтониана /1/ любое преобразование группы $U(1)$ вида

$$\psi \to \psi\, e^{i\beta} \qquad /3/$$

переводит представление алгебры наблюдаемых на $\mathcal{H}^{(a)}$ в представление на $\mathcal{H}^{(a+2\beta)}$; такие представления оказываются унитарно неэквивалентными [15,16]. Так как для состояний из $\mathcal{H}^{(a)}$ закон сохранения числа частиц не выполняется, то гильбертово пространство с фиксированным a может быть использовано для описания сверхпроводящего состояния [13,25]. Для определенности зафиксируем $a = 0$: $\mathcal{H}^{(0)} \equiv \mathcal{H}_s$.

С другой стороны, преобразования /3/ не нарушают закона сохранения числа частиц при определении операторов ψ на пространстве [26] $\mathcal{H} = \sum_{0<a<2\pi} \oplus \mathcal{H}^{(a)}$, где суммирование по непрерывному индексу понимается в смысле прямого интеграла. Как нетрудно видеть, состояния, соответствующие сохранению числа частиц, не исчерпываются пространством $\mathcal{H}$ [15,16]. Обозначим через $\mathcal{H}_n$ пространство макроскопических состояний, инвариантных относительно преобразований группы $U(1)$ $(\mathcal{H}_n \supset \mathcal{H})$. Ясно, что представления операторов ψ, ψ^{+} и всей алгебры локальных наблюдаемых R^* на $\mathcal{H}_s$ и на $\mathcal{H}_n$ унитарно неэквивалентны.

В соответствии с концепцией квазисредних на каждом из пространств $\mathcal{H}_s$ и $\mathcal{H}_n$ мы имеем чистые фазовые состояния. Предположим теперь, что в системе может возникнуть гетерофазная смесь /двухжидкостное состояние/. Такую смесь естественно определить на пространстве [25] $\mathcal{H} = \mathcal{H}_s \oplus \mathcal{H}_n$. При этом полный гамильтониан системы должен иметь вид:

$$H_m = H_s \oplus H_n , \quad H_i = H\{\psi_i\} , \qquad /4/$$

где оператор $H\{\psi_i\}$ совпадает с /1/ при замене операторов ψ, ψ^{+} соответствующим представлением на $\mathcal{H}_i (i = n, s)$. При такой формулировке модельной задачи помимо обычного параметра порядка, каким является величина щели в спектре элементарных возбуждений, мы имеем еще один параметр порядка - среднюю концентрацию частиц, находящихся в определенном фазовом состоянии [21]:

$$w_i = N_i/N , \quad N = N_n + N_s , \qquad /5/$$

$$N_i = \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \langle \psi^{+(i)}(\vec{r}) \psi^{(i)}(\vec{r}) \rangle . \qquad /6/$$

Рассмотрим равновесную гетерофазную систему в какой-либо момент времени t. Она будет состоять из ряда макроскопических областей, относящихся к нормальным и сверхпроводящим фазовым компонентам и занимающим совокупные объемы V_n и V_s $(V_n + V_s = V)$. Величина каждого из фазовых объемов V_i определяется условиями локального равновесия в системе; однако число областей, состав-

---

*Такую алгебру можно определить как кольцо Нейманна над множеством всех ограниченных операторных функций вида $\psi(f) = \int d\vec{r}\, \psi(\vec{r}) f(\vec{r})$, где f - функция, интегрируемая с квадратом [16,28].

ляющих V_i, и их взаимное расположение могут меняться с изменением времени. Ясно, что интегрирование в /6/ должно вестись по области V_i, т.е. по зависящему от времени множеству координат. Чтобы избавиться от такой зависимости, необходимо провести усреднение по промежутку времени Δt и перейти к пределу $\Delta t \to \infty$, что соответствует равновесному статистическому описанию. В указанном пределе в макроскопической системе, по-видимому, должно произойти равномерное перемешивание. Отметим, что принципиальная связь, существующая между свойством макроскопичности и эргодическим поведением статистических систем, обсуждалась в недавней работе Боголюбова [29].

При $\Delta t \to +\infty$ электрон, относящийся к i-ой фазовой компоненте, может находиться в любой точке внутри полного объема системы V с вероятностью w_i, определяемой соотношениями /5/, /6/, причем интегрирование в /6/ теперь ведется по всем координатам внутри V. Заметим далее, что соотношение /6/ можно рассматривать как условие нормировки для операторов $\psi^{(i)}$. Так как интегрирование в /6/ ведется по всему объему V, то операторы $\psi^{(i)}$ оказываются нормированными не на единицу, как обычные ферми-операторы, а на функцию температуры, меняющуюся в пределах от 0 до 1. Поэтому представляется естественным ввести ренормировку вида $\psi^{(i)} \to \tilde{\psi}^{(i)} \sqrt{w_i}$. В этом случае вместо /6/ имеем

$$N_i = \sum_\sigma w_i \int_V d\vec{r} \langle \tilde{\psi}_\sigma^{+(i)}(\vec{r}) \tilde{\psi}_\sigma^{(i)}(\vec{r}) \rangle , \qquad /7/$$

причем стоящие в правой части /7/ операторы $\tilde{\psi}$ нормированы обычным для ферми-операторов способом. Укажем, что подобная ренормировка вводилась ранее при построении микроскопической модели ферромагнетика с зародышами парамагнитной фазы [30-32].

Таким образом, мы получили эффективный гамильтониан, описывающий гетерофазное состояние в сверхпроводнике:

$$H = H_n \oplus H_s ,$$

$$H_i = w_i \int_V d\vec{r} \sum_\sigma \tilde{\psi}_\sigma^{+(i)}(\vec{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_i \right\} \tilde{\psi}_\sigma^{(i)}(\vec{r}) + \qquad /8/$$

$$+ \frac{1}{2V} w_i^2 \int_V d\vec{r} \int_V d\vec{r}' \sum_{\sigma,\sigma'} \tilde{\psi}_\sigma^{+(i)}(\vec{r}) \tilde{\psi}_{\sigma'}^{+(i)}(\vec{r}') \Phi(\vec{r},\vec{r}') \tilde{\psi}_{\sigma'}^{(i)}(\vec{r}') \tilde{\psi}_\sigma^{(i)}(\vec{r}) .$$

Кроме того, должны выполняться дополнительные условия

$$w_n + w_s = 1 , \quad \mu_n = \mu_s \ (\equiv \mu), \qquad /9/$$

первое из которых определяет нормировку фазовой концентрации, а второе - равновесие между фазовыми компонентами.

Прежде чем приступить к конкретным вычислениям, сделаем следующее замечание. Выше мы указали, что величину w_i можно рассматривать как дополнительный параметр порядка. При этом в силу /9/ только одна из двух величин w_s, w_n может рассматриваться в качестве независимой. Для определенности будем далее говорить о w_s. Ясно, что $0 \le w_s \le 1$. В феноменологических теориях всегда $w_s = 1$ при $\theta = 0$ [2,3]. Как будет показано ниже /см. также [25]/, равенство $w_s = 1$ возможно и при $0 \le \theta \le \theta_N$, причем характерная температура θ_N /точка нуклеации/ определяется параметрами взаимодействия в гамильтониане. Ниже θ_N система находится в фазово-однородном сверхпроводящем состоянии. Выше θ_N в системе возникает макроскопическая нормальная компонента. Таким образом, с изменением параметра порядка w_s связан специфический фазовый переход из гомофазного в гетерофазное состояние - явление нуклеации. Подобное явление имеет место - в частности, в ферро- и антиферромагнетиках с зародышами парамагнитной фазы [32, 33]. К обсуждению этого явления в сверхпроводниках мы вернемся ниже.

3. ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ

Перейдем обычным образом к импульсному представлению

$$\tilde{\psi}_\sigma^{(i)}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} a_\sigma^{(i)}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad \vec{k} = \frac{2\pi\vec{n}}{L}, \quad \vec{n} \in Z^3, \quad L = V^{1/3}.$$

Будем учитывать лишь взаимодействие частиц с противоположно направленными спинами и импульсами. Разность

$$n_+^{(i)}(\vec{k}) - n_-^{(i)}(\vec{k}), \quad n_\pm^{(i)}(\vec{k}) \equiv a_\pm^{+(i)}(\pm\vec{k})\, a_\pm^{(i)}(\pm\vec{k})$$

является интегралом движений для H_i, и собственную функцию для наименьшего собственного значения H_i следует искать на классе функций, удовлетворяющих условию [13]: $[n_+^{(i)}(\vec{k}) - n_-^{(i)}(\vec{k})]\Psi = 0$. Для этого специального класса функций гамильтониан H_i может быть записан в квазиспиновом представлении с помощью соотношений [34]:

$$\begin{cases} \sigma_i^+(\vec{k}) = a_-^{(i)}(-\vec{k})\, a_+^{(i)}(\vec{k}) \\ \sigma_i^-(\vec{k}) = a_+^{+(i)}(\vec{k})\, a_-^{+(i)}(-\vec{k}) \\ \sigma_i^{(z)}(\vec{k}) = 1_i - [n_+^{(i)}(\vec{k}) + n_-^{(i)}(\vec{k})] \\ \sigma_i^\pm(\vec{k}) = \frac{1}{2}\{\sigma_i^x(\vec{k}) \pm i\sigma_i^y(\vec{k})\} \end{cases} , \qquad /10/$$

где σ^{a} - компоненты оператора Паули и I_i - единичный оператор на $\mathcal{H}_i$. Впервые такое представление для модельной задачи теории сверхпроводимости было введено Боголюбовым [35] и независимо Андерсоном [36]*. Теперь гамильтониан /8/ может быть записан в виде:

$$H = H_s \oplus H_n ,$$

$$H_i = \frac{1}{2} w_i \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) \{ I_i - \sigma_i^{(z)}(\vec{k}) \} - \frac{1}{2V} w_i^2 \sum_{\vec{k},\vec{k}'} J(\vec{k},\vec{k}')\sigma_i^-(\vec{k})\sigma_i^+(\vec{k}'), \qquad /11/$$

где $\epsilon(\vec{k}) = \frac{\vec{k}^2}{2m} - \mu$ и J - фурье-образ потенциала Φ. Заметим, что квазиспиновая формулировка позволяет интерпретировать введенный в предыдущем разделе индекс состояния a как полярный угол в плоскости XY пространства квазиспинов [17].

Перейдем теперь к рассмотрению условий /9/. Определим обычным образом термодинамический потенциал

$$\Omega = \Omega_s + \Omega_n , \; \Omega_i = -\theta \ln \mathrm{Sp}\, e^{-H_i/\theta} , \qquad /12/$$

где θ - температура. В силу /5/ имеем:

$$w_i = \frac{1}{\partial\Omega/\partial\mu} \cdot \frac{\partial\Omega_i}{\partial\mu} ; \quad \frac{\partial\Omega_i}{\partial\mu} \equiv -N_i . \qquad /13/$$

С другой стороны, формально дифференцируя /12/, находим

$$\frac{\partial\Omega_i}{\partial\mu} = \frac{1}{2} w_i \sum_{\vec{k}} \{ <\sigma^{(z)}(\vec{k})> - 1 \} . \qquad /14/$$

Далее, второе уравнение в /9/ можно переписать в виде [25]

$$\frac{\partial F}{\partial w_s} = 0 , \qquad /15/$$

где F - соответствующая свободная энергия $F = \Omega + \mu N$. Принимая во внимание соотношения /11/ и /12/, получаем вместо /15/

$$w_s = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} J(\vec{k},\vec{k}') \{ <\sigma_s^-(\vec{k})\,\sigma_s^+(\vec{k}')> + <\sigma_n^-(\vec{k})\,\sigma_n^+(\vec{k}')> \} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) \{ <\sigma_n^{(z)}(\vec{k}) - \sigma_s^{(z)}(\vec{k})> \} + \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} J(\vec{k},\vec{k}') <\sigma_n^-(\vec{k})\,\sigma_n^+(\vec{k}')> .$$

Таким образом, для нахождения температурных зависимостей величин w_s и μ нам необходимо вычислить средние $<\sigma_i^{(z)}(\vec{k})>$; $<\sigma_i^-(\vec{k})\sigma_i^+(\vec{k}')>$.

* В этой связи см. также работы [2,13,26-28,37].

Кроме того, необходимо определить и параметр порядка /щель/*:

$$\Delta(\vec{k}) = \frac{1}{V} \sum_{k'} J(\vec{k},\vec{k}')\,\xi(\vec{k}') ; \quad \xi(\vec{k}) \equiv <\sigma_s^{\pm}(\vec{k})> .$$

Подчеркнем, что так как представления операторов с разными значениями i унитарно неэквивалентны, то и соответствующие средние должны вычисляться по-разному. Рассмотрим сначала состояния, соответствующие нормальной компоненте. Вследствие градиентной инвариантности таких состояний, составляя соответствующие уравнения движения, получаем

$$<\sigma_n^{\pm}(\vec{k})> = 0 , \quad <\sigma_n^-(\vec{k})\,\sigma_n^+(\vec{k}')> = 0 , \quad (\vec{k},\vec{k}'), \; (\vec{k} \neq \vec{k}') ,$$

$$<\sigma_n^{(z)}(\vec{k})> = \mathrm{th}\frac{w_n \epsilon(\vec{k})}{2\theta} . \qquad /17/$$

Перейдем теперь к определению средних по сверхпроводящим состояниям. В силу нарушения градиентной инвариантности при конечных V перестановочные соотношения для локальных наблюдаемых должны отличаться от фермиевских и переходить в них лишь при $V \to \infty$ [11,15]. Подход к вычислению средних, связанный с асимптотическим нарушением перестановочных соотношений, был предложен Боголюбовым /мл./ [18] /см. также [19,14] /. Следуя работам [18,19], введем операторные конструкции вида

$$\begin{cases} \gamma^-(\vec{k}) = u^2(\vec{k})\,\sigma_s^-(\vec{k}) - v^2(\vec{k})\,L^2\,\sigma_s^+(\vec{k}) + 2u(\vec{k})\,v(\vec{k})\,L\sigma_s^{(z)}(\vec{k}) \\ \gamma^+(\vec{k}) = u^2(\vec{k})\,\sigma_s^+(\vec{k}) - v^2(\vec{k})\,\sigma_s^-(\vec{k})\,L^2 + 2u(\vec{k})\,v(\vec{k})\,\sigma_s^{(z)}(\vec{k})\,L , \end{cases} \qquad /18/$$

где $L = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} \vec{\sigma}(\vec{k})\vec{I} / \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} \xi(\vec{k})$ и коэффициенты u, v соответствуют обычному каноническому преобразованию Боголюбова

$$u^2(\vec{k}) + v^2(\vec{k}) = 1, \quad u(\vec{k}) = u(-\vec{k}), \quad v(\vec{k}) = -v(-\vec{k}) ,$$

$$u^2(\vec{k}) - v^2(\vec{k}) = \frac{w_s \epsilon(\vec{k})}{E(\vec{k})} , \quad u(k)\,v(k) = \frac{w_s^2 \Delta(\vec{k})}{2E(\vec{k})} ,$$

$$E(\vec{k}) = \sqrt{\epsilon^2(\vec{k})\,w_s^2 + \Delta^2(\vec{k})\,w_s^4} .$$

Как нетрудно видеть, лишь при $V \to \infty$ операторы $\gamma^{\pm}$ имеют обычные для операторов Паули перестановочные соотношения. Уравнения движения для операторов /18/ могут быть представлены в виде

* Параметр $\xi(\vec{k})$ является вещественным в силу выбора пространства $\mathcal{H}_s$ как $\mathcal{H}$ /см. [11] /.

$$\begin{cases} i\dfrac{d\gamma^-(\vec{k})}{dt} + E(\vec{k})\,\gamma^-(\vec{k}) = G^-(\vec{k}), \\ i\dfrac{d\gamma^+(\vec{k})}{dt} - E(\vec{k})\,\gamma^+(\vec{k}) = G^+(\vec{k}), \end{cases}$$

где операторы $G^{\mp}$ имеют довольно громоздкий вид:

$$G^+(\vec{k}) = v^2(\vec{k})\,R^-(\vec{k}) - u^2(\vec{k})\,R^+(\vec{k}) - J^2(\vec{k})\,\sigma^-(\vec{k})\,[i\frac{dL^2}{dt}] +$$

$$+ v(\vec{k})\,u(\vec{k})\,[\sigma^{(z)}(\vec{k}),\, i\frac{dL}{dt}]_+ ,$$

$$R^+(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}'} J(\vec{k},\vec{k}')\,\{[\sigma^+(\vec{k}),\, (\sigma^{(z)}(\vec{k}') - <\sigma^{(z)}(\vec{k}')>)]_+ +$$

$$+ [\sigma^{(z)}(\vec{k}),\, \sigma^+(\vec{k}')]_+ \}.$$

Для нас важно, что среднее $<G^-(\vec{k})\,G^+(\vec{k})>$ выражается через величины $<L^2 - 1>$, $<(dL/dt)^2>$, которые могут быть оценены с помощью теоремы из работы [38]. В результате получаем $<G^-(\vec{k})\,G^+(\vec{k})> = \eta(V) \underset{V\to\infty}{\longrightarrow} 0$. Далее, в силу леммы [18, 19], имеет место оценка

$$|<\gamma^-(\vec{k})\,B> - e^{-E(\vec{k})/\theta} <B\gamma^-(\vec{k})>| \le \frac{2}{\theta}\, b\sqrt{\eta(V)}, \qquad /19/$$

где B - ограниченный оператор: $\|B\| \le b = \mathrm{const}$. Оценка типа /19/ лежит в основе метода вычисления средних по сверхпроводящим состояниям, развитого Боголюбовым /мл./ [18, 19, 14]. В соответствии с этим методом при вычислении средней от какой-либо локальной наблюдаемой $A(\vec{k})$ необходимо дополнить выражение, стоящее под знаком среднего, операторной конструкцией вида L и затем перейти к пределу при $V \to \infty$. Найдем таким образом среднее $<\sigma_s^{(z)}(\vec{k})>$. Заметим, что $\sigma_s^{(z)}(\vec{k}) = 1_s - 2\sigma_s^-(\vec{k})\,\sigma_s^+(\vec{k})$ и

$$\gamma^-(\vec{k})\,\gamma^+(\vec{k}) = [u^4(\vec{k}) - v^4(\vec{k})L]\,\sigma_s^-(\vec{k})\,\sigma_s^+(\vec{k}) +$$

$$+ u(\vec{k})\,v(\vec{k})\,[\sigma_s^+(\vec{k}) + \sigma_s^-(\vec{k})]\cdot[u^2(\vec{k}) + v^2(\vec{k})\,L^2]L + v^2(\vec{k})\,L[u^2(\vec{k}) + v^2(\vec{k})L^2] - D_1,$$

где $D_1 \to 0$ при $V \to \infty$. Теперь с учетом этого соотношения и /18/ имеем

$$[u^2(\vec{k}) + v^2(\vec{k})\,L^2]^3\,\sigma_s^{(z)}(\vec{k}) = [u^2(\vec{k}) - v^2(\vec{k})\,L^2]\,\gamma^z(\vec{k}) +$$

$$+ 2u(\vec{k})\,v(\vec{k})\,[u^2(\vec{k}) + v^2(\vec{k})\,L^2][L\gamma^+(\vec{k}) + \gamma^-(\vec{k})\,L] + \qquad /20/$$

$$+ [u^2(\vec{k}) - v^2(\vec{k})L^2]\cdot\{[u^2(\vec{k}) + v^2(\vec{k})\,L^2]^2 - 1_s\} - D_2,$$

где $\gamma^z(\vec{k}) = 1_s - 2\gamma^-(\vec{k})\,\gamma^+(\vec{k})$ и $D_2 \to 0$ при $V \to \infty$. Заметим, что при $V \to \infty$ $[u^2(\vec{k}) + v^2(\vec{k})\,L^2] \to 1$. Доумножая теперь левую и правую части соотношения /20/ справа на L, усредняя и переходя к пределу при $V \to \infty$, получаем, с учетом /19/, после ряда громоздких преобразований:

$$<\sigma_s^{(z)}(\vec{k})> = \frac{w_s\,\epsilon(\vec{k})}{E(\vec{k})}\,\mathrm{th}\frac{E(\vec{k})}{2\theta}. \qquad /21/$$

Теперь из соотношений /9/, /13/, /14/, /17/ и /21/ получаем для w_s уравнение вида:

$$w_s = \frac{w_s \sum_{\vec{k}} \{1 - w\,\epsilon(\vec{k})\,E^{-1}(\vec{k})\,\mathrm{th}[E(\vec{k})/2\theta]\}}{w_s \sum_{\vec{k}} \{1 - w_s\,\epsilon(\vec{k})E^{-1}(\vec{k})\,\mathrm{th}[E(\vec{k})/2\theta]\} + (1-w_s)\sum_{\vec{k}}\{1 - \mathrm{th}[(1-w_s)\,\epsilon(\vec{k})/2\theta]\}}. \qquad /22/$$

Аналогичным образом можно вычислить и другие интересующие нас средние:

$$\begin{cases} <\sigma_s^{\pm}(\vec{k})> = \dfrac{w_s^2\,\Delta(\vec{k})}{2E(\vec{k})}\,\mathrm{th}\dfrac{E(\vec{k})}{2\theta} \\ <\sigma_s^-(\vec{k})\,\sigma_s^+(\vec{k})> = \dfrac{1}{2}\,\{1 - \dfrac{w_s\,\epsilon(\vec{k})}{E(\vec{k})}\,\mathrm{th}\dfrac{E(\vec{k})}{2\theta}\}. \end{cases} \qquad /23/$$

С помощью соотношений /15/-/17/, /23/ можно записать также и второе уравнение в /9/. Однако получаемое таким образом выражение будет громоздким и неудобным для применения. Поэтому заменим его другим, позволяющим определить μ. Из /14/ при $i = s$ получаем:

$$w_s = \frac{1}{2N}\, w_s \sum_{\vec{k}} \{1 - \frac{\epsilon(\vec{k})\,w}{E(\vec{k})}\,\mathrm{th}\frac{E(\vec{k})}{2\theta}\}. \qquad /24/$$

Наконец, с учетом /23/, уравнение для щели $\Delta(\vec{k})$ преобразуется к виду

$$\Delta(\vec{k}) = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}'} \frac{w_s^2\,J(\vec{k},\vec{k}')\,\Delta(\vec{k}')}{2E(\vec{k}')}\,\mathrm{th}\frac{E(\vec{k}')}{2\theta}. \qquad /25/$$

Уравнения /22/, /24/, /25/ образуют замкнутую систему, позволяющую определить оба параметра порядка w_s, $\Delta(\vec{k})$ и химический потенциал μ как функции температуры θ и ядра взаимодействия J. Рассмотрим возможные их решения.

Заметим, что уравнение /22/ допускает три решения:
а/ $w_s \equiv 0$, б/ $w_s \equiv 1$, в/ $w_s \ne 0{,}1$.

В первом случае $\Delta(\vec{k}) \equiv 0$, т.е. сверхпроводящая компонента в системе отсутствует при всех температурах. Такое решение, как известно, неустойчиво при достаточно низких температурах [12]. Случай б/ соответствует чисто сверхпроводящему состоянию системы /нормальная компонента отсутствует/. При этом уравнение для щели /25/ переходит в стандартное уравнение теории Боголюбова - БКШ [12]. Пусть для определенности [2]

$$J(\vec{k}, \vec{k}') = \begin{cases} J = \text{const}, & |\epsilon(\vec{k})| \le h\omega, \\ 0, & |\epsilon(\vec{k})| > h\omega_0. \end{cases}$$

Тогда решение уравнения /25/ в случае б/ в точке, в которой $\Delta \to 0$, позволяет получить для критической температуры стандартное значение

$$\theta_c = \frac{2e^C}{\pi} h\omega_0 e^{-1/J\rho_0} \simeq 1{,}134 h\omega_0 e^{-1/J\rho_0} \qquad /26/$$

Здесь $C = 0{,}5772$ - число Эйлера и

$$\rho_0 \equiv \frac{mk_0}{2\pi^2 h^3}, \{\sqrt{2m(\mu - h\omega_0)} < k_0 < \sqrt{2m(\mu + h\omega_0)}; \mu > h\omega_0\}$$

- плотность состояний на поверхности Ферми.

Рассмотрим теперь ситуацию в/. При $\Delta \to 0$ из /22/ получаем

$$(1 - w_{sc}) \sum_{\vec{k}} \{1 - \text{th}\frac{(1 - w_{sc})\epsilon(\vec{k})}{2\tilde{\theta}_c}\} = (1 - w_{sc}) \sum_{\vec{k}} \{1 - \text{th}\frac{w_{sc}\epsilon(\vec{k})}{2\tilde{\theta}_c}\},$$

откуда в критической точке $\tilde{\theta}_c$ параметр $w_{sc} = \frac{1}{2}$. Теперь из уравнения /25/ для критической температуры имеем вместо /26/

$$\tilde{\theta}_c = \frac{2e^C}{\pi} w_{sc} hw_0 e^{-1/J\rho_0 w_{sc}} \simeq 0{,}567 h\omega_0 e^{-2/J\rho_0} \qquad /27/$$

Так как для большинства сверхпроводников второго рода $J\rho_0 \sim 1/3$ [3], то температура $\tilde{\theta}_c$ значительно ниже критической точки в теории Боголюбова-БКШ /26/.

Рассмотрим теперь основное состояние гетерофазного сверхпроводника, описываемого случаем в/. Заменяя суммирование по $\vec{k}$ интегрированием по $\vec{k}$ и переходя в соотношениях /22/, /24/, /25/ к пределу при $\theta \to 0$, получаем

$$\begin{cases} \Delta_0 = \dfrac{2h\omega_0}{w_0} \dfrac{e^{1/J\rho_0 w_0}}{e^{2/J\rho_0 w_0} - 1}, \\ 1 = \kappa \dfrac{k_0^3}{3}, \\ 2\dfrac{3}{\kappa} = k_-^3 + k_+^3, \end{cases} \qquad /28/$$

где через x_0 обозначено значение соответствующей величины при $\theta \to 0$; использованы обозначения:

$$k_\pm = \sqrt{2m(\mu_0 \pm h\omega_0)}, \quad \kappa \equiv v/2\pi^2 h^3, \quad v \equiv V/N, \quad k_0 \equiv \sqrt{2m\mu_0}.$$

Учитывая, что $\mu_0 >> h\omega_0$ [5], из третьего уравнения /28/ находим:

$$k_\pm = \sqrt{2m\mu_0}\sqrt{1 \pm \frac{h\omega_0}{\mu_0}} = \sqrt{2m\mu_0}(1 \pm \frac{h\omega_0}{2\mu_0}). \qquad /29/$$

Теперь вместо /28/ получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} \Delta_0 = \dfrac{2h\omega_0}{w_0} \dfrac{\exp\{1/J\rho_0 w_0\}}{\exp\{2/J\rho_0 w_0\} - 1}, \\ 1 = \kappa \dfrac{k_0^3}{3}. \end{cases} \qquad /30/$$

Заметим, что в правых частях соотношения /30/ стоят характерные параметры веществ, такие, как средняя энергия решетки $\hbar\omega_0$, электронная плотность v, плотность состояний на поверхности Ферми ρ_0 и т.п. Поэтому величины μ_0, Δ_0 и w_{s0} легко можно рассчитать для любого конкретного вещества. Так как щель в спектре элементарных возбуждений в рассматриваемой модели естественно определить как [25]

$$A = 2\Delta w^2, \qquad /31/$$

то в силу сделанного замечания $\eta \equiv A_0/\tilde{\theta}_c$ уже не является постоянной, одинаковой для всех веществ*, но в соответствии с /19/-/31/ может иметь разные значения для различных веществ. Укажем, что значительные отклонения от закона соответствующих состояний, предсказываемого стандартной теорией [2], наблюдаются экспериментально [3]. Так, для Zn $\eta = 3{,}2$, а для Hg $\eta = 4{,}6$. Как следует из /30/, величина w_{s0} не обязательно достигает

* В теории Боголюбова-БКШ величина $\eta = 3{,}52$ является универсальной постоянной.

единицы, т.е. и в основном состоянии сохраняется макроскопическая нормальная компонента, что должно сказаться на характере пространственного распределения электронной плотности при $\theta \approx 0$ [25].

Исследуем теперь вопрос об устойчивости решения, соответствующего случаю в/. С этой целью вычислим энергию основного состояния, т.е. свободную энергию при $\theta = 0$:

$$F_0 = \sum_{\vec{k} \leq \vec{k}_0} \left(\frac{\vec{k}^2}{2m} - \mu_0\right)(1 - w_0) + \frac{1}{2} \sum \left\{\left(\frac{\vec{k}^2}{2m} - \mu_0\right) w_0 + w_0^2 \Delta_0(\vec{k})\, \xi_0(\vec{k}) - E_0(\vec{k})\right\} + \mu_0 N,$$

где $\xi(\vec{k}) \equiv \langle \sigma_s^{\pm}(\vec{k}) \rangle$, $\vec{k}_0 = \sqrt{2m\mu_0}$. Вновь переходя к интегрированию, получаем:

$$F_0 = \frac{V}{2\pi^2 h^3}(1 - w_0)\left\{\frac{1}{2m}\,\frac{k_0^5}{5} - \frac{k_0^3}{3}\mu_0\right\} + \mu_0 N +$$

$$+ \frac{1}{2}\,\frac{V w_0}{2\pi^2 h^3}\left(\frac{k_+^5 + k_-^5}{10m} - \frac{k_+^3 + k_-^3}{3}\mu_0\right) - \frac{1}{2} V \rho_0 w_{s0}\, h\omega_0 \sqrt{(h\omega_0)^2 + \Delta_0^2 w_{s0}^2}\ .$$

Рассмотрим F_0 как функцию w_{s0}. Как нетрудно видеть, F_0 убывает с ростом w_{s0}, достигая наименьшего значения при $w_{s0} = 1$. В этом случае F_0 совпадает с энергией основного состояния в теории Боголюбова-БКШ. Так как значение $w_{s0} \equiv 1$ является возможным решением /случай б// и обладает меньшей энергией основного состояния, чем "гибридное решение", соответствующее случаю в/, то последнее неустойчиво. Таким образом, случай в/ может соответствовать лишь метастабильному двухжидкостному состоянию системы.

По-видимому, для стабилизации нормальной компоненты в низкотемпературной фазе необходимо расширить модельную задачу, включив в рассмотрение какие-либо дополнительные разупорядочивающие факторы, существующие в реальных сверхпроводниках. К таким физическим факторам в первую очередь относится кулоновское отталкивание электронов. К качественному рассмотрению эффектов, связанных с наличием такого отталкивания, мы теперь и перейдем.

4. МОДЕЛЬ С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

В случае системы с кулоновским отталкиванием полный гамильтониан системы имеет вид [25]:

$\tilde{H} = \tilde{H}_n \oplus \tilde{H}_s$,

$$\tilde{H}_i = \sum_{\vec{k}} w_i\, \epsilon(\vec{k})\, a_i^+(\vec{k})\, a_i^+(\vec{k}) - \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} w_i^2 J(\vec{k},\vec{k}')\, a_i^+(\vec{k})\, a_i^+(-\vec{k})\, a_i(-\vec{k}')\, a_i(\vec{k}') +$$

$$+ \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q} \neq 0} w_i^2\, U(\vec{q})\, \rho_i^+(\vec{q})\, \rho_i(\vec{q})\ . \qquad /32/$$

Здесь $U(\vec{q}) = 4\pi e^2/|\vec{q}|^2$. Оператор $\rho_i(\vec{q})$ описывает фурье-компоненту пространственной плотности электронов:

$$\rho_i(\vec{q}) \equiv \sum_{\vec{k},\sigma} a_i^+(\vec{k}+\vec{q}, \sigma)\, a_i(\vec{k}, \sigma).$$

Посмотрим сначала, к каким качественным изменениям должно привести включение кулоновского отталкивания. Для системы с гамильтонианом /32/ второе уравнение /9/ может быть представлено в следующей общей форме:

$$2w_s \sum_i \langle Q_i - I_i \rangle = \langle T_n - T_s \rangle + 2\langle Q_n - I_n \rangle\ . \qquad /33/$$

Здесь использованы обозначения:

$$T_i \equiv \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) \langle a_i^+(\vec{k})\, a_i(\vec{k}) \rangle\ ,$$

$$I_i \equiv \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} J(\vec{k},\vec{k}') \langle a_i^+(\vec{k})\, a_i^+(-\vec{k})\, a_i(-\vec{k}')\, a_i(\vec{k}') \rangle\ ,$$

$$Q_i \equiv \frac{1}{2V} \sum_{q \neq 0} U(\vec{q}) \langle \rho_i^+(\vec{q})\, \rho_i(\vec{q}) \rangle\ .$$

Так как средние в соотношении /32/ являются функциями температуры, это соотношение можно использовать для определения точки нуклеации, т.е. той температуры, ниже которой $w_s \equiv 1$, т.е. нормальная компонента полностью исчезает. Очевидно,

$$2\{Q_s(\theta_N) - I_s(\theta_N)\} = T_n(\theta_N) - T_s(\theta_N)\ . \qquad /34/$$

В точке нуклеации должен иметь место излом параметра порядка Δ и, по-видимому, скачок теплоемкости. В зависимости от соотношения между энергиями кулоновского отталкивания и эффективного притяжения температура θ_N может иметь разные значения. Характерно, что в феноменологических теориях всегда $\theta_N = 0$ [3]. Более того, при достаточно больших значениях энергии кулоновского отталкивания соотношение /34/ не выполняется ни при каких $\theta_N \geq 0$, т.е. даже основное состояние не становится чисто сверхпроводящим и сохраняет макроскопическую долю нормальных электронов. Нельзя, однако, однозначно ответить на вопрос о возможности реального существования такого частично разупорядоченного основного состояния в сверхпроводниках без детального количественного исследования, т.к. при достаточно сильном кулоновском отталкивании возникновение сверхпроводящего состояния в системе вообще невозможно [1,9].

Нормальная компонента в сверхпроводнике будет устойчивой в низкотемпературной фазе в модели с гамильтонианом /32/ в том случае, когда

$$2\sum_i (Q_i - I_i) + T'_s - T'_n + 2w_s \sum_i (Q'_i - I'_i) \geq 2(Q'_n - I'_n), \qquad /35/$$

где $X'_i \equiv \frac{d}{dw_s} X_i$. Исследование соотношения /35/ представляет собой весьма сложную математическую проблему и, к сожалению, может быть выполнено только приближенными методами, существующими в настоящее время для решения задач с кулоновским взаимодействием. Так как нас прежде всего интересует качественный результат, воспользуемся самым грубым приближением и заменим энергию кулоновского взаимодействия, приходящуюся на электрон, постоянной величиной $\frac{1}{2} Q$ /25/. В этом случае соотношение /35/ преобразуется к виду:

$$2QN - \frac{1}{4} Q^2 V \rho_0 w_0^2 - \Delta_0 \frac{V}{J} \geq 0.$$

/здесь для простоты рассматривается основное состояние/.

Ясно, что всегда можно выбрать Q так, чтобы это неравенство выполнялось. Таким образом, наличие достаточно сильного кулоновского отталкивания действительно приводит к стабилизации нормальной компоненты в низкотемпературной фазе. Более строгое рассмотрение эффектов кулоновского взаимодействия в модели /32/ представляет самостоятельную проблему и может служить темой отдельного исследования.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, использование неэквивалентных представлений алгебры локальных наблюдаемых для описания различных фазовых состояний позволяет построить микроскопическую двухжидкостную модель сверхпроводника, являющуюся обобщением модели Боголюбова-БКШ. В такой модели нормальная компонента стабилизируется в низкотемпературной фазе лишь при достаточно большой энергии кулоновского отталкивания. Иначе говоря, гетерофазное состояние возникает в этой системе в результате конкуренции между эффективным притяжением и кулоновским отталкиванием электронов. При слабом кулоновском отталкивании нормальная компонента может быть лишь метастабильной.

Рассмотренная модель сверхпроводника описывает возможные отклонения от закона соответственных состояний в теории Боголюбова-БКШ.

Исследование предложенной здесь модели позволяет предсказать возможность явления нуклеации при ненулевой температуре.

Авторы признательны академику Н.Н.Боголюбову за постоянное внимание к работе и поддержку. Мы также благодарны С.В.Пелетминскому, И.Р.Юхновскому за многочисленные полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Линтон Э.А. Сверхпроводимость. "Мир", М., 1971.
2. Шриффер Дж. Теория сверхпроводимости. "Наука", М., 1970.
3. Gorter C.J., Casimir B.G. Zs.Tech.Phys., 1934, 15, 12, p.539-542.
4. London F. Phys.Rev., 1948, 74, 5, p.562-573.
5. Сан-Жам Д., Сарма Г., Томас Е. Сверхпроводимость второго рода. "Мир", М., 1979.
6. Faber T.E. Proc.Roy. Soc., 1955, A231, c.353-367.
7. Faber T.E. Proc.Roy.Soc., 1957, A241, p.531-544.
8. Standenmann J.S. Sol.State Comm., 1978, 26, p.461-468.
9. Боголюбов Н.Н., Зубарев Д.Н., Церковников Ю.А. ДАН СССР, 1957, 117, 5, c.788-791.
10. Bogolubov N.N. Physica, 1960, 26, p.1-16.
11. Боголюбов Н.Н. ОИЯИ, Р-1451, Дубна, 1963.
12. Боголюбов Н.Н., Зубарев Д.Н., Церковников Ю.А. ЖЭТФ, 1960, 39, c.120-129.
13. Боголюбов Н.Н. ОИЯИ, Р-511, Дубна, 1960.
14. Боголюбов Н.Н. /мл./. Метод исследования модельных гамильтонианов. "Наука", М., 1974.
15. Haag R. Nuovo Cim., 1962, 25, p.287-299.
16. Эмх Ж. Алгебраические методы в статистической механике и квантовой теории поля. "Мир", М., 1976.
17. Thirring W., Wehrl A. Comm.Math.Phys., 1967, 4, p.303-314.
18. Bogolubov N.N. (Jr.). J.Math.Phys., 1973, 14, 1, p.79-83.
19. Боголюбов Н.Н. /мл./, Шумовский А.С. Труды Математического института АН СССР. "Наука", М., 1975, т.136, c.351-361.
20. Юкалов В.И. ТМФ, 1976, 26, c.403-413.
21. Юкалов В.И. ТМФ, 1976, 28, c.92-103.
22. Yukalov V.I. Physica, 1977, A89, p.363-372.
23. Yukalov V.I. Physica, 1981, 108A, p.404-416.
24. Шумовский А.С., Юкалов В.И. Проблема описания гетерофазных флуктуаций при фазовых переходах. В сб.: II Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики. ОИЯИ, Д17-81-758, Дубна, 1981, c.238-260.
25. Шумовский А.С., Юкалов В.И. ДАН СССР, 1982, 266, c.320-323.
26. Thirring W. Comm.Math.Phys., 1968, 7, p.181-189.
27. Jelinek F. Comm.Math.Phys., 1968, 9, p.169-175.
28. Фон Нейман И. Математические основы квантовой механики. "Наука", М., 1964.
29. Боголюбов Н.Н. О некоторых проблемах, связанных с обоснованием статистической механики. В сб.: II Международный

симпозиум по избранным проблемам статистической механики. ОИЯИ, Д17-81-758, Дубна, 1981, с. 9-18.
30. Шумовский А.С., Юкалов В.И. ДАН СССР, 1980, 252, с.581-583.
31. Shumovsky A.S., Yukalov V.I. Chem.Phys.Lett., 1981, 83, p.582-584.
32. Shumovsky A.S., Yukalov V.I. Physica, 1982, 110A, p.518-534.
33. Кудрявцев И.К., Шумовский А.С., Юкалов В.И. О модели гидридного антиферромагнетика. В сб.: II Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики. ОИЯИ, Д17-81-758, Дубна, 1981, с.318-325.
34. Шумовский А.С. Строгие результаты для квазиспиновых моделей в статистической механике. В сб.: Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики. ОИЯИ, Д17-11490, Дубна, 1978, с.168-183.
35. Боголюбов Н.Н. ЖЭТФ, 1958, 34, с.73-79.
36. Anderson P.V. Phys.Rev., 1958, 110, p.985-986.
37. Bogolubov N.N. (Jr.), Shumovsky A.S. Indian J.Pure and Appl.Phys., 1970, 8, p.121-126.
38. Боголюбов Н.Н. /мл./, Шумовская А.Г., Шумовский А.С. ТМФ, 1976, с.388-393.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 февраля 1984 года.

Боголюбов Н.Н. /мл./, Шумовский А.С., Ярославцев В.И. Р17-84-52

Неэквивалентные представления алгебры наблюдаемых в микроскопической двухжидкостной модели сверхпроводника

На основе подхода, использующего неэквивалентные представления алгебры локальных наблюдаемых для описания различных фазовых состояний, построена микроскопическая двухжидкостная модель сверхпроводника, являющаяся обобщением модели Боголюбова - БКШ. Обычный /щель/ и дополнительный /фазовая концентрация/ параметры порядка определены самосогласованным образом как функции температуры и параметров взаимодействия. Указана возможность отклонения от закона соответственных состояний в теории Боголюбова - БКШ. Предсказана допустимость явления нуклеации при ненулевой температуре. Рассмотрено влияние кулоновского взаимодействия между электронами на стабилизацию нормальной компоненты.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Bogolubov N.N. (Jr.), Shumovskij A.S., Yaroslavtsev V.I. P17-84-52

Non-Equivalent Representations of the Algebra of the Observable in the Microscopic Two-Liquid Model for a Superconductor

The microscopic two-liquid model for a superconductor is constructed using the non-equivalent representations of the algebra of the local observable for different phase states. General (gap) and additional (phase concentration) order parameters are determined as a functions of temperature and interaction parameters by means of the self-consistent method. The opportunity is pointed to of deviation from the law of corresponding states. The phenomenon of nucleation for non-zero temperature is predicted. Influence of the Coulomb interaction between electrons on the stabilization of normal component is studied.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984