СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

P17 - 9773

Н.Н.Боголюбов (мл.), А.Н.Ермилов, А.М.Курбатов

К ВОПРОСУ О СОСУЩЕСТВОВАНИИ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ И ФЕРРОМАГНЕТИЗМА.

II. Параметры порядка

1976

P17 - 9773

Н.Н.Боголюбов (мл.), А.Н.Ермилов, А.М.Курбатов

К ВОПРОСУ О СОСУЩЕСТВОВАНИИ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ И ФЕРРОМАГНЕТИЗМА.

II. Параметры порядка

§1. ВВЕДЕНИЕ

В теории твердого тела существенный интерес представляет явление совместного существования сверхпроводимости и ферромагнетизма в сверхпроводящих сплавах с магнитными примесями. Экспериментально было установлено, что такое совместное существование возможно.

Здесь мы продолжим начатое в работе [9] исследование модели такого сплава, являющейся комбинацией модели БКШ для сверхпроводника и s–d–обменной модели Вонсовского-Зинера для ферромагнетика [4,6–8]:

$$H = \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k - \mu) a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} - (V/N) \sum_{k,k'} a_{k+} a_{-k-} a_{-k'-} a_{k'+} - (J/N) \times$$
$$\times \sum_k \sum_{m=1}^{cN} [(a^+_{k+} a_{k+} - a^+_{k-} a_{k-}) S^z_m + a^+_{k+} a_{k-} S^-_m + a^+_{k-} a_{k+} S^+_m], \quad (1)$$

Введя следующие обозначения:

$$S^{\pm} = \frac{1}{cN} \sum_{m=1}^{cN} S^{\pm}_m, \qquad S_z = \frac{1}{cN} \sum_{m=1}^{cN} S^z_m, \quad (2)$$

$$M^+ = M_{12} = \frac{1}{N} \sum_k a^+_{k+} a_{k-}, \quad M^- = (M^+)^+,$$
$$M_z = \frac{1}{2}(M_{11} - M_{22}) = \frac{1}{2N} \sum_k (a^+_{k+} a_{k+} - a^+_{k-} a_{k-}), \quad (3)$$

$$A = \frac{1}{N} \sum_k a^+_{k+} a^+_{-k-}, \quad (4)$$

$$T = \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k - \mu) a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}, \quad (5)$$

гамильтониан (1) можно переписать в виде

$$H=T-VNA\,A^{+}-JcN(S^{-}M^{+}+S^{+}M^{-}+2S_zM_z). \qquad (6)$$

В отличие от всех ранее проводимых исследований [5] вопроса существования сверхпроводимости и ферромагнетизма, в предлагаемой работе задача решается точно на основе метода аппроксимирующих гамильтонианов [1,2]. В работе [9] построен аппроксимирующий гамильтониан

$$\begin{aligned}H_{\epsilon 0}(a,s,s_z,m,m_z)&=T-VN[aA^{+}+a^{+}A-aa^{+}]-\\&-JcN[s(\epsilon S^{+}+\frac{1}{\epsilon}M^{+})+s^{+}(\epsilon S^{-}+\frac{1}{\epsilon}M^{-})-ss^{+}+\\&+2s_z(\epsilon S_z+\frac{1}{\epsilon}M_z)-s_z^2]+JcN\frac{1}{\epsilon^2}[mM^{+}+m^{+}M^{-}-\\&-mm^{+}+2m_zM_z-m_z^2],\end{aligned} \qquad (7)$$

зависящий от положительного параметра ϵ. Показано, что разность свободных энергий для гамильтонианов (1) и (7) стремится к нулю в термодинамическом пределе при $\epsilon\to+0$

$$\lim_{\epsilon\to 0}\lim_{N\to\infty}\{f_N[H_{\epsilon 0}(\bar{a},\bar{s},\bar{m})]-f_N[H]\}=0, \qquad (8)$$

причем постоянные a, s, s_z, m, m_z должны быть определены из условия:

$$f_N[H_{\epsilon 0}(\bar{a},\bar{s},\bar{m})]=\min_{a,s}\max_{m} f_N[H_{\epsilon 0}(a,s,m)]. \qquad (9)$$

§2. ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ АППРОКСИМИРУЮЩЕГО ГАМИЛЬТОНИАНА И ВЫЧИСЛЕНИЕ ЕГО СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ

Займемся сначала диагонализацией лишь той части аппроксимирующего гамильтониана, которая содержит

операторы магнитных моментов примеси

$$\begin{aligned}H^{(1)}_{\epsilon 0}(s)&=-JcN\,\epsilon[sS^{+}+s^{+}S^{-}+2s_zS_z-\frac{1}{\epsilon}ss^{+}-\frac{1}{\epsilon}s_z^2]=\\&=-J\epsilon\sum_{m=1}^{cN}[s\,S_m^{+}+s^{+}S_m^{-}+2s_zS_m^{z}]+JcN(ss^{+}+s_z^2).\end{aligned} \qquad (10)$$

Как операторы момента количества движения $S_m^{\pm}$ и S_m^{z} удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$\begin{aligned}&[S_m^{+},S_n^{-}]_-=2S_m^{z}\delta_{mn}, \quad [S_m^{z},S_n^{+}]=S_m^{+}\delta_{mn},\\&[S_m^{z},S_n^{-}]=-S_m^{-}\delta_{mn}.\end{aligned} \qquad (11)$$

Ограничимся далее случаем $S=1/2$. Тогда операторы $S_m^{\pm}$ являются операторами Паули:

$$\begin{aligned}&S_m^{z}=\frac{1}{2}-S_m^{-}S_m^{+}, \quad S_m^{z}S_m^{z}=1/4,\\&S_m^{+}S_m^{-}+S_m^{-}S_m^{+}=1, \quad S_m^{+}S_m^{+}=0, \quad S_m^{-}S_m^{-}=0.\end{aligned} \qquad (12)$$

Из (11) и (12) легко получить соотношения

$$S_m^{-}S_m^{z}=\frac{1}{2}S_m^{-},\ S_m^{z}S_m^{+}=\frac{1}{2}S_m^{+},\ S_m^{\pm}S_m^{z}+S_m^{z}S_m^{\pm}=0, \qquad (13)$$

которые будут полезны нам в дальнейшем.

Введем новые операторы

$$\begin{aligned}&\beta_m=u^2S_m^{-}-v^2S_m^{+}-2uvS_m^{z},\\&\beta_m^{+}=\overset{+}{u}{}^2S_m^{+}-\overset{+}{v}{}^2S_m^{-}-2\overset{+}{u}\overset{+}{v}S_m^{z}.\end{aligned} \qquad (14)$$

Найдем необходимое и достаточное условие того, чтобы преобразование (14) было каноническим, то есть, чтобы операторы β_m и β_m^{+} были также операторами Паули. Равенства

$$\beta_m\beta_n-\beta_n\beta_m=0, \quad \beta_m^{+}\beta_n^{+}-\beta_n^{+}\beta_m=0, \quad (m\neq n)$$

выполняются тривиально. Далее

$$\beta_m\beta_m = (\beta_m^+\beta_m^+)^+ = u^4 S_m^- S_m^- - u^2 v^2 S_m^- S_m^+ - 2u^3 v S_m^- S_m^z -$$
$$-u^2 v^2 S_m^+ S_m^- + v^4 S_m^+ S_m^+ + 2uv^3 S_m^+ S_m^z - 2u^3 v S_m^z S_m^- +$$
$$+2uv^3 S_m^z S_m^+ + 4u^2v^2 S_m^z S_m^z = -u^2v^2 + u^2v^2 = 0,$$

причем были использованы соотношения (12) и (13).

С другой стороны,

$$\beta_m\beta_m^+ = |u|^4 S_m^- S_m^+ - u^2 \overset{+}{v}{}^2 S_m^- S_m^+ - 2|u|^2 u\overset{+}{v} S_m^- S_m^z -$$
$$-\overset{+}{u}{}^2 v^2 S_m^+ S_m^+ + |v|^4 S_m^+ S_m^- + 2\overset{+}{u} v|v|^2 S_m^+ S_m^z - 2|u|^2 \overset{+}{u} v S_m^z S_m^+ +$$
$$+2u\overset{+}{v}|v|^2 S_m^z S_m^- + 4|u|^2|v|^2 S_m^z S_m^z,$$

$$\beta_m^+\beta_m = |u|^4 S_m^+S_m^- + |v|^4 S_m^- S_m^+ + 2\overset{+}{u} v|v|^2 S_m^z S_m^+ - 2|u|^2 \overset{+}{u} v S_m^+ S_m^z -$$
$$-2|u|^2 u\overset{+}{v} S_m^z S_m^- + 2u\overset{+}{v}|v|^2 S_m^- S_m^z + 4|u|^2|v|^2 S_m^z S_m^z;$$

учитывая (12) и (13), имеем

$$\beta_m^+\beta_m + \beta_m\beta_m^+ = |u|^4+|v|^4+2|u|^2|v|^2 = (|u|^2+|v|^2)^2.$$

Таким образом, преобразование (14) является каноническоим тогда и только тогда, когда

$$|u|^2+|v|^2=1. \qquad (15)$$

Запишем s в виде

$$s=|s|e^{i\phi}, \quad s^+=|s|e^{-i\phi} \qquad (16)$$

и выберем

$$u=\frac{1}{\sqrt2}\sqrt{1+\frac{2s_z}{E}},\quad v=e^{i\phi}\frac{1}{\sqrt2}\sqrt{1-\frac{2s_z}{E}},\ E=2\sqrt{ss^++s_z^2}; \qquad (17)$$

ясно, что условие каноничности (15) выполняется.

Имеем:

$$E\beta_m^+\beta_m = E\{(\frac12+\frac{s_z}{E})^2 S_m^+S_m^- + (\frac12-\frac{s_z}{E})^2 S_m^- S_m^+ +$$
$$+2\sqrt{\frac14-\frac{s_z^2}{E^2}}\cdot e^{i\phi}\,[(\frac12-\frac{s_z}{E})S_m^z S_m^+ - (\frac12+\frac{s_z}{E})S_m^+S_m^z]+$$
$$+2\sqrt{\frac14-\frac{s_z^2}{E^2}}\, e^{-i\phi}[(\frac12-\frac{s_z}{E})S_m^- S_m^z - (\frac12+\frac{s_z}{E})S_m^z S_m^-]+$$
$$+(\frac14-\frac{s_z^2}{E^2})\} = |s|e^{i\phi}S_m^+ + |s|e^{-i\phi}S_m^- + 2s_zS_m^z + \frac12 E =$$
$$= sS_m^+ + s^+S_m^- + 2s_zS_m^z + \sqrt{ss^++s_z^2}.$$

Таким образом, гамильтониан (10) при каноническом преобразовании (14), (17) диагонализуется и

$$H^{(1)}_{\epsilon 0} = -J\epsilon\sum_{m=1}^{cN}[sS_m^+ + s^+S_m^- + 2s_zS_m^z + \sqrt{ss^++s_z^2}]+$$
$$+JcN\epsilon\sqrt{ss^++s_z^2} + JcN(ss^++s_z^2) = -J\sum_{m=1}^{cN}\{\epsilon\sqrt{ss^++s_z^2}\,\beta_m^+\beta_m -$$
$$-[(ss^++s_z^2)+\epsilon\sqrt{ss^++s_z^2}]\}. \qquad (18)$$

Приступим теперь к диагонализации оставшейся части гамильтониана

$$H^{(2)}_{\epsilon 0}(a,s,m) = \sum_k\{T(k)(a_{k+}^+a_{k+} + a_{k-}^+a_{k-}) - Vaa_{k-}a_{-k+} -$$
$$-Va^+a_{k+}^+a_{-k-}^+ + Jc(\frac{m}{\epsilon^2}-\frac{s}{\epsilon})a_{k+}^+a_{k-} + Jc(\frac{m^+}{\epsilon^2}-\frac{s^+}{\epsilon})a_{k-}^+a_{k+} +$$
$$+Jc(\frac{m_z}{\epsilon^2}-\frac{s_z}{\epsilon^2})(a_{k+}^+a_{k+}-a_{k-}^+a_{k-}) + Vaa^+ - \frac{Jc}{\epsilon^2}(mm^++m_z^2).$$

Используя следующие обозначения:

$$A(k\nu,n\mu)=[T(k)+J(\frac{m_z}{\epsilon 2}-\frac{s_z}{\epsilon})\epsilon(\nu)]\Delta(k-n)\Delta(\nu-\mu)+$$

$$+[J(\frac{m}{\epsilon^2}-\frac{s}{\epsilon})\theta(\nu)+J(\frac{m^+}{\epsilon^2}-\frac{s^+}{\epsilon})\theta(-\nu)]\Delta(k-n)\Delta(\nu+\mu), \qquad (20)$$

$$B_1(k\nu,n\mu)=-Va^+\theta(\nu)\Delta(k+n)\Delta(\nu+\mu),$$

$$B_2(k\nu,n\mu)=-Va\,\theta(-\nu)\Delta(k+n)\Delta(\nu+\mu),$$

где $\theta(+1/2)=1$, $\theta(-1/2)=0$, $\epsilon(\alpha)=\theta(\alpha)-\theta(-\alpha)$,

выражение (19) можно переписать в виде

$$H^{(2)}_{\epsilon 0}(a,s,m)=\sum_{k\nu,n\mu}A(k\nu,n\mu)a^+_{k\nu}a_{n\mu}+\sum_{k\nu,n\mu}B_1(k\nu,n\mu)a^+_{k\nu}a^+_{n\mu}+ \qquad (21)$$

$$+\sum_{k\nu,n\mu}B_2(k\nu,n\mu)a_{k\nu}a_{n\mu}.$$

Перейдем к новым переменным

$$a_{k\nu}=\sum_{n\mu}\{u(k\nu,n\mu)\alpha_{n\mu}+v(k\nu,n\mu)\alpha^+_{n\mu}\}$$

$$(22)$$

$$a^+_{k\nu}=\sum_{n\mu}\{\overset{+}{u}(k\nu,n\mu)\alpha^+_{n\mu}+v(k\nu,u\mu)\alpha_{n\mu}\}.$$

Как было показано в работе /3/, условиями каноничности преобразования (22) являются соотношения ортонормированности

$$\sum_{n\mu}\{u(k\nu,n\mu)\overset{+}{u}(p\eta,n\mu)+v(k\nu,n\mu)\overset{+}{v}(p\eta,n\mu)\}=\Delta(k-p)\Delta(\nu-\eta)$$

$$(23)$$

$$\sum_{n\mu}\{u(k\nu,n\mu)v(p\eta,n\mu)+u(p\eta,n\mu)v(k\nu,n\mu)\}=0$$

или

$$\sum_{n\mu}\{\overset{+}{u}(n\mu,k\nu)u(n\mu,p\eta)+\overset{+}{v}(n\mu,k\nu)v(n\mu,p\eta)\}=\Delta(k-p)\Delta(\nu-\eta)$$

$$(24)$$

$$\sum_{n\mu}\{\overset{+}{u}(n\mu,k\nu)v(n\mu,p\eta)+v(n\mu,k\nu)\overset{+}{u}(n\mu,p\eta)\}=0.$$

Для того чтобы преобразование (22) диагонализовало гамильтониан (21), необходимо и достаточно, чтобы функции u и v удовлетворяли следующей системе уравнений:

$$\begin{cases} E(k\nu)u(p\eta,k\nu)=\sum_{n\mu}\{A(p\eta,n\mu)u(n\mu,k\nu)+B(p\eta,n\mu)\overset{+}{v}(n\mu,k\nu)\} \\ -E(k\nu)v(p\eta,k\nu)=\sum_{n\mu}\{A(p\eta,n\mu)v(n\mu,k\nu)+B(p\eta,n\mu)\overset{+}{u}(n\mu,k\nu)\}, \end{cases}$$

где

$$B(p\eta,n\mu)=B_1(p\eta,n\mu)-B_2^+(p\eta,n\mu).$$

k, n, p пробегают все N блоховских состояний с одинаковым направлением спина в зоне проводимости, ν, $\mu,\eta=+1/2,-1/2$. Вводя обозначения

$$R(k\nu)=T(k)+Jc(\frac{m_z}{\epsilon 2}-\frac{s_z}{\epsilon})\epsilon(\nu)=T(k)+X\epsilon(\nu)$$

$$(25)$$

$$Q(\nu)=Jc(\frac{m}{\epsilon 2}-\frac{s}{\epsilon})\theta(\nu)+Jc(\frac{m^+}{\epsilon^2}-\frac{s^+}{\epsilon})\theta(-\nu)=Y\theta(\nu)+Y^+\theta(-\nu)$$

$$P(\nu)=-Va^+\epsilon(\nu)=-Z\epsilon(\nu),$$

и принимая во внимание (20), эту систему можно записать в виде

$$\begin{cases} E(k\nu)u(p\eta,k\nu)=R(p\eta)u(p\eta,k\nu)+Q(\eta)u(p-\eta,k\nu)+P(\eta)\overset{+}{v}(-p-\eta,k\nu) \\ -E(k\nu)v(p\eta,k\nu)=R(p\eta)v(p\eta,k\nu)+Q(\eta)v(p-\eta,k\nu)+P(\eta)\overset{+}{u}(-p-\eta,k\nu). \end{cases} \qquad (26)$$

Будем искать такое решение системы (26), что отличными от нуля могут быть лишь следующие функции u и v:

$u(k\nu,k\nu)$, $u(k-\nu,k\nu)$, $v(-k\nu,k\nu)$, $v(-k-\nu,k\nu)$

для любых k и любых ν. В таком случае система уравнений (26) распадается на N независимых подсистем

$$
\begin{cases}
E(k\nu)u(k\nu,k\nu)=R(k\nu)u(k\nu,k\nu)+Q(\nu)u(k-\nu,k\nu)+ \\
\qquad +P(\nu)\overset{+}{v}(-k-\nu,k\nu) \\
E(k\nu)u(k-\nu,k\nu)=R(k-\nu)u(k-\nu,k\nu)+Q(-\nu)u(k\nu,k\nu)\nu+ \\
\qquad +P(-\nu)\overset{+}{v}(-k\nu,k\nu) \\
-E(k\nu)v(-k\nu,k\nu)=R(-k\nu)v(-k\nu k\nu)+Q(\nu)v(-k-\nu,k\nu)+P(\nu)\overset{+}{u}(k-\nu,k\nu) \\
-E(k\nu)bv(-k-\nu,k\nu)=R(-k-\nu)v(-k-\nu,k\nu)+Q(-\nu)v(-k\nu,k\nu)+ \\
\qquad +P(-\nu)\overset{+}{u}(k\nu,k\nu),
\end{cases}
\tag{27}
$$

где k и ν уже фиксированы. Дополнив уравнения (27) комплексно сопряженными, выпишем определитель системы

$u_{k\nu}$	$u_{k-\nu}$	$v_{-k\nu}$	$v_{-k-\nu}$	$u^{+}_{k\nu}$	$u^{+}_{k-\nu}$	$v^{+}_{-k\nu}$	$v^{+}_{-k-\nu}$
$(R-E)_{k\nu}$	Q_{ν}						P_{ν}
$Q_{-\nu}$	$(R-E)_{k-\nu}$					$P_{-\nu}$	
		$(R+E)_{-k\nu}$	Q_{ν}		P_{ν}		
		$Q_{-\nu}$	$(R+E)_{-k-\nu}$	$P_{-\nu}$			
			P^{+}_{ν}	$(R^{+}-E)_{k\nu}$	Q^{+}_{ν}		
		$P^{+}_{-\nu}$		$Q^{+}_{-\nu}$	$(R^{+}-E)_{k-\nu}$		
	P^{+}_{ν}					$(R^{+}+E)_{-k\nu}$	Q^{+}_{ν}
$P^{+}_{-\nu}$						$Q^{+}_{-\nu}$	$(R^{+}+E)_{-k-\nu}$

Для вычисления определителя умножим восьмую строку на $\dfrac{R(k\nu)-E(k\nu)}{P^{+}(-\nu)}$ и вычтем ее из первой, затем умножим восьмую строку на $\dfrac{Q(-\nu)}{P^{+}(-\nu)}$ и вычтем ее из второй, далее умножим седьмую строку на $\dfrac{Q(\nu)}{P^{+}(\nu)}$ и вычтем ее из первой и, наконец, умножим седьмую строку на $\dfrac{R(k-\nu)-E(k\nu)}{P^{+}(\nu)}$ и вычтем ее из второй. После выполнения указанных операций первые две строки примут вид

						x_1	y_1
						z_1	t_1

,

где

$$x_1=-\frac{Q^{+}(-\nu)[R(k\nu)-E(k\nu)]}{P^{+}(-\nu)},$$

$$y_1=P(\nu)-\frac{[R^{+}(-k-\nu)+E(k\nu)][R(k\nu)-E(k\nu)]}{P^{+}(-\nu)},$$

$$z_1=P(-\nu)-\frac{Q(-\nu)Q(-\nu)}{P(-\nu)},$$

$$t_1=-\frac{[R^{+}(-k-\nu)+E(k\nu)]Q(-\nu)}{P^{+}(-\nu)}.$$

Проводя аналогичные вычисления, третью и четвертую строки можно привести к следующему виду:

				x_2	y_2		
				z_2	z_2		

Тогда уравнение для определения $E(k,\nu)$ запишется в виде

$$\delta_1\cdot\delta_2\cdot[P^{+}(\nu)]^2\cdot[P^{+}(-\nu)]^2=0,$$

где

$$\delta_1 = \begin{vmatrix} x_1 & y_1 \\ z_1 & t_1 \end{vmatrix} \qquad \delta_2 = \begin{vmatrix} x_2 & y_2 \\ z_2 & t_2 \end{vmatrix} .$$

Исследуем возможность $\delta_1 \cdot [P^+(\nu)]^2 = 0$.

Значения $\nu = 1/2$ и $\nu = -1/2$ дают одно и то же уравнение

$$[\overset{+}{Y}(T(k) - X - E(k\nu)) - \overset{+}{Y}(T(k) - X + E(k\nu))] \times$$

$$\times [Y(T(k) + X + E(k\nu)) - Y(T(k) + X - E(k\nu))] -$$

$$-[ZZ^+ + (T(k) + X + E(k\nu))(T(k) - X - E(k\nu)) - YY^+] \tag{28}$$

$$\times[-ZZ^+ - (T(k) - X - E(k\nu))(T(k) + X - E(k\nu)) - YY^+] = 0,$$

где учтено, что $T(-k) = T(k)$ и $\overset{+}{T}(k) = T(k)$; или

$$YY^+[-2E(k\nu)][2E(k\nu)] - [|Z|^2 + (T^2(k) - (X - E(k\nu))^2) -$$

$$-|Y|^2] [-|Z|^2 - (T^2(k) - (X - E(k\nu))^2) + |Y|^2] = 0.$$

Выполняя простые алгебраические преобразования, получим

$$[E^2(k\nu) + |Y|^2 + X^2 - |Z|^2 - T^2(k)] - 4[|Y| + X^2]E^2(k\nu) = 0,$$

или

$$E^4(k\nu) - 2[|Y|^2 + X^2 + |Z|^2 + T^2(k)]E^2(k\nu) +$$

$$+ [|Y|^2 + X^2 - |Z|^2 - T^2(k)]^2 = 0,$$

откуда

$$E_{1-4}(k\nu) = \pm\{[T^2(k) + |Z|^2]^{1/2} \pm [X + |Y|^2]^{1/2}\}. \tag{29}$$

Исходя из условий каноничности (23), (24) легко выбрать из четырех решений (29) нужные, входящие в диагонализованный гамильтониан,

$$H^{(2)}_{\epsilon 0}(a,s,m) = \sum_k E(k+)\alpha^+_{k+}\alpha_{k+} + \sum_k E(k-)\alpha^+_{k-}\alpha_{k-} + \sum_k G(k), \tag{30}$$

где $G(k)$- с-числа; а именно

$$E(k+) = [T^2(k) + V^2 a a^+]^{1/2} + Jc[(\frac{m}{\epsilon^2} - \frac{s}{\epsilon})(\frac{m^+}{\epsilon^2} - \frac{s^+}{\epsilon}) +$$

$$+ (\frac{m_z}{\epsilon^2} - \frac{s_z}{\epsilon})^2]^{1/2}, \tag{31}$$

$$E(k-) = [T^2(k) + V^2 aa^+]^{1/2} - Jc[(\frac{m}{\epsilon^2} - \frac{s}{\epsilon})(\frac{m^+}{\epsilon^2} - \frac{s^+}{\epsilon}) + (\frac{m_z}{\epsilon^2} - \frac{s_z}{\epsilon})^2]^{1/2},$$

где мы учли соотношения (25).

Возможность

$$\delta_2 \cdot [P^+(-\alpha)]^2 = 0$$

дает то же самое уравнение (28).

Для того, чтобы определить свободный член в (30), нужно, зная $E(k,\nu)$ (31), решить системы уравнений (28) относительно функций u и v, затем нормировать эти решения с помощью условий (23) или (24) и затем, подставив (22) в (19), вычислить $G(k)$. Однако этот путь сопряжен с большими вычислительными трудностями. Поэтому поступим иначе. Подставим в (30) выражения $\alpha_{k\nu}$ через $a_{n\mu}$ /3/

$$\alpha_{k\nu} = \overset{+}{u}(k\nu, k\nu)a_{k\nu} + \overset{+}{u}(k-\nu, k\nu)a_{k-\nu} + v(-k\nu, k\nu)a^+_{-k\nu} +$$

$$+ v(-k-\nu, k\nu)a^+_{-k-\nu},$$

$$\alpha^+_{k\nu} = u(k\nu, k\nu)a^+_{k\nu} + u(k-\nu, k\nu)a^+_{k-\nu} + \overset{+}{v}(-k\nu, k\nu)a_{-k\nu} +$$

$$+ \overset{+}{v}(-k-\nu, k\nu)a_{-k-\nu}.$$

После простых вычислений получаем

$$H^2_{\epsilon 0}(a,s,m) = \sum_k \{[[|u(k+,k+)|^2 - |v(k+,-k+)|^2]E(k+) +$$

$$+[|u(k+,k-)|^2 - |v(k+,-k-)|^2]E(k-)]a^+_{k+}a_{k+} + [[|u(k-,k+)|^2 -$$

$$-|v(k-,-k+)|^2]E(k+) + [|u(k-,k-)|^2 - |v(k-,-k-)|^2]E(k-)]\times$$

$$\times a^+_{k-} a_{k-} + J(a^{\#}_{k\nu} a^{\#}_{n\mu}) + [|v(k+,-k+)|^2 + |v(k-,-k+)|^2] E(k+) +$$

$$+[|v(k+,-k-)|^2 + |v(k-,-k-)|^2] E(k-) + G(k),$$

где через $J(a^{\#}_{k\nu} a^{\#}_{n\mu})$ обозначены все квадратичные по $a^{\#}_{k\nu}$ недиагональные члены.

Сравнивая полученный результат с (19), имеем

$$\left\{\begin{aligned}
&[|u(k+,k+)|^2 - |v(k+,-k+)|^2] E(k+) + [|u(k+,k-)|^2 - |v(k+,-k-)|^2] E(k-) = \\
&= T(k) + X \\
&[|u(k-,k+)|^2 - |v(k-,-k+)|^2] E(k+) + [|u(k-,k-)|^2 - |v(k-,-k-)|^2] \times \\
&\times E(k-) = T(k) - X \\
&[|v(k+,-k+)|^2 + |v(k-,-k+)|^2] E(k+) + [|v(k+,-k-)|^2 + |v(k-,-k-)|^2] \times \\
&\times E(k-) + G(k) = V aa^+ - \frac{Jc}{\epsilon^2}(mm^+ + m_z^2).
\end{aligned}\right. \qquad (32)$$

Присовокупим к этой системе первое из уравнений (24) для случая $p=k$, $\eta=\nu$ при $\nu=\pm 1/2$

$$\left\{\begin{aligned}
&|u(k+,k+)|^2 + |u(k-,k+)|^2 + |v(-k,+,k+)|^2 + |v(-k-,k+)|^2 = 1 \\
&|u(k+,k-)|^2 + |u(k-,k-)|^2 + |v(-k+,k-)|^2 + |v(-k-,k-)|^2 = 1.
\end{aligned}\right. \qquad (33)$$

Складывая первое и второе уравнения (33), получим

$$M(k) - L(k) = 2T(k). \qquad (34)$$

Умножив первое уравнение (33) на $E(k,+)$ и сложив со вторым, умноженным на $E(k,-)$, имеем

$$M(k) + L(k) = E(k+) + E(k-), \qquad (35)$$

где для краткости введены следующие обозначения:

$$M(k) = [|u(k+,k+)|^2 + |u(k-,k+)|^2] E(k+) + [|u(k+,k-)|^2 + |u(k-,k-)|^2] \times E(k-)$$

$$L(k) = [|v(k+,-k+)|^2 + |v(k-,-k+)|^2] E(k+) + [|v(k+,-k-)|^2 + |v(k-,-k-)|^2] \times E(k-).$$

Последнее уравнение (32) в этих обозначениях имеет вид

$$L(k) + G(k) = V aa^+ - \frac{Jc}{\epsilon^2}(mm^+ + m_z^2). \qquad (36)$$

Из (34)-(36) находим

$$G(k) = T(k) - \frac{1}{2}[E(k+) + E(k-)] + V aa^+ - \frac{Jc}{\epsilon^2}(mm^+ + m_z^2) =$$
$$= T(k) - [T^2(k) + V^2 aa^+]^{1/2} + V aa^+ - \frac{Jc}{\epsilon^2}(mm^+ + m_z^2). \qquad (37)$$

Таким образом, при помощи канонических преобразований (14), (22) гамильтониан $H_{\epsilon 0}(a,s,m) = H^{(1)}_{\epsilon 0}(s) + H^{(2)}_{\epsilon 0}(a,s,m)$ диагонализуется:

$$H_{\epsilon 0}(a,s,m) = \sum_{m=1}^{cN} (-J)\{\epsilon E \beta^+_m \beta_m - [ss^+ + s_z^2 + \epsilon\sqrt{ss^+ + s_z^2}]\} +$$
$$+ \sum_k \{E(k+)\alpha^+_{k+}\alpha_{k+} + E(k-)\alpha^+_{k-}\alpha_{k-} + T(k) - [T^2(k) + \qquad (38)$$
$$+ V^2 aa^+]^{1/2} + V aa^+ - \frac{Jc}{\epsilon^2}(mm^+ + m_z^2)\}.$$

Вычислим теперь значение свободной энергии

$$f_N[H_{\epsilon 0}(a,s,m)] = -\frac{\theta}{N} \ln \mathrm{Sp}\, e^{-\frac{H_{\epsilon 0}(a,s,m)}{\theta}} = -\frac{\theta}{N} \ln Q$$

$$Q = \mathrm{Sp}\, e^{-\frac{H_{\epsilon 0}(a,s,m)}{\theta}} =$$
$$= \sum_{\ldots, n_m, \ldots, n_{k\nu}, \ldots} \{ e^{-\frac{\sum_m (-J)\{\epsilon E n_m - [ss^+ + s_z^2 + \epsilon\sqrt{ss^+ + s_z^2}]\} + \sum_{k,\nu}\{E(k\nu) n_{k\nu} + \frac{1}{2} G(k)\}}{\theta}} \},$$

где m пробегает значения от 1 до N, ν – 1 и 2, k – по всем значениям импульсов блоховских состояний с одинаковым направлением спина в зоне проводимости. Далее

$$Q = \sum_{\ldots, n_m, \ldots, n_{k\nu}, \ldots} \{ \prod_m e^{-\frac{(-J)\{\epsilon E n_m - [(\frac{1}{2}E)^2 + \frac{1}{2}\epsilon E]\}}{\theta}} \prod_{k,\nu} e^{-\frac{E(k\nu) n_{k\nu} + \frac{1}{2} G(k)}{\theta}} \} =$$

$$
=\prod_m \Big\{ \sum_{n_m} e^{-\frac{(-J)\{\epsilon E n_m - [(\frac{1}{2}E)^2 + \frac{1}{2}\epsilon E]\}}{\theta}} \Big\} \cdot \prod_{k,\nu} \Big\{ \sum_{n_{k\nu}} e^{-\frac{E(k\nu) n_{n\nu} + \frac{1}{2}G(k)}{\theta}} \Big\} =
$$

$$
= \Big\{ e^{-\frac{J[(\frac{1}{2}E)^2 + \frac{1}{2}\epsilon E]}{\theta}} \Big\}^{cN} \Big\{ 1 + e^{\frac{J\epsilon E}{\theta}} \Big\}^{cN} \cdot \prod_k \Big\{ e^{-\frac{G(k)}{\theta}} \Big\} \times
$$

$$
\times \prod_{k,\nu} \Big\{ 1 + e^{-\frac{E(k,\nu)}{\theta}} \Big\}.
$$

Отсюда получаем выражение для свободной энергии

$$
\begin{aligned}
f_N [H_{\epsilon 0}(a,s,m)] &= Jc[(ss^+ + s_z^2) + \epsilon (ss^+ + s_z^2)^{1/2}] - \theta c \ln \Big\{ 1 + \\
&+ e^{\frac{2J\epsilon (ss^+ + s_z^2)^{1/2}}{\theta}} \Big\} + \frac{1}{N} \sum_k \{ T(k) - [T^2(k) + V^2 aa^+]^{1/2} \} + V aa^+ - \qquad (39) \\
&- \frac{Jc}{\epsilon^2}(mm^+ + m_z^2) - \frac{\theta}{N} \sum_k \ln \Big\{ 1 + \\
&+ e^{-\frac{[T^2(k) + V^2 aa^+]^{1/2} + Jc[(\frac{m}{\epsilon^2} - \frac{s}{\epsilon})(\frac{m^+}{\epsilon^2} - \frac{s^+}{\epsilon}) + (\frac{m_z}{\epsilon^2} - \frac{s_z}{\epsilon})^2]^{1/2}}{\theta}} \Big\} - \frac{\theta}{N} \sum_k \ln \Big\{ 1 + \\
&+ e^{-\frac{[T^2(k) + V^2 aa^+]^{1/2} - Jc[(\frac{m}{\epsilon^2} - \frac{s}{\epsilon})(\frac{m^+}{\epsilon^2} - \frac{s^+}{\epsilon}) + (\frac{m_z}{\epsilon^2} - \frac{s_z}{\epsilon})^2]^{1/2}}{\theta}} \Big\}.
\end{aligned}
$$

§5. УРАВНЕНИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ

На основе вычисленной свободной энергии (39) теперь представляется возможным выписать в явном виде уравнения самосогласования, а именно, дифференцируя, имеем

$$
\frac{\frac{m}{\epsilon^2} - \frac{s}{\epsilon}}{[(\frac{m}{\epsilon^2} - \frac{s}{\epsilon})(\frac{m^+}{\epsilon^2} - \frac{s^+}{\epsilon}) + (\frac{m_z}{\epsilon^2} - \frac{s_z}{\epsilon})^2]^{1/2}} \frac{1}{2N} \sum_k \Big\{ \frac{e^{-\frac{E(k+)}{\theta}}}{1 + e^{-\frac{E(k+)}{\theta}}} - \frac{e^{-\frac{E(k-)}{\theta}}}{1 + e^{-\frac{E(k-)}{\theta}}} \Big\} = m
$$

$$
\frac{\frac{m_z}{\epsilon^2} - \frac{s_z}{\epsilon}}{[(\frac{m}{\epsilon^2} - \frac{s}{\epsilon})(\frac{m^+}{\epsilon^2} - \frac{s^+}{\epsilon}] + (\frac{m_z}{\epsilon^2} - \frac{s_z}{\epsilon})^2]^{1/2}} \frac{1}{2N} \sum_k \Big\{ \frac{e^{-\frac{E(k+)}{\theta}}}{1 + e^{-\frac{E(k+)}{\theta}}} - \frac{e^{-\frac{E(k-)}{\theta}}}{1 + e^{-\frac{E(k-)}{\theta}}} \Big\} = m_z .
$$

Из этих уравнений надо найти $\bar{m}$ и $\bar{m}_z$ как функции a, s, s_z : $\bar{m} = \bar{m}(a,s,s)$, $\bar{m}_z = \bar{m}_z(a,s,s)$, причем $\bar{m}$ и $\bar{m}_z$ должны доставлять абсолютный максимум функции свободной энергии (39). Уравнения самосогласования для a, s, s_z с учетом того, что

$$
\frac{\partial f_N [H_{\epsilon 0}(a,s,\bar{m}(a,s))]}{\partial m} = 0,
$$

дают

$$
\frac{V}{2N} \sum_k \frac{a}{[T^2(k) + V^2 aa^+]^{1/2}} \Big\{ \frac{e^{-\frac{E(k+)}{\theta}}}{1 + e^{-\frac{E(k+)}{\theta}}} + \frac{e^{-\frac{E(k-)}{\theta}}}{1 + e^{-\frac{E(k-)}{\theta}}} \Big\} -
$$

$$
- \frac{V}{2N} \sum_k \frac{a}{[T^2(k) + V^2 aa^+]^{1/2}} + a = 0
$$

$$
\frac{1}{\epsilon} \frac{\frac{\bar{m}}{\epsilon^2} - \frac{s}{\epsilon}}{[(\frac{\bar{m}}{\epsilon^2} - \frac{s}{\epsilon})(\frac{\bar{m}^+}{\epsilon^2} - \frac{s^+}{\epsilon}) + (\frac{\bar{m}_z}{\epsilon^2} - \frac{s_z}{\epsilon})^2]^{1/2}} \frac{1}{2N} \sum_k \Big\{ \frac{e^{-\frac{E(k+)}{\theta}}}{1 + e^{-\frac{E(k+)}{\theta}}} -
$$

$$
- \frac{e^{-\frac{E(k-)}{\theta}}}{1 + e^{-\frac{E(k-)}{\theta}}} \Big\} + \epsilon \frac{s}{[ss^+ + s_z^2]^{1/2}} \cdot \frac{e^{\frac{J\epsilon E}{\theta}}}{1 + e^{\frac{J\epsilon E}{\theta}}} - \epsilon \frac{s}{2[s + s_z^2]^{1/2}} - s = 0
$$

$$\frac{1}{\epsilon}\,\frac{\frac{\bar m_z}{\epsilon^2}-\frac{s_z}{\epsilon}}{\left[\left(\frac{\bar m}{\epsilon^2}-\frac{s}{\epsilon}\right)\left(\frac{\bar m^+}{\epsilon^2}-\frac{s}{\epsilon}\right)+\left(\frac{\bar m_z}{\epsilon^2}-\frac{s_z}{\epsilon}\right)^2\right]^{1/2}}\,\frac{1}{2N}\sum\left\{\frac{e^{-\frac{E(k+)}{\theta}}}{1+e^{-\frac{E(k+)}{\theta}}}-\right.$$

$$\left.-\frac{e^{-\frac{E(k-)}{\theta}}}{1+e^{-\frac{E(k-)}{\theta}}}\right\}+\epsilon\,\frac{s_z}{[ss^++s_z^2]^{1/2}}\cdot\frac{e^{\frac{J\epsilon E}{\theta}}}{1+e^{\frac{J\epsilon E}{\theta}}}-\epsilon\,\frac{s_z}{2[ss^++s_z^2]^{1/2}}\,s_z=0,$$

где $E(k,\nu)=E(k,\nu)(a,s,s_z,\bar m(a,s,s_z),\bar m_z(a,s,s_z))$, причем нужное решение этой системы $\bar a$, $\bar s$, $\bar s_z$ должно доставлять абсолютный минимум функции свободной энергии (39).

§6. ИССЛЕДОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ САМОСОГЛАСОВАНИЯ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ, БЛИЗКИХ К НУЛЮ

Для того, чтобы вычислить свободную энергию при близкой к нулю температуре, необходимо знать знак показателя экспоненты в последнем члене выражения для свободной энергии (39). Согласно формулам (34) и (36) работы [9],

$$\left|\frac{\bar m^{(i)}}{\epsilon^2}-\frac{\bar s^{(i)}}{\epsilon}\right|=\left|\frac{1}{\epsilon^2}\langle M^{(i)}\rangle_{H_{\epsilon 0}(\bar a,\bar s,\bar m)}-\frac{1}{\epsilon}\langle \epsilon S^{(i)}+\frac{1}{\epsilon}M^{(i)}\rangle_{H_{\epsilon 0}(a,s,m)}\right|=$$

$$=\left|\langle S^{(i)}\rangle_{H_{\epsilon 0}(\bar a,\bar s,\bar m)}\right|\le 2S.$$

Таким образом, если произведение Jc достаточно мало, $E(k,-)(\bar a,\bar s,\bar m)>0$. В дальнейшем мы будем рассматривать именно такой случай. Тогда в силу непрерывности $E(k,-)>0$ в некоторой окрестности искомого решения $\bar a$, $\bar s$, $\bar m$. В этой окрестности

$$f_N[H_{\epsilon 0}(a,s,m)]=Jc[(ss^++s_z^2)+\epsilon(ss^++s_z^2)^{1/2}]-$$

$$-2Jc\,\epsilon(ss^++s_z^2)^{1/2}+\frac{1}{N}\sum_k\{T(k)-[T^2(k)+V^2aa^+]^{1/2}\}+ \qquad (41)$$

$$+Vaa^+-\frac{Jc}{\epsilon^2}(mm^++m_z^2).$$

Уравнения самосогласования для m и m_z дают

$\bar m=0$, $\bar m_z=0$.

Остальные уравнения имеют вид

$$\frac{V}{2N}\sum_k\frac{a}{[T^2(k)+V^2aa^+]^{1/2}}=a \qquad (42)$$

$$\epsilon\,\frac{s}{2[ss^++s_z^2]^{1/2}}=s \qquad (43)$$

$$\epsilon\,\frac{s_z}{2[ss^++s_z^2]^{1/2}}=s_z.$$

Решение этой системы $\bar s=\bar s_z=0$ не подходит, так как оно не доставляет минимума функции свободной энергии (41), поскольку второй, отрицательный, член в (41) при s и s_z близких к нулю растет по абсолютной величине быстрее, чем первый, положительный. Корень $\bar a=0$ не подходит по аналогичным соображениям в том случае, если

$$\frac{V}{2N}\sum_k\frac{1}{|T(k)|}>1.$$

Таким образом, при некотором соотношении констант Jc и V имеет место совместное существование сверхпроводимости и ферромагнетизма, причем за существование ферромагнетизма ответственны члены из гамильтониана Гейзенберга, поскольку, как легко видеть, намагниченность, полученная из уравнений (43), стремится к нулю при ϵ, стремящемся к нулю.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н.Н.Боголюбов (мл.). Метод исследования модельных гамильтонианов. М., Наука, 1974.
2. Н.Н.Боголюбов (мл.), Б.И.Садовников. Некоторые вопросы статистической механики. Высшая школа, М., 1975.
3. Н.Н.Боголюбов (мл.), А.М.Курбатов. ОИЯИ, Р4-8434, Дубна, 1974.
4. С.В.Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. М., Наука, 1965.
5. W.A. Smit, H.Vertogen, J.Kraak, Physica, 74, 97, 1974.
6. Н.Н.Боголюбов, В.В.Толмачев, Д.В.Ширков. Новый метод в теории сверхпроводимости. М., АН СССР, 1958.
7. J.Barden, L.N.Cooper, J.R.Schrieffer. Phys.Rev., 108, 1175,1957.
8. C.Zener. Phys.Rev., 81, 440, 1951.
9. Н.Н.Боголюбов (мл.), А.Н.Ермилов, А.М.Курбатов. ОИЯИ, Р17-9772, Дубна, 1976.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 мая 1976 года.