

О НОВОМ МЕТОДЕ В ТЕОРИИ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ, II¹

В. В. Толмачев, С. В. Тябликов

В адиабатическом приближении устанавливается эквивалентность гамильтониана Бардина гамильтониану Фрелиха и вычисляется методом канонического преобразования энергии основного состояния и элементарных возбуждений.

В работе I Боголюбов показал, что свойством сверхпроводимости обладает модель электронного газа, в которой пренебрегается взаимодействием электронов друг с другом, но учитывается их взаимодействие с фононным полем. Эти результаты были установлены при использовании для описания системы гамильтониана Фрелиха [2]:

$$H = H_{el} + H_{int} + H_{ph}; \quad (1)$$

$$H_{el} = \sum_{(k, \sigma)} (E(k) - \lambda) a_{k, \sigma}^+ a_{k, \sigma}; \quad H_{ph} = \sum_{(q)} \hbar \omega(q) b_q^+ b_q; \quad (2)$$

$$H_{int}^{Fr} = \frac{g}{V^{2V}} \sum_{(k, k', \sigma)} \hbar \omega(k - k') (a_{k, \sigma}^+ a_{k, \sigma} b_{k - k'} + a_{k, \sigma}^+ a_{k', \sigma} b_{k' - k}), \quad (3)$$

где $E(k)$ — энергия электрона; $\hbar \omega(q)$ — энергия фонона; k, q — волновые вектора; σ — спиновая переменная ($\sigma = \pm 1/2$); V — объем системы; g — константа связи; λ — химический потенциал. Операторы порождения и уничтожения электронов (a^+, a) и фононов (b^+, b) удовлетворяют обычным перестановочным соотношениям, а λ определяется из условия

$$\sum_{k, \sigma} \overline{a_{k, \sigma}^+ a_{k, \sigma}} = \bar{N},$$

где \bar{N} — заданное число электронов.

Результаты Бардина [3] получены при использовании вместо гамильтониана (3) некоторого эквивалентного гамильтониана электрон-электронного взаимодействия при не совсем ясных предпосылках о выгодности образования электронных пар на поверхности ферми-сферы. Мы покажем ниже эквивалентность гамильтонианов систем Бардина и Фрелиха и установим свойство сверхпроводимости для полученного таким образом гамильтониана Бардина. Для вычислений мы используем метод Боголюбова [1].

Характерной чертой электронно-фононного взаимодействия (3) является то, что оно эффективно только в весьма тонком слое у поверхности Ферми и быстро ослабляется с удалением от нее. Поэтому существенный вклад во все эффекты будут давать электронные переходы у поверхности Ферми. В этом случае энергия электронных переходов может рассматриваться как малая по сравнению с энергией фононов $\hbar \omega$ и мы имеем типичную адиабатическую связь, когда частоты одной подсистемы (электронов) считаются малыми по сравнению с частотами другой подсистемы (фононов). Замечая далее, что $H_{int} \approx V \hbar \omega$, будем считать H_{int} первого порядка малости, а H_{el} — второго порядка малости. Для удобства промежуточных вычислений введем в соответствии с этим малый параметр ϵ ,

¹ Как I цитируется первая работа этой серии [1].

который в окончательных результатах положим равным единице. В этих предположениях гамильтониан системы (1) можно записать в виде:

$$H = \varepsilon^2 H_{ph} + \varepsilon H_{int} + H_{el}. \quad (4)$$

Воспользуемся далее операторной формой теории возмущений [4]. Обозначим для этого через P проекционный оператор², проектирующий собственные функции C оператора H на подпространство собственных функций оператора H_{ph} , а через C_0 обозначим собственные функции из этого подпространства ($C_0 = PC$). При этом задача нахождения собственных функций и собственных значений уравнения

$$(H - E)C = 0 \quad (5)$$

сводится к решению уравнения с некоторым «деформированным» оператором. С точностью до членов ε^2 включительно, которой мы ниже и ограничимся, это уравнение имеет вид:

$$(E - E_0)C_0 = P\{\varepsilon H_{int} + \varepsilon^2 H_{el} - \varepsilon^2 (H_{int} - PH_{int}P)(H_0 - E_0)^{-1} \times \\ \times (H_{int} - PH_{int}P)\} PC_0, \quad (6)$$

где E_0 — собственное значение оператора H_{ph} .

Мы рассмотрим случай фононного вакуума и положим в соответствии с этим $E_0 = 0$. Заметим далее, что $PH_{el}P = H_{el}P$, так как H_{el} не действует на фононные переменные, и что $PH_{int}P = 0$, так как H_{int} линеен по операторам b и b^+ . Таким образом, третий член в фигурной скобке в (6) принимает вид

$$PH_{int}(H_0 - E_0)^{-1}H_{int}P = \frac{g^2}{2V} \sum_{\substack{(k_1, k_2, k'_1, k'_2, \sigma_1, \sigma_2) \\ k_1 - k'_1 - k'_2 - k_2 \neq 0}} a_{k_1, \sigma_1}^+ a_{k_2, \sigma_2} a_{k'_1, \sigma_1}^+ a_{k'_2, \sigma_2}. \quad (7)$$

В этом выражении отличны от нуля, как легко видеть, только члены с $\sigma_1 \neq \sigma_2$. Переносим операторы порождения влево, а уничтожения — вправо и присоединяя выделяющуюся при этом квадратичную по a^+a форму к оператору кинетической энергии, запишем уравнение (6) в следующем виде:

$$EC_0 = (H_0 + H_{int}^B)C_0, \quad (8)$$

где

$$H_0 = \sum_{(k, \sigma)} \varepsilon(k) a_{k, \sigma}^+ a_{k, \sigma}; \quad \varepsilon(k) = E(k) - \frac{g^2}{2V} \sum_{(k_1)} 1 - \lambda; \quad (9)$$

$$H_{int}^B = \frac{g^2}{V} \sum_{\substack{(k_1, k_2, k'_1, k'_2) \\ k_1 - k'_1 - k'_2 - k_2 \neq 0}} a_{k_1, k'_1}^+ a_{k_2, -k'_2}^+ a_{k_1, k'_1} a_{k_2, -k'_2}. \quad (10)$$

(здесь и ниже формальный малый параметр ε положен равным единице). Второе слагаемое в $\varepsilon(k)$ учитывает обычную поправку к химическому потенциалу.

В форме (10) член взаимодействия H_{int}^B совпадает с соответствующим выражением, использовавшимся в работе Бардина, Купера и Шриффера. При нашем выводе, уравнения (8) мы считали энергию электронных переходов малой по сравнению с энергией фононов $\hbar\omega$, что

² Оператор P определен следующим образом: $PC = \varphi_0(\varphi_0 C)$, где φ_0 — собственная функция оператора H_{ph} , круглые скобки обозначают скалярное произведение.

справедливо только для переходов в шаровом слое около поверхности Ферми. Ширина этого слоя будет, очевидно, порядка некоторой эффективной частоты $\hbar\tilde{\omega}$. Использование первоначального гамильтониана Фрелиха H_{int}^{Fr} (3) ведет, как это показано Боголюбовым в I, к аналогичному выводу.

Применение теории возмущений к оператору (8)–(10) приводит к логарифмическим расходимостям при удалении от поверхности Ферми. Причина появления их лежит в том, что при выводе уравнения (8) в адиабатическом приближении энергия электронных переходов считалась малой по сравнению с энергией фононов. Однако последнее справедливо только около поверхности Ферми для некоторого шарового слоя толщины порядка «эффективной энергии фонона» $\hbar\tilde{\omega}$.

В более точном варианте работы Боголюбова [4] видно, что основной вклад во все величины дают именно эффекты, происходящие в этом слое.

В соответствии с этими соображениями мы введем в уравнение (8)–(10) параметр обрезания и будем рассматривать уравнение в шаровом слое $k_F + \Delta$, где k_F — фермиевский волновой вектор, определяемый из условия $\varepsilon(k) = 0$. Ввиду логарифмической особенности величины должны быть мало чувствительны к выбору параметра обрезания Δ .

Заметим, что соответствующее уравнение в работе Бардина, Купера и Шриффера понимается именно в таком смысле.

Произведем над операторами $a_{h,\sigma}^+$, $a_{h,\sigma}$ каноническое преобразование [4]:

$$a_{h,1/2} = u_h \alpha_{h,1} + v_h \alpha_{-h,0}^+; \quad a_{h,-1/2} = u_h \alpha_{h,0} - v_h \alpha_{-h,1}^+; \quad (11)$$

$$a_{h,1/2}^+ = u_h \alpha_{h,1}^+ + v_h \alpha_{-h,0}; \quad a_{h,-1/2}^+ = u_h \alpha_{h,0}^+ - v_h \alpha_{-h,1};$$

$$u_h^2 + v_h^2 = 1; \quad (u_{-h} = u_h; v_{-h} = v_h), \quad (12)$$

где α, α^+ — новые ферми-операторы; u_h, v_h — коэффициенты преобразования, которые будут определены ниже.

В новых переменных гамильтониан уравнения (8) может быть записан в виде

$$H = \varepsilon_0 + H_0 + H_1 + H_2, \quad (13)$$

где

$$\varepsilon_0 = 2 \sum_{(h)} \varepsilon(k) v_h^2; \quad (14)$$

$$H_0 = \sum \varepsilon(k) (u_h^2 - v_h^2) (\alpha_{h,1}^+ \alpha_{h,1} + \alpha_{h,0}^+ \alpha_{h,0}); \quad (15)$$

$$H_1 = 2 \sum \varepsilon(k) u_h v_h (\alpha_{h,1}^+ \alpha_{-h,0}^+ + \alpha_{-h,0} \alpha_{h,1}); \quad (16)$$

$$H_2 = \frac{g^2}{V} \sum (u_{h_1} u_{h_2} \alpha_{h_1,1}^+ \alpha_{h_2,0}^+ - v_{h_1} v_{h_2} \alpha_{-h_1,0} \alpha_{-h_2,1} - \\ - u_{h_1} v_{h_2} \alpha_{h_1,1}^+ \alpha_{-h_2,1} + v_{h_1} u_{h_2} \alpha_{-h_1,0} \alpha_{h_2,0}^+) (u_{h_1} u_{h_2} \alpha_{h_1,1} \alpha_{h_2,0} - v_{h_1} v_{h_2} \alpha_{-h_1,0}^+ \alpha_{-h_2,1} - \\ - u_{h_1} v_{h_2} \alpha_{h_1,1} \alpha_{-h_2,1}^+ + v_{h_1} u_{h_2} \alpha_{-h_1,0}^+ \alpha_{h_2,0}). \quad (17)$$

Будем далее рассматривать H_0 как оператор нулевого приближения, а H_1, H_2 — как возмущение.

В работе I было показано, что в ряду теории возмущений опасными будут члены, соответствующие порождению двух частиц; там же было показано, что это связано с наличием логарифмических особенностей на поверхности Ферми.

Для гамильтониана (13) положение совершенно аналогичное. Для устранения трудностей с расходимостью в первом порядке по g^2 просуммируем все диаграммы, ведущие из вакуума к двухчастичным состояниям

и выберем функции u_k, v_k так, чтобы они скомпенсировали друг друга. Одна такая диаграмма есть в гамильтониане H_1 :

$$2 \sum \varepsilon(k) u_k v_k \alpha_{k,1}^+ \alpha_{-k,0}^+$$

и две — в гамильтониане H_2 :

$$\frac{g^2}{V} \sum_{\substack{(k_1, k_2, k'_1, k'_2) \\ (k_1 - k'_1 = k'_2 - k_2 + 0)}} (-v_{k_1} u_{k_2} v_{k'_1} v_{k'_2} \delta_{-k'_1, k'_2} \alpha_{-k_1, 0}^+ \alpha_{-k_2, 1}^+ - \\ - u_{k_1} u_{k_2} u_{k'_1} v_{k'_2} \alpha_{k_1, 1}^+ \alpha_{k_2, 0}^+ \delta_{k_1, -k_2}) = - \frac{g^2}{V} \sum_{(k_1)} u_{k_1} v_{k_1} \sum_{(k)} (u_k^2 - v_k^2) \alpha_{k,1}^+ \alpha_{-k,0}^+.$$

Из равенства нулю коэффициентов при $\alpha_{k,1}^+ \alpha_{-k,0}^+$ получаем систему уравнений для функций u_k, v_k :

$$2\varepsilon(k) u_k v_k = (u_k^2 - v_k^2) \frac{g^2}{V} \sum_{(k_1)} u_{k_1} v_{k_1}. \quad (18)$$

Отметим, прежде всего, что система (18) имеет тривиальное решение $u_k v_k = 0$ и соответственно:

$$u_k^2 = \begin{cases} 0, & |k| < k_F, \\ 1, & |k| > k_F; \end{cases} \quad (19) \\ v_k^2 = \begin{cases} 1, & |k| < k_F, \\ 0, & |k| > k_F. \end{cases}$$

Это решение, как будет видно из дальнейшего, соответствует нормальному (не сверхпроводящему) состоянию системы.

Для того чтобы найти нетривиальное решение, введем обозначение:

$$C = (g^2/V) \sum u_k v_k. \quad (20)$$

Тогда, используя условие нормировки (12) для функций u_k, v_k , нетрудно решить систему (18) относительно u_k^2 и v_k^2 :

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\varepsilon(k)}{V C^2 + \varepsilon^2(k)} \right\}; \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{\varepsilon(k)}{V C^2 + \varepsilon^2(k)} \right\}. \quad (21)$$

Подставляя найденное отсюда выражение для $u_k v_k$ в (20), получаем уравнение для определения постоянной C :

$$1 = (g^2/2V) \sum_{(k)} [C^2 + \varepsilon^2(k)]^{-1/2}. \quad (22)$$

Переходя в (22) от суммы к интегралам и принимая во внимание, что область интегрирования по k лежит в интервале $(k_F - \Delta, k_F + \Delta)$, можно получить для C следующее асимптотическое решение:

$$C = 2\tilde{\Delta} e^{-1/\rho}; \quad \rho = 2g^2 k_F^2 / (2\pi)^2 \varepsilon'(k_F); \quad \tilde{\Delta} = \varepsilon'(k_F) \Delta. \quad (23)$$

Вычислим теперь в первом по g^2 приближении энергию элементарных возбуждений:

$$\Omega(k, 1) = \varepsilon(k) (u_k^2 - v_k^2) + 2u_k v_k \frac{g^2}{V} \sum_{(k_1)} u_{k_1} v_{k_1},$$

или, используя формулы (20), (21)³,

$$\Omega(k, \gamma) = \sqrt{C^2 + \varepsilon^2(k)}, \quad (24)$$

где постоянная C определяется выражением (23).

Для нормального состояния, очевидно,

$$\Omega(k, \gamma) = \varepsilon(k). \quad (25)$$

Из (24) видим, что в отличие от нормального состояния, энергия элементарных возбуждений отделена от основного уровня щелью

$$\Delta\Omega = C. \quad (26)$$

Точно так же, как в I, можно рассмотреть токовое состояние, т. е. состояние с полным импульсом системы, отличным от нуля. При этом можно показать, что при достаточно малых скоростях u величина щели убывает пропорционально u .

Переходя к вычислению поправки к энергии основного состояния, заметим, что вклад в нее даст единственный член. В результате получим

$$\Delta\varepsilon_0 = -\frac{g^2}{V} \left(\sum_{(k)} u_k v_k \right)^2 = -\frac{V}{g^2} C^2 \quad (27)$$

(для нормального состояния $C = 0$, $\Delta\varepsilon_0 = 0$).

Покажем теперь, что сверхпроводящее состояние энергетически выгоднее нормального. Используя формулы (14), (27) и (21), получаем для разности низших энергетических уровней сверхпроводящего и нормального состояний:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \varepsilon_0 + \Delta\varepsilon_0 - \sum \varepsilon(k) \left\{ 1 - \frac{\varepsilon(k)}{|\varepsilon(k)|} \right\} = \\ &= \sum \left\{ |\varepsilon(k)| - \frac{\varepsilon^2(k)}{V C^2 + \varepsilon^2(k)} \right\} - \frac{V}{g^2} C^2. \end{aligned} \quad (28)$$

Отсюда, с той же степенью точности, что и асимптотическое решение для C , получаем окончательно

$$\Delta E = -V \frac{k_F^2 (2\tilde{\Delta})^2}{(2\pi)^2 \varepsilon'(k_F)} e^{-2/\rho}. \quad (29)$$

Величину

$$\frac{2k_F^2}{(2\pi)^2 \varepsilon'(k_F)} = \frac{1}{V} \left\{ \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k^2 dk}{dE} \right\}_{k=k_F}$$

можно интерпретировать как относительную плотность электронных уровней dn/dE . Тогда (29) переписется следующим образом:

$$\frac{1}{V} \Delta E = -\frac{dn}{dE} \frac{(2\tilde{\Delta})^2}{2} e^{-2/\rho}; \quad \rho = g^2 \frac{dn}{dE}. \quad (30)$$

Отождествляя толщину слоя $2\tilde{\Delta}$ с величиной $\tilde{\omega}$ из (14.1), мы получаем совпадение со всеми результатами Боголюбова I, полученными при использовании гамильтониана Фрелиха. Если в (30) произвести замену обозначений: $\tilde{\Delta} \rightarrow \omega$, $g^2 \rightarrow V$, $dn/dE = N$, то становится очевидным совпадение полученных результатов и с результатами Бардина и др. [3]. Минимальная энергия, необходимая для разрушения пары, вычисленная в [4], равна, оче-

³ Формула (24) была получена Бардиным, Купером и Шриффером, на что имеется указание в статье Бернарда [5].

видно, удвоенной величине щели в спектре элементарных возбуждений (26). Этим самым устанавливается полное соответствие гамильтонианов Фрелиха и Бардина и результатов, получаемых с их помощью.

Следует отметить, что полученные нами формулы (26), (30) мало чувствительны к изменению формы принятого нами взаимодействия. Так, если в (10) вместо постоянной g^2 входила бы величина $g^2(k_1 - k_2)$, сконцентрированная около поверхности Ферми, то выражения (26), (30) сохранились с тем единственным отличием, что вместо величины g^2 входило бы среднее значение от $g^2(k_1 - k_2)$, а вместо $\tilde{\Delta}$ — некоторая средняя ширина $\tilde{\Delta}(k_1 - k_2)$. Напротив того, бозевская часть спектра может зависеть от детального вида функции $g(k_1 - k_2)$. Мы предполагаем рассмотреть эту зависимость в одной из следующих работ.

Приведенные выше результаты получены в первом порядке теории возмущений. Нетрудно убедиться, что компенсация диаграмм во втором порядке (g^4) не меняет результатов. Действительно, в операторе возмущения $H_2(17)$ имеются члены, описывающие при действии на вакуум, порождение четырех частиц — H_{4+} , порождение одной частицы и уничтожение трех частиц — $H_{1+,3-}$ и т. д. Во втором порядке теории возмущений вклад в диаграммы с двумя частицами на выходе дадут члены вида

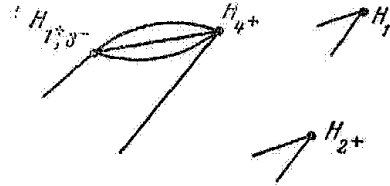


Рис. 1

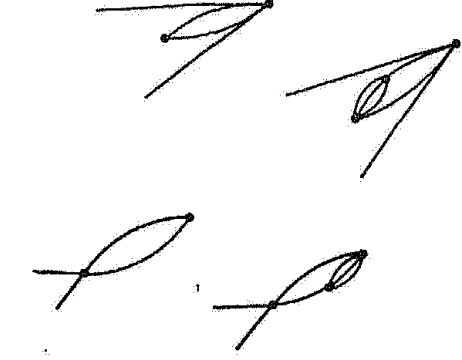


Рис. 2

порождение четырех частиц — H_{4+} , порождение одной частицы и уничтожение трех частиц — $H_{1+,3-}$ и т. д. Во втором порядке теории возмущений вклад в диаграммы с двумя частицами на выходе дадут члены вида

$$H_{1+,3-}(H_0 - E_0)^{-1}H_{4+}, \quad (31)$$

которые графически изображены на рис. 1.

Мы потребуем теперь, чтобы они компенсировались в сумме с диаграммами, получающимися из H_1 и H_2 в первом

порядке, изображенными на этом же рисунке.

Заметим, что диаграммы вида, изображенного на рис. 2, компенсируются при этом автоматически в силу правила компенсации.

Операторы H_{4+} и $H_{1+,3-}$ имеют вид

$$H_{4+} = -\frac{g^2}{V} \sum_{\substack{k_1, k_2, k'_1, k'_2 \\ k_1 - k'_1 = k_2 - k'_2 \neq 0}} u_{k_1} u_{k_2} v_{k_1} v_{k_2} \alpha_{k_1 1}^+ \alpha_{k_2 0}^+ \alpha_{-k_1 0}^+ \alpha_{-k_2 0}^+; \quad (32)$$

$$H_{1+,3-} = -\frac{g^2}{V} \sum_{\substack{k_1, k_2, k'_1, k'_2 \\ k_1 - k'_1 = k_2 - k'_2 \neq 0}} (v_{k_1} v_{k_2} u_{k_1} v_{k_2} - u_{k_1} u_{k_2} v_{k_1} u_{k_2}) \times$$

$$\times \alpha_{-k_2 1}^+ \alpha_{-k'_1 1}^+ \alpha_{k_1 1}^+ \alpha_{-k'_1 0}^+ - \frac{g^2}{V} \sum_{\substack{k_1, k_2, k'_1, k'_2 \\ k_1 - k'_1 = k_2 - k'_2 \neq 0}} (v_{k_1} v_{k_2} v_{k_1} u_{k_2} - u_{k_1} u_{k_2} u_{k_1} v_{k_2}) \times$$

$$\times \alpha_{-k_1 0}^+ \alpha_{-k'_1 0}^+ \alpha_{-k'_1 1}^+ \alpha_{k_2 0}^+. \quad (33)$$

Так как второй член получается из первого заменой $0 \rightleftharpoons 1$, то очевидно, что он только удваивает эффект первого члена.

В результате получаем для u_k, v_k следующую систему уравнений:

$$2 \left\{ \varepsilon(k) - \left(\frac{g^2}{V} \right)^2 \sum_{\substack{(k_1, k_2, k_3) \\ (k_2 - k_1 + k_3 = k)}} \frac{\{u_{k_1}^2 v_{k_2}^2 - (u_{k_1} v_{k_1}) (u_{k_2} v_{k_2})\} (u_{k_3}^2 - v_{k_3}^2)}{\varepsilon(k) + \varepsilon(k_1) + \varepsilon(k_2) + \varepsilon(k_3)} \right\} = \\ = (u_k^2 - v_k^2) \left\{ \frac{g^2}{V} \sum_{(k_1)} u_{k_1} v_{k_1} + \right. \\ \left. + \left(\frac{g^2}{V} \right)^2 \sum_{\substack{(k_1, k_2, k_3) \\ (k_2 - k_1 + k_3 = k)}} \frac{(u_{k_1} v_{k_1}) \{ (u_{k_2} v_{k_2}) (u_{k_3} v_{k_3}) - u_{k_2}^2 v_{k_3}^2 \}}{\varepsilon(k) + \varepsilon(k_1) + \varepsilon(k_2) + \varepsilon(k_3)} \right\}. \quad (34)$$

Ввиду того что добавочные члены четвертого порядка по g содержат произведения uv с одним и тем же индексом, дающие экспоненциально малый вклад, то, как можно видеть, они не меняют асимптотики решений, найденной ранее. Заметим, кроме того, что учет членов четвертого порядка был сделан для модельного гамильтониана (10), который сам получен с точностью до членов порядка g^2 . Поэтому, если пытаться получить правильные поправки от членов порядка g^4 , необходимо предварительно улучшить модельный гамильтониан (10), продолжив метод проектирования до членов четвертого порядка.

В заключение авторы пользуются случаем выразить признательность Н. Н. Боголюбову, также Д. Н. Зубареву и Ю. А. Церковникову за обсуждение работы.

Математический институт
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
17 октября 1957 г.

Литература

- [1] Н. Н. Боголюбов, ЖЭТФ, этот выпуск, стр. 58.
- [2] H. Fröhlich, Phys. Rev., 79, 845 1950; Proc. Roy. Soc. A 215, 291, 1952.
- [3] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, Phys. Rev., 106, 162, 1957.
- [4] Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, Вестн. МГУ, 3, 35, 1949; ЖЭТФ, 19, 251, 1949.
- [5] N. Bannardes, Phys. Rev., 107, 354, 1957.

CONCERNING A NEW METHOD IN THE THEORY OF SUPERCONDUCTIVITY. II

V. V. Tolmachev, S. V. Tyablikov

In the adiabatic approximation equivalence of the Bardeen Hamiltonian and Fröhlich Hamiltonian is established and the energies of the ground state and elementary excitations are calculated by the method of canonical transformations.