Общая физика

УДК 538.945.669.053.001.57

Сверхпроводимость в системе связанных в обычном смысле пар

И. М. Юрин, В. Б. Калинин
Институт физической химии РАН, Москва, Россия

Делается предположение о возможности формирования связанных в обычном смысле электронных пар в металлах на основе выражения для потенциала межэлектронного притяжения. Показано, что в отличие от куперовой энергия такой пары отрицательна в системе центра масс пары. Это обстоятельство меняет картину сверхпроводящего перехода в системе. Во-первых, в системе рассматриваемого типа отсутствует бозе-конденсация электронных пар. Во-вторых, энергетическая щель в одноэлектронном спектре образуется за счет воздействия среднего поля на энергию электронного состояния со стороны ближайших соседей по импульсной решетке. В квазиклассическом приближении обоснована гипотеза Лондонов, поэтому возникающая энергетическая щель связана со сверхпроводящими свойствами системы.

Общепризнанной считается теория сверхпроводимости, выдвинутая Бардином, Купером и Шриффером (БКШ) в 1957 г. [1]. В рамках этой теории удалось успешно объяснить огромное множество экспериментов по исследованию так называемых "обычных" сверхпроводников, т. е. сверхпроводников с небольшими температурами перехода. К моменту открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) самые оптимистичные оценки теории БКШ давали для максимально возможных температур перехода T_s значение ~40 К.

Открытие ВТСП разделило исследователей на две большие группы. Одна группа исследователей по-прежнему считает, что теория годится для описания ВТСП, достаточно обосновать введение больших значений констант электрон-фононного взаимодействия. Другая группа считает, что теория БКШ применима к обычным сверхпроводникам, однако, например, в купратах следует искать новые механизмы спаривания электронов. Что касается авторов представленной работы, то они образуют явное меньшинство, т. е. группу, которая полагает, что необходима радикальная ревизия существующей теории сверхпроводимости. В рамках этой теории ВТСП имеет естественное обоснование, а принципиальные отличия в описаниях сверхпроводимости и ВТСП отсутствуют.

Для представления современного состояния теории сверхпроводимости необходимо подробно рассмотреть общепризнанную теорию — теорию БКШ. Гамильтониан БКШ связывает пары с нулевыми импульсами и имеет следующий вид:

$$H_{BCS} = \sum_{\sigma,k} T_k c^+_{\sigma,k} c_{\sigma,k} - \\ - \frac{g}{\Omega} \sum_{\substack{E_F-\omega_D<T_k<E_F+\omega_D \\ E_F-\omega_D<T_p<E_F+\omega_D}} c^+_{\uparrow,p} c^+_{\downarrow,-p} c_{\downarrow,-k} c_{\uparrow,k}\,, \tag{1}$$

где T_k — кинетическая энергия электрона;

$c^+_{\sigma,k}$ и $c_{\sigma,k}$ — операторы рождения и уничтожения электрона с импульсом k;

$\sigma = \pm\frac{1}{2}$ (или $\sigma = \uparrow, \downarrow$, соответственно) — спиновый индекс электрона;

$n_{\sigma,p} = c^+_{\sigma,p} c_{\sigma,p}$;

E_F — энергия Ферми;

ω_D — дебаевская частота;

Ω — объем системы.

Анализ показывает, что гамильтониан H_{BCS} описывает скорее диэлектрик, а не сверхпроводник. Убедиться в этом можно, рассматривая уже так называемый "элементарный сверхпроводник Купера" — одиночную связанную взаимодействием (1) пару электронов (любопытно, что в отличие от связанных в обычном смысле пар, энергия куперовой пары в системе центра масс при реалистично выбранных параметрах модели положительна).

Положим для простоты $\omega_D = E_F$. Если приложить к сверхпроводнику Купера напряжение V такое, что $2eV<E_b$, где E_b — энергия пары, отсчитываемая от дна зоны проводимости, e — заряд электрона, то отклик такой системы на электрическое поле рассчитывается в рамках

теории возмущений, так как энергия пары отделена от всех остальных состояний энергетической щелью.

Таким образом, "сверхпроводник" Купера не способен экранировать электрическое поле, т. е. в системе БКШ потеряны свойства даже нормального металла.

Может показаться, что бозе-конденсация многих пар может существенно изменить ситуацию. Это предположение опровергает приведенное в [2] строгое решение многоэлектронной задачи для редуцированного гамильтониана БКШ. Оказывается, что основное состояние такой системы также отделено от других состояний энергетической щелью. Поэтому для того чтобы возбудить ток, необходимо затратить конечную энергию, что несовместимо с декларированными сверхпроводящими свойствами системы. Иначе говоря, модель БКШ к проблеме сверхпроводимости никакого отношения не имеет.

Может показаться, что мы имеем дело с дефектом первоначальной формулировки теории БКШ, в дальнейшем, при переходе к рассмотрению связанных пар с отличными от нуля импульсами, этот дефект исчезает. Покажем, что это не соответствует действительности.

Так, в рамках преобразования Горькова [3] гамильтониан

$$H = \sum_{\sigma,k} T_k c^+_{\sigma,k} c_{\sigma,k} + \sum_{\sigma,\nu} \sum_{p,k,q} U_q^{real} c^+_{\sigma,p+q} c^+_{\nu,k-q} c_{\nu,k} c_{\sigma,p} \tag{2}$$

диагонализуется переходом к операторам рождения и уничтожения боголонов

$$\gamma^+_{\sigma,p} = u_p c^+_{\sigma,p} - 2\sigma v_p c_{-\sigma,-p},$$

$$\gamma_{\sigma,p} = u_p c_{\sigma,p} - 2\sigma v_p c^+_{-\sigma,-p}.$$

Параметры u_p и v_p определяются в рамках самосогласованной процедуры, основанной на уравнении для спектра боголонов $[H, \gamma^+_{\sigma,p}] = \widetilde{E}_p \gamma^+_{\sigma,p}$. Появление щели в спектре трактуется как переход в сверхпроводящее состояние.

Заметим, что уравнение $[H, \gamma^+_{\sigma,p}] = \widetilde{E}_p \gamma^+_{\sigma,p}$ имеет физический смысл, только если состояние $|BCS\rangle$, удовлетворяющее условию $\gamma_{\sigma,p}|BCS\rangle = 0$, стационарно (в теории БКШ состояние $|BCS\rangle$ является основным состоянием системы). В дальнейшем нам понадобится выразить гамильтониан (2) в операторах $\gamma^+_{\sigma,p}$ и $\gamma_{\sigma,p}$.

Для гамильтониана БКШ, учитывая члены взаимодействия со структурой $\gamma^+\gamma^+\gamma^+\gamma^+$, можно получить $|\delta\psi_1| \sim N/\Omega$, где $\delta\psi_1$ — поправка первого порядка по теории возмущений к волновой функции состояния $|BCS\rangle$; N — среднее число электронов в системе. В общем случае для гамильтониана (2) имеем $|\delta\psi_1| \sim N^{3/2}/\Omega$ или $|\delta\psi_1| \sim n\sqrt{\Omega}$, где n — концентрация электронов в системе. Соответственно, преобразование системы Горькова определенно некорректно при описании *реальных* систем больших размеров.

Наконец рассмотрим уравнения Элиашберга [4], на которые часто ссылаются как на современную формулировку теории БКШ [5]. Они были выведены на основе модели Фрелиха в 1960 г. В то же время известно [6], что в модели Фрелиха невозможен последовательный учет кулоновского межэлектронного взаимодействия. Указанное обстоятельство обнаруживает несодержательность системы уравнений Элиашберга для функций Грина электронов и фононов *по существу проблемы перенормировки*. Кроме того, использование аномальных средних делает выбор основного состояния системы в уравнениях Элиашберга столь же необоснованным, как и в рассмотренном выше преобразовании Горькова.

Последовательная перенормировка в системе электронов и фононов впервые была проведена в работе [7]. В ней показано, что введение дополнительного кинетического члена $\sim q^{-1}\left(2b^+_q b_q - b^+_q b^+_{-q} - b_q b_{-q}\right)$, где b^+_q и b_q — операторы рождения и уничтожения фононов продольной поляризации с импульсом q, позволяет компенсировать ряд сингулярностей в длинноволновом пределе, возникающих в процессе процедуры перенормировки.

Строгий учет длинноволнового предела электрон-фононного и, соответственно, электрон-электронного взамимодействия особенно актуален при расмотрении связанных в обычном смысле электронных пар. В самом деле, коротковолновое взаимодействие легко учитывается в рамках теории возмущений вследствие больших значений возникающих энергетических знаменателей. Поэтому именно длинноволновое взаимодействие, в отличие от теории БКШ, должно играть решающую роль при микроскопическом обосновании физически содержательных теорий сверхпроводимости.

В рамках тех же работ [7] при учете электронных корреляций было получено выражение для эффективного гамильтониана вырожденного ферми газа

$$H_{eff} = \sum_{\sigma,k} T_k c^+_{\sigma,k} c_{\sigma,k} + \sum_{\sigma,\nu} \sum_{p,k,q} \widetilde{U}_q^{p,k} c^+_{\sigma,p+q} c^+_{\nu,k-q} c_{\nu,k} c_{\sigma,p}, \tag{3}$$

причем при $p,k >> mS$ имеем

$$\tilde{U}_q^{p,k} \sim -\left(\frac{zm}{3M}\right)^2 \frac{e^2}{\varepsilon q^2} \frac{K_F^2}{q^2 - 4m^2 s^2} \frac{K_F^2}{q^2 - 4m^2 s_1^2}, \quad (4)$$

где z — число электронов проводимости на элементарную ячейку;
m — зонная масса электрона;
M — масса иона;
ε — диэлектрическая проницаемость электронов валентной зоны;
K_F — фермиевский импульс;
s — затравочная скорость фононов, связанная с наблюдаемой скоростью звука S в металле соотношением $S = \sqrt{s^2 + \frac{zm}{3M} V_F^2}$;
V_F — фермиевская скорость;

$$s_1^2 = \left(1 + \frac{zm}{3M} \frac{\varepsilon K_F^2}{\lambda^2}\right) s^2;$$

λ^{-1} — длина экранирования Томаса—Ферми.

В работе [7] был рассмотрен легированный полупроводник, при котором возможно разделение электронов на состояния валентной зоны и зоны проводимости. При этом значения диэлектрической проницаемости ε и затравочной скорости фононов s имеют явное родительское диэлектрическое происхождение. Насколько предложенное приближение корректно при описании металлов периодической системы — это вопрос будущих исследований.

Сделаем еще несколько замечаний:

во-первых, наличие сингулярностей в выражении (4) не является чем то неизбежным в рамках развиваемого подхода. В самом деле, учет фононного и электронного рассеяния приведет к исчезновению сингулярностей в (4) — это может быть достигнуто введением дополнительных членов в исходный гамильтониан модели, рассматриваемой в [7];

во-вторых, следует отчетливо осозновать особенности построения волновой функции основного состояния в рамках предложенного подхода. С самого начала мы полагаем, что основное состояние системы представимо в виде

$$\left|\Phi_0\right\rangle = \prod_{\sigma, k<K_F} C_{\sigma,k}^{+} \left|0\right\rangle, \quad (5)$$

где $C_{\sigma,k}^{+}$ — операторы рождения квазичастиц (электронов).

В процессах проведения процедуры перенормировки, учета электронных корреляций и решения других задач эти операторы уточняются, однако даже появление связанных состояний гамильтониана (3) не меняет уравнения (5). Это обстоятельство качественным образом отличает наш подход от большинства работ, в которых гамильтонианы, предполагающие наличие связанных состояний, рассматриваются как исходные и, соответственно, нахождение основного состояния системы представляет собой отдельную задачу описания бозе-конденсата электронных пар.

Построение модельного гамильтониана системы

Эффективное электрон-электронное взаимодействие (4) было получено в первом порядке теории возмущений по малому параметру с формальной записью $\tilde{U}/T$. Попробуем обобщить полученные результаты для случая, когда теория возмущений не работает.

Итак, после проведения процедуры перенормировки рассмотрим следующий гамильтониан:

$$H = \sum_{\sigma,k} T_k c_{\sigma,k}^{+} c_{\sigma,k} + \sum_{\sigma,\nu} \sum_{p,k,q} U_q^{p,k} c_{\sigma,p+q}^{+} c_{\nu,k-q}^{+} c_{\nu,k} c_{\sigma,p}. \quad (6)$$

Схема введения понятия эффективного гамильтониана аналогична приведенной в [7]. Вначале рассматривается гамильтониан H_{eff}, который, казалось бы, даже формально не связан с уравнением (6)

$$\begin{aligned} H_{eff} = {} & \sum_{\sigma,k} T_k c_{\sigma,k}^{+} c_{\sigma,k} + \frac{1}{2} \sum_{p,k,q} \tilde{U}_{0,q}^{p,k} \times \\ & \times \left(c_{\uparrow,p+q}^{+} c_{\downarrow,k-q}^{+} - c_{\downarrow,p+q}^{+} c_{\uparrow,k-q}^{+}\right) \times \\ & \times \left(c_{\downarrow,k} c_{\uparrow,p} - c_{\uparrow,k} c_{\downarrow,p}\right) + \\ & + \sum_{\sigma} \sum_{p,k,q} \tilde{U}_{1,q}^{p,k} c_{\sigma,p+q}^{+} c_{\sigma,k-q}^{+} c_{\sigma,k} c_{\sigma,p} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{p,k,q} \tilde{U}_{1,q}^{p,k} \left(c_{\uparrow,p+q}^{+} c_{\downarrow,k-q}^{+} + c_{\downarrow,p+q}^{+} c_{\uparrow,k-q}^{+}\right) \times \\ & \times \left(c_{\downarrow,k} c_{\uparrow,p} + c_{\uparrow,k} c_{\downarrow,p}\right). \end{aligned} \quad (7)$$

Гамильтониан H_{eff} с помощью преобразования

$$\begin{aligned} C_{\sigma,p}^{+} &= c_{\sigma,p}^{+} + \sum_{\nu} \sum_{k,q} \theta_{\sigma,\nu,q}^{p,k} c_{\sigma,p+q}^{+} c_{\nu,k-q}^{+} c_{\nu,k}, \\ C_{\sigma,p} &= c_{\sigma,p} + \sum_{\nu} \sum_{k,q} \theta_{\sigma,\nu,q}^{*p,k} c_{\nu,k}^{+} c_{\nu,k-q} c_{\sigma,p+q} \end{aligned} \quad (8)$$

приводится к виду

$$\begin{aligned} H_{eff} = {} & \sum_{\sigma,k} T_k C_{\sigma,k}^{+} C_{\sigma,k} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma,p\neq k} E_1^{p,k} \times \\ & \times C_{\sigma,p}^{+} C_{\sigma,k}^{+} C_{\sigma,k} C_{\sigma,p} + \end{aligned}$$

$$+\frac{1}{4}\sum_{p\neq k}E_1^{p,k}\left(C_{\uparrow,p}^{+}C_{\downarrow,k}^{+}+C_{\downarrow,p,k}^{+}C_{\uparrow,k}\right)\times$$
$$\times\left(C_{\downarrow,k}C_{\uparrow,p}+C_{\uparrow,k}C_{\downarrow,p}\right)+\sum_{p}E_0^{p,p}C_{\uparrow,p}^{+}C_{\downarrow,p}^{+}C_{\downarrow,p}C_{\uparrow,p}+$$
$$+\frac{1}{4}\sum_{p\neq k}E_0^{p,k}\left(C_{\uparrow,p}^{+}C_{\downarrow,k}^{+}-C_{\downarrow,p}^{+}C_{\uparrow,k}^{+}\right)\times$$
$$\times\left(C_{\downarrow,k}C_{\uparrow,p}-C_{\uparrow,k}C_{\downarrow,p}\right).$$

В отличие от [7] в уравнении (7) учтено, что в более высоких порядках, чем первый, теории возмущений по параметру $\widetilde{U}/T$ эффективные потенциалы для синглетных и триплетных пар будут отличаться. Кроме того, параметры преобразования (8) будут определяться не из теории возмущений, а задаваться выражениями более общего вида

$$\theta_{\sigma,\sigma,q}^{p,k}=\frac{1}{2}\left(\delta_{k-p}^{q}-\delta_q^0\right)+\chi_{1,q}^{p,k},$$
$$\theta_{\sigma,-\sigma,q}^{p,k}=-\delta_q^0+\chi_{0,q}^{p,k}+\chi_{1,q}^{p,k},$$

где $\delta_{\dots}^{\dots}$ — трехмерные символы Кронеккера; $\chi_{0,q}^{p,k}$ и $\chi_{1,q}^{p,k}$ — определяются уравнениями на собственные значения двухчастичных состояний (см. Дополнение)

$$H_{eff}\left|S_1^{p,k}\right\rangle=\left(T_p+T_k+E_1^{p,k}\right)\left|S_1^{p,k}\right\rangle,$$
$$H_{eff}\left|S_0^{p,k}\right\rangle=\left(T_p+T_k+E_0^{p,k}\right)\left|S_0^{p,k}\right\rangle, \quad (9)$$

где $\left|S_1^{p,k}\right\rangle=\sum_q\chi_{1,q}^{p,k}c_{\uparrow,p+q}^{+}c_{\uparrow,k-q}^{+}\left|0\right\rangle$

и

$$\left|S_0^{p,k}\right\rangle=\sum_q\chi_{0,q}^{p,k}\left(c_{\uparrow,p+q}^{+}c_{\downarrow,k-q}^{+}-c_{\downarrow,p+q}^{+}c_{\uparrow,k-q}^{+}\right)\left|0\right\rangle.$$

Уравнение на эффективные потенциалы $\widetilde{U}_{i,q}^{p,k}$ составляются следующим образом. Формально вводится обратное к (8) преобразование

$$c_{\sigma,p}^{+}=C_{\sigma,p}^{+}+\sum_{\nu}\sum_{k,q}\theta_{\sigma,\nu,q}^{*k-q,p+q}C_{\sigma,p+q}^{+}C_{\nu,k-q}^{+}C_{\nu,k},$$
$$c_{\sigma,p}=C_{\sigma,p}+\sum_{\nu}\sum_{k,q}\theta_{\sigma,\nu,q}^{k-q,p+q}C_{\nu,k}^{+}C_{\nu,k-q}C_{\sigma,p+q}. \quad (10)$$

С помощью (10) гамильтониан (6) записывается в операторах C^{+} и C. В такой записи в нем появляются члены со структурой $C^{+}C^{+}C^{+}CCC$, которые в приближении хаотических фаз могут быть приведены к виду $\left\langle C^{+}C\right\rangle C^{+}C^{+}CC$. Эти, а также и другие члены со структурой $C^{+}C^{+}CC$ определяют дополнительные потенциалы $\widetilde{D}_{0,q}^{p,k}$ и $\widetilde{D}_{1,q}^{p,k}$, которые и входят в уравнения самосогласования на эффективные потенциалы $\widetilde{U}_{i,q}^{p,k}$:

$$\widetilde{U}_{i,q}^{p,k}=U_q^{p,k}+\widetilde{D}_{i,q}^{p,k}.$$

В случае, если теория возмущений применима, т. е.

$$\chi_{0,q}^{p,k}\approx\frac{1}{2}\left(\delta_q^0+\delta_{k-p}^{q}\right),$$
$$\chi_{1,q}^{p,k}\approx\frac{1}{2}\left(\delta_q^0-\delta_{k-p}^{q}\right), \quad (11)$$

полученные уравнения мало отличаются от выведенных в [7]. Нас же интересует случай, когда некоторые решения образуют состояния дискретного спектра, и соотношения (11) для них не выполняются.

Ограничимся рассмотрением случая, когда гамильтониан H_{eff} для пар с импульсом P имеет одно связанное решение с нулевым спином. Для всех остальных пар с $p+k=P$ выполняется условие $\chi_{0,q}^{p,k}\approx\frac{1}{2}\left(\delta_q^0+\delta_{k-p}^{q}\right)$; задача состоит в том, чтобы определить, для какой из пар это соотношение не выполнено.

Заметим, что основную роль в формировании связанных состояний принимает участие длинноволновая часть электрон-электронного взаимодействия. Энергетический знаменатель при рассмотрении межэлектронного взаимодействия двухчастичных состояний по теории возмущений $\sim(p-k)q$, поэтому связанная пара имеет происхождение от состояния двух свободных электронов с импульсами, удовлетворяющими условию $p\approx k$. Это значит, что связанную пару образуют электроны, находящиеся либо на одном узле импульсной решетки, либо на соседних.

Будем считать, что энергия связи пары E_b значительно превышает поправки $E_i^{p,k}$ для тех пар, спектр которых хорошо описывается теорией возмущений. Тогда для кристалла размерами $L\times L\times L$ с периодическими граничными условиями приходим к следующему модельному гамильтониану:

$$H_{\rm mod}=\sum_{\sigma,k}T_kC_{\sigma,k}^{+}C_{\sigma,k}-\sum_{k}E_bC_{\uparrow,k}^{+}C_{\downarrow,k}^{+}C_{\downarrow,k}C_{\uparrow,k}-$$
$$-\frac{1}{4}\sum E_b\left(C_{\uparrow,p}^{+}C_{\downarrow,k}^{+}-C_{\downarrow,p}^{+}C_{\uparrow,k}^{+}\right)\times$$
$$\times\left(C_{\downarrow,k}C_{\uparrow,p}-C_{\uparrow,k}C_{\downarrow,p}\right); \quad (12)$$
$$\left\{p\neq k;\left|p_\alpha-k_\alpha\right|\leq 2\pi/L,\alpha=x,y,z\right\}$$

Энергия квазичастицы $\widetilde{E}_p$ в приближении среднего поля со стороны ближайших соседей по импульсной решетке определяется уравнением

$$\widetilde{E}_p C^+_{\sigma,k} = [H_{\text{mod}}, C^+_{\sigma,k}] = (T_k - 14E_b\rho_k)C^+_{\sigma,k}, \quad (13)$$

где ρ_k — среднее число заполнения в окрестности узла k.

Уравнение (13) позволяет получить качественную картину изменения электронного спектра при изменении температуры [8]. При самых низких температурах в спектре имеется щель величиной $2\Delta_0 = 14E_b$, при повышении температуры щель уменьшается, в точке перехода энергетический спектр имеет особенность, а при температуре выше точки перехода щель исчезает.

Оценить температуру перехода можно из уравнения $\partial\rho/\partial E\,|_{\widetilde{E}=\mu} = -\infty$, где μ — химпотенциал электронов.

Предполагая для ρ ферми-дираковскую функ-цию распределения, температуру перехода T_S можно оценить следующим образом [8]:

$$T_S = \frac{\Delta_0}{2}.$$

Образуемая щель в системе, в отличие от модели БКШ, — сверхпроводящая. Во-первых, можно получить такое состояние системы, сдвинув волновую функцию основного состояния в импульсном пространстве, не увеличивая энергии межэлектронного взаимодействия. Во-вторых, столкновительный интеграл в такой системе вымораживается по экспоненциальному закону.

Основное состояние системы образует сверхпроводящий конденсат. Термически возбужденные электроны вне импульсного пространства, занимаемого конденсатом, и дырки внутри конденсата образуют нормальный газ, который, в отличие от теории БКШ, электронейтрален. Все процессы рассеяния в системе имеют место только для нормального газа, не затрагивая состояния конденсата. Поэтому время релаксации конденсата с ненулевым током оценить крайне трудно, скорее всего, речь идет об астрономических величинах.

Еще раз заметим, что преобразования (8) и (10) в случае, если в системе появляются двухчастичные решения дискретного спектра, носят формальный, вспомогательный характер для определения модельного гамильтониана в пространстве волновых функций двухчастичных собственных состояний. Эти преобразования позволяют получить также и выражения для операторов наблюдаемых величин, соответствующих введенному модельному гамильтониану. Так, для оператора $c^+_{\sigma,p}c_{\sigma,p+1}$, используемого при определении плотности тока, имеем

$$\begin{aligned} c^+_{\sigma,p}c_{\sigma,p+1} = {} & C^+_{\sigma,p}C_{\sigma,p+1} - \sum_{\nu,k} C^+_{\sigma,p}C^+_{\nu,k}C_{\nu,k}C_{\sigma,p+1} + \\ & + \sum_{\nu,k}\sum_{z,y} \chi^{*k,p}_{1,z+y}\chi^{k+z,p-z+1}_{1,y} C^+_{\sigma,p}C^+_{\nu,k}C_{\nu,k+z}C_{\sigma,p-z+1} + \\ & + \sum_{\nu,k}\sum_{z,y} \chi^{*k,p}_{0,z+y}\chi^{k+z,p-z+1}_{0,y} C^+_{\sigma,p}C^+_{-\sigma,k}C_{-\sigma,k+z}C_{\sigma,p-z+1}. \end{aligned} \quad (14)$$

Это уравнение будет использовано при вычислении отклика конденсата на электромагнитное поле.

Поведение конденсата в электромагнитном поле

Появление в рассматриваемой системе электромагнитного поля описывается введением в гамильтониан дополнительного члена H_{em}. Общий гамильтониан системы при этом выглядит следующим образом:

$$H_{tot} = H_{\text{mod}} + H_{em},$$

где

$$H_{em} = -\frac{1}{c}\sum_q A_{-q,t} j_q;$$

$$A_{q,t} = L^{-3/2}\int A(r,t)e^{-igr}dr;$$

$$j_q = -\frac{eL^{-3/2}}{2m}\sum_{\sigma,k}(2k+q)c^+_{\sigma,k}c_{\sigma,k+q} - \frac{e^2L^{-3}}{mc}\sum_{\sigma,k,1} A_{q-1,t}c^+_{\sigma,k}c_{\sigma,k+1},$$

а выражение для $c^+_{\sigma,p}c_{\sigma,p+q}$ можно подставить из (14).

В представлении Шредингера будем искать волновую функцию основного состояния системы, совпадающую с волновой функцией сверхпроводящего конденсата, в виде

$$|\Phi_t\rangle = \prod_{\sigma,k<K_F} \widetilde{C}^+_{\sigma,k}(t)|0\rangle,$$

а для $\widetilde{C}^+_{\sigma,k}(t)$ — будем предполагать выполнение соотношения

$$i\frac{\partial \widetilde{C}^+_{\sigma,k}(t)}{\partial t} = \left[H_{tot}, \widetilde{C}^+_{\sigma,k}(t)\right].$$

Тогда, очевидно, будет выполняться уравнение Шредингера $i\frac{\partial}{\partial t}|\Phi_t\rangle = H_{tot}|\Phi_t\rangle$ и, соответственно, эволюция системы во времени будет правильно описана. Легко убедиться также, что одновременные операторы $\widetilde{C}^+$ и $\widetilde{C}$ удовлетворяют обычным коммутационным соотношениям для фермионов.

В первом порядке теории возмущений по параметру A для $\widetilde{C}^{+}_{\sigma,p}(t)$ можно получить

$$\begin{aligned}
\widetilde{C}^{+}_{\sigma,p}(t) &= \sum_{x}\phi^{p}_{x,t}C^{+}_{\sigma,x} + \sum_{x,y}\sum_{k,z}\left(\psi^{1,p,k}_{x,y,t} - \phi^{p}_{x,t}\phi^{k}_{y,t}\right)\times \\
&\times \phi^{*k}_{z,t}C^{+}_{\sigma,x}C^{+}_{\sigma,y}C_{\sigma,z} + \\
&+ \sum_{x,y}\sum_{k,z}\left(\psi^{0,p,k}_{x,y,t} + \psi^{1,p,k}_{x,y,t} - \phi^{p}_{x,t}\phi^{k}_{y,t}\right)\times \\
&\times \phi^{*k}_{z,t}C^{+}_{\sigma,x}C^{+}_{-\sigma,y}C_{-\sigma,z}; \\
\widetilde{C}_{\sigma,p}(t) &= \sum_{x}\phi^{*p}_{x,t}C_{\sigma,x} + \sum_{x,y}\sum_{k,z}\left(\psi^{*1,p,k}_{x,y,t} - \phi^{*p}_{x,t}\phi^{*k}_{y,t}\right)\times \\
&\times \phi^{k}_{z,t}C^{+}_{\sigma,z}C_{\sigma,y}C_{\sigma,x} + \\
&+ \sum_{x,y}\sum_{k,z}\left(\psi^{*0,p,k}_{x,y,t} + \psi^{*1,p,k}_{x,y,t} - \phi^{*p}_{x,t}\phi^{*k}_{y,t}\right)\times \\
&\times \phi^{k}_{z,t}C^{+}_{-\sigma,z}C_{-\sigma,y}C_{\sigma,x},
\end{aligned} \tag{15}$$

причем функции ϕ и ψ удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\begin{aligned}
& i\sum_{x}\frac{\partial\phi^{p}_{x,t}}{\partial t}C^{+}_{\sigma,x}|0\rangle = H_{tot}\sum_{x}\phi^{p}_{x,t}C^{+}_{\sigma,x}|0\rangle; \\
& i\sum_{x,y}\frac{\partial\psi^{0,p,k}_{x,y,t}}{\partial t}\left(C^{+}_{\sigma,x}C^{+}_{-\sigma,y} - C^{+}_{-\sigma,x}C^{+}_{\sigma,y}\right)|0\rangle = \\
& = H_{tot}\sum_{x,y}\psi^{0,p,k}_{x,y,t}\left(C^{+}_{\sigma,x}C^{+}_{-\sigma,y} - C^{+}_{-\sigma,x}C^{+}_{\sigma,y}\right)|0\rangle; \\
& i\sum_{x,y}\frac{\partial\psi^{1,p,k}_{x,y,t}}{\partial t}C^{+}_{\sigma,x}C^{+}_{\sigma,y}|0\rangle = H_{tot}\sum_{x,y}\psi^{1,p,k}_{x,y,t}C^{+}_{\sigma,x}C^{+}_{\sigma,y}|0\rangle.
\end{aligned} \tag{16}$$

Предполагая возможность применения теории возмущений при решении уравнений (16), с точностью до линейных по A членов можно потребовать выполнения соотношений

$$\begin{aligned}
\phi^{p}_{x,t} &= \delta^{p}_{x}e^{-iT_{p}t}; \\
\psi^{0,p,k}_{x,y,t} &= \frac{1}{2}\left(\delta^{p}_{x}\delta^{k}_{y} + \delta^{p}_{y}\delta^{k}_{x}\right)e^{-i\left(T_{p}+T_{k}+E^{p,k}_{0}\right)t}; \\
\psi^{1,p,k}_{x,y,t} &= \frac{1}{2}\left(\delta^{p}_{x}\delta^{k}_{y} - \delta^{p}_{y}\delta^{k}_{x}\right)e^{-i\left(T_{p}+T_{k}+E^{p,k}_{1}\right)t}.
\end{aligned}$$

Идея вычислений состоит в следующем: необходимо выразить плотность тока j в операторах $\widetilde{C}^{+}$ и $\widetilde{C}$, тогда вычисление среднего значения $\langle j\rangle$ элементарно.

С этой целью определим обратное к (15) преобразование:

$$\begin{aligned}
C^{+}_{\sigma,x} &= \sum_{p}\phi^{*p}_{x,t}\widetilde{C}^{+}_{\sigma,p} + \\
&+ \sum_{p,k}\sum_{y,z}\left(\psi^{*1,p,k}_{x,y,t} - \phi^{*p}_{x,t}\phi^{*k}_{y,t}\right)\phi^{z}_{y,t}\widetilde{C}^{+}_{\sigma,p}\widetilde{C}^{+}_{\sigma,k}\widetilde{C}_{\sigma,z} + \\
&+ \sum_{p,k}\sum_{y,z}\left(\psi^{*0,p,k}_{x,y,t} + \psi^{*1,p,k}_{x,y,t} - \phi^{*p}_{x,t}\phi^{*k}_{y,t}\right)\times \\
&\times \phi^{r}_{y,t}\widetilde{C}^{+}_{\sigma,p}\widetilde{C}^{+}_{-\sigma,k}\widetilde{C}^{+}_{-\sigma,z}; \\
C_{\sigma,x} &= \sum_{p}\phi^{p}_{x,t}\widetilde{C}_{\sigma,p} + \\
&+ \sum_{p,k}\sum_{y,z}\left(\psi^{1,p,k}_{x,y,t} - \phi^{p}_{x,t}\phi^{k}_{y,t}\right)\phi^{*z}_{y,t}\widetilde{C}^{+}_{\sigma,z}\widetilde{C}_{\sigma,k}\widetilde{C}_{\sigma,p} + \\
&+ \sum_{p,k}\sum_{y,z}\left(\psi^{0,p,k}_{x,y,t} + \psi^{1,p,k}_{x,y,t} - \phi^{p}_{x,t}\phi^{k}_{y,t}\right)\phi^{*z}_{y,t}\widetilde{C}^{+}_{-\sigma,z}\widetilde{C}_{-\sigma,k}\widetilde{C}_{\sigma,p}.
\end{aligned}$$

Тогда в операторах $\widetilde{C}^{+}$ и $\widetilde{C}$ выражение $c^{+}_{\sigma,k}c_{\sigma,k+1}$, входящее в выражение для плотности тока, имеет вид

$$\begin{aligned}
c^{+}_{\sigma,p}c_{\sigma,p+1} &= \sum_{p',p''}\phi^{*p'}_{p,t}\phi^{p''}_{p+1,t}\widetilde{C}^{+}_{\sigma,p'}\widetilde{C}_{\sigma,p''} - \\
&- \sum_{\nu,k'}\sum_{p',p''}\phi^{*p'}_{p,t}\phi^{p''}_{p+1,t}\widetilde{C}^{+}_{\sigma,p'}\widetilde{C}^{+}_{\nu,k'}\widetilde{C}_{\nu,k'}\widetilde{C}_{\sigma,p''} + \\
&+ \sum_{k,p,z}\sum_{y}\chi^{*k,p}_{1,z+y}\chi^{k+z,p-z+1}_{1,y}\times \\
&\times \sum_{\nu,k',k''}\sum_{p',p''}\psi^{*1,p',k'}_{p,k,t}\psi^{1,p'',k''}_{p-z+1,k+z,t}\widetilde{C}^{+}_{\sigma,p'}\widetilde{C}^{+}_{\nu,k'}\widetilde{C}_{\nu,k''}\widetilde{C}_{\sigma,p''} + \\
&+ \sum_{k,p,z}\sum_{y}\chi^{*k,p}_{1,z+y}\chi^{k+z,p-z+1}_{1,y}\times \\
&\times \sum_{\nu,k',k''}\sum_{p',p''}\psi^{*0,p',k'}_{p,k,t}\psi^{0,p'',k''}_{p-z+1,k+z,t}\widetilde{C}^{+}_{\sigma,p'}\widetilde{C}^{+}_{-\sigma,k'}\widetilde{C}_{-\sigma.k''}\times \\
&\times \widetilde{C}_{\sigma,p''} + \sum_{k,p,z}\sum_{y}\chi^{*k,p}_{0,z+y}\chi^{k+z,p-z+1}_{0,y}\sum_{\nu,k',k''}\sum_{p',p''}\psi^{*1,p',k'}_{p,k,t}\times \\
&\times \psi^{1,p'',k''}_{p-z+1,k+z,t}\widetilde{C}^{+}_{\sigma,p'}\widetilde{C}_{-\sigma,k'}\widetilde{C}_{-\sigma,k''}\widetilde{C}_{\mu,p''} + \\
&+ \sum_{k,p,z}\sum_{y}\chi^{*k,p}_{0,z+y}\chi^{k+z,p-z+1}_{0,y}\sum_{\nu,k',k''}\sum_{p',p''}\psi^{*0,p',k'}_{p,k,t}\times \\
&\times \psi^{0,p'',k''}_{p-z+1,k+z,t}\widetilde{C}^{+}_{\sigma,p'}\widetilde{C}^{+}_{-\sigma,k'}\widetilde{C}_{-\sigma,k''}C_{\sigma,p''}.
\end{aligned}$$

Ограничиваясь только нерелятивисткими членами в уравнении для $\dfrac{\partial j_q}{\partial t}$ с точностью до членов второго порядка по параметру A, можно получить

$$\left\langle\frac{\partial j_q}{\partial t}\right\rangle = -\frac{e^2L^{-3}}{mc}\sum_{\sigma,p,l}\frac{\partial A_{q-1}}{\partial t}\left\langle c^{+}_{\sigma,p}c_{\sigma,p+1}\right\rangle = -\frac{e^2 n}{mc}\frac{\partial A_q}{\partial t},$$

или

$$\left\langle j_q\right\rangle = -\frac{e^2 n}{mc}A_q,$$

что и составляет суть гипотезы Лондонов.

Заключение

Существующие физически содержательные работы по теории сверхпроводимости можно разделить на два класса

1. Системы с бозе-эйнштейновской конденсацией.

В таких работах вводятся гамильтонианы с межэлектронным притяжением, которые рассматриваются как исходные. При этом бозонные операторы, соответствующие связанным состояниям электронных пар, используются при определении основного состояния системы.

Работы, посвященные этой проблеме, в целом не систематизированы, поэтому трудно выделить наиболее значимые. Однако следует отметить, что некоторые из этих работ предшествовали теории БКШ [9], поэтому использование термина "куперовы пары" выглядит в этом случае не очень удачно.

К работам с бозе-эйнштейновской конденсацией можно, с известной оговоркой, отнести и модификации популярной *t—j*-модели в купратах, так как при определенном выборе параметров модели, например $j > t$, возникает возможность образования связанных пар. Условие $j > t$ связано с коротковолновостью взаимодействия в форме Хаббарда и принципом неопределенности Гейзенберга. Сами авторы называют выбор таких параметров "нефизическим" ("unphysical") [10].

Введение исходного гамильтониана в работах, посвященных бозе-конденсации в газе взаимодействующих фермионов, либо не обосновано, либо вызывает скепсис у большинства физиков [11], в этом смысле можно считать, что авторы работ, связанных с бозе-конденсацией, исследуют до сих пор гипотетические объекты.

Понятие бозе-конденсата в таких системах имеет четко выраженный смысл, поэтому теория Гинзбурга-Ландау, использующая волновую функцию бозе-конденсата в определении параметра порядка системы, очевидно, справедлива.

2. Системы с фермионной конденсацией.

В этом случае межэлектронное притяжение возникает только у гамильтониана H_{eff}, учитывающего электрон-электронные корреляции. В то же время гамильтониан электрон-электронного взаимодействия (6), учитывающий перенормировку в системе электронов и фононов, не имеет связанных решений. Гамильтониан H_{eff} рассчитывается в предположении, что волновая функция основного состояния по форме совпадает с функцией основного состояния нормального металла $|\Phi_0\rangle = \prod_{\sigma,k<K_F} C^+_{\sigma,k}|0\rangle$, вопрос заключается только в выборе операторов $C^+_{\sigma,k}$. Эффективный потенциал межэлектронного взаимодействия рассчитывается в рамках уточнения операторов $C^+_{\sigma,k}$ при решении проблемы перенормировки и учете корреляций в электронной системе. Диагонализованное с точностью до обменных членов (оно же модельное) представление гамильтониана (12) совместно с конфигурацией чисел заполнения основного состояния предложенного вида.

Обоснование возможности возникновения эффективного межэлектронного притяжения в реальных системах приведено в работе [7].

Феноменологической теории такого рода систем, по видимому, пока не существует.

Дополнение

С учетом уравнения (9) можно потребовать выполнения следующих условий:

$$\chi^{p,k}_{0,q} = \chi^{p,k}_{0,k-p-q}, \chi^{p,k}_{0,q} = \chi^{k,p}_{0,-q};$$

$$\chi^{p,k}_{1,q} = -\chi^{p,k}_{1,k-p-q}, \chi^{p,k}_{1,q} = \chi^{k,p}_{1,-q};$$

$$\sum_x \chi^{p,k+q}_{0,x}\chi^{k,p+q}_{0,q-x} = \frac{1}{2}\left(\delta^0_q + \delta^p_k\right);$$

$$\sum_x \chi^{p,k+q}_{1,x}\chi^{k,p+q}_{1,q-x} = \frac{1}{2}\left(\delta^0_q - \delta^p_k\right).$$

Выполнение этих условий приводит к тому, что фермионные коммутационные соотношения для операторов C^+ и C так же, как и обратное преобразование (10), нарушены только начиная с четырехлинейных выражений по операторам рождения и уничтожения. Это обстоятельство собственно и используется при построении модельного гамильтониана системы.

Авторы выражают благодарность д-ру физ.-мат. наук, профессору, академику Академии естественных наук России, главному научному сотруднику Института общей физики РАН А. А. Рухадзе за помощь в постановке задачи.

Литература

1. *Bardeen J., Cooper L. N., Schrieffer J. R.* // Phys. Rev. 1957. V. 106. P. 162.

2. *Липкин Г.* Квантовая механика. — М.: Мир, 1977; *Harry J. Lipkin.* Quantum Mechanics. — American Elsevier publishing Co., Inc., New York, 1973.

3. *Анималу А.* Квантовая теория кристаллических твердых тел. — М.: Мир, 1981; *Animalu A. O. E.* Intermediate Quantum Theory of Crystalline Solids. — Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1977.

4. *Элиашберг Г. М.*// ЖЭТФ. 1960. Т. 38. С. 366; *Eliashberg G. M.* // JETP. 1960. V. 11. P. 696.

5. *Максимов Е. Г., Саврасов Д. Ю., Саврасов С. Ю.*// УФН. 1997. Т. 167. № 4. С. 353; *Maksimov E. G., Savrasov D. Yu., Savrasov S. Yu.* // Usp. Fiz. Nauk (Rus). 1997. V. 40. №. 4. P. 337.

6. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости/ Под. ред. В. Л. Гинзбурга и Д. А. Киржница— М., 1977; Eds. *Ginzburg V. L., Kirzhnits D. A.*. High-Temperature Superconductivity. — New York: Consultant Bureau, 1982.
7. *Yurin I. M., Kalinin V. B.* // e-print cond-mat/0102407; *Юрин И. М., Калинин В. Б.* // Прикладная физика. 2003. № 2. С. 12.
8. *Yurin I. M., Kalinin V. B.*// e-print cond-mat/0202486.
9. *Schafroth M. R.*// Phys. Rev. 1954. V. 96. P. 1442.
10. *Pryadko L. P., Steven A. Kivelson, Oron Zachar* // e-print cond-mat/0306342.
11. *Norman M. R.* // J. Phys. Chem. Sol. 1993. V. 54. №. 10. P. 1165.

Superconductivity in the system with ordinary bound pairs

I. M.Yurin, V. B. Kalinin
Institute of Physical Chemistry, Moscow, Russia

On a basis of earlier substantiated expression for effective potential of electron-electron attraction in metals the assumption of an opportunity of formation of ordinary bound electron pairs is put forward. It was shown that in distinction from the Cooper pair, the energy of the bound pair in this approach is negative in the centrum of mass of the pair. This fact changes the pattern of the superconductivity phenomenon in the proposed model. First, no Bose condensation of electron pairs does occur in the system proceeding from the proposed model. Second, the energy gap in the one-particle spectrum appears due to the effect of a "mean field" on the energy of electron state from the side of occupied states, the nearest neighbors over the momenta grid. Londons' hypothesis is substantiated in the quasi-classical approximation; therefore this gap is proved to be linked with the superconducting properties of the system.