

Л. Д. ЛАНДАУ и Е. М. ЛИФШИЦ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

В десяти томах

МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ
2002

Том IX

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Часть 2

Теория конденсированного состояния

Издание третье, стереотипное

Под редакцией Л.П. Питаевского

*Рекомендовано Министерством образования
Российской Федерации
в качестве учебного пособия для студентов
физических специальностей университетов*

УДК 530.145
Л 22
ББК 22.31

Л а н д а у Л. Д., Л и ф ш и ц Е. М. **Теоретическая физика:** Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. IX / Л и ф ш и ц Е. М., П и т а е в с к и й Л. П. **Статистическая физика.** В 2 ч. Ч. 2. **Теория конденсированного состояния.** — 3-е изд., стереот. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. — 496 с. — ISBN 5-9221-0124-2.

Книга посвящена квантовой теории конденсированного состояния вещества. Подробно изложена теория квантовых жидкостей — бозевской и фермиевской. Большое внимание уделяется методическим вопросам — теории гриновских функций макроскопических тел. Во 2-е издание внесены дополнительные материалы, отражающие современное состояние предмета.

2-е изд. — 2000 г.

Для студентов старших курсов физических специальностей вузов, а также аспирантов и научных работников соответствующих специальностей.

Ил. 18.

Ответственный редактор курса «Теоретическая физика» академик РАН, доктор физико-математических наук *Л. П. Питаевский*

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие ко второму изданию	8
Предисловие к первому изданию	8
Глава I. Нормальная ферми-жидкость	
1. Элементарные возбуждения в квантовой ферми-жидкости . . .	11
2. Взаимодействие квазичастиц	19
3. Магнитная восприимчивость ферми-жидкости	24
4. Нулевой звук	25
5. Спиновые волны в ферми-жидкости	32
6. Вырожденный почти идеальный ферми-газ с отталкиванием между частицами	34
Глава II. Гриновские функции ферми-системы при $T = 0$	
7. Функция Грина макроскопической системы	44
8. Определение энергетического спектра по функции Грина . . .	51
9. Функция Грина идеального ферми-газа	57
10. Распределение частиц ферми-жидкости по импульсам	60
11. Вычисление термодинамических величин по функции Грина .	61
12. Ψ -операторы в представлении взаимодействия	62
13. Диаграммная техника для ферми-системы	67
14. Собственно-энергетическая функция	76
15. Двухчастичная функция Грина	80
16. Связь вершинной функции с амплитудой рассеяния квазичастиц	85
17. Вершинная функция при малых передачах импульса	88
18. Связь вершинной функции с функцией взаимодействия квази- частиц	95
19. Тождества для производных от функции Грина	98
20. Вывод связи между предельным импульсом и плотностью . . .	103
21. Гриновская функция почти идеального ферми-газа	106
Глава III. Сверхтекучесть	
22. Элементарные возбуждения в квантовой бозе-жидкости	113
23. Сверхтекучесть	117
24. Фононы в жидкости	124
25. Вырожденный почти идеальный бозе-газ	128
26. Волновая функция конденсата	134
27. Температурная зависимость плотности конденсата	139
28. Поведение сверхтекучей плотности вблизи λ -точки	141
29. Квантованные вихревые нити	145
30. Неоднородный бозе-газ	151
31. Гриновские функции бозе-жидкости	156
32. Диаграммная техника для бозе-жидкости	163

33. Собственно-энергетические функции	166
34. Распад квазичастиц	171
35. Свойства спектра вблизи точки его окончания	176
35*. Сверхтекучесть двумерных систем	182
Глава IV. Функции Грина при конечных температурах	
36. Гриновские функции при конечных температурах	189
37. Температурные функции Грина	195
38. Диаграммная техника для температурных функций Грина	199
Глава V. Сверхпроводимость	
39. Сверхтекучий ферми-газ. Энергетический спектр	203
40. Сверхтекучий ферми-газ. Термодинамические свойства	210
41. Гриновские функции сверхтекучего ферми-газа	215
42. Температурные гриновские функции сверхтекучего ферми-газа	222
43. Сверхпроводимость металлов	225
44. Сверхпроводящий ток	227
45. Уравнение Гинзбурга–Ландау	232
46. Поверхностное натяжение на границе сврхпроводящей и нормальной фаз	241
47. Два рода сверхпроводников	247
48. Структура смешанного состояния	251
49. Диамагнитная восприимчивость выше точки перехода	260
50. Эффект Джозефсона	264
51. Связь тока с магнитным полем в сверхпроводнике	268
52. Глубина проникновения магнитного поля в сверхпроводник	276
53. Сверхпроводящие сплавы	278
54. Эффект Купера при отличных от нуля орбитальных моментах пары	281
Глава VI. Электроны в кристаллической решетке	
55. Электрон в периодическом поле	287
56. Влияние внешнего поля на движение электрона в решетке	297
57. Квазиклассические траектории	302
58. Квазиклассические уровни энергии	307
59. Тензор эффективных масс электрона в решетке	311
60. Симметрия состояний электрона в решетке в магнитном поле	316
61. Электронный спектр нормальных металлов	321
62. Гриновская функция электронов в металле	326
63. Эффект де Гааза–ван Альвена	331
64. Электрон-фононное взаимодействие	340
65. Влияние электрон-фононного взаимодействия на электронный спектр в металле	344
66. Электронный спектр твердых диэлектриков	349
67. Электроны и дырки в полупроводниках	353
68. Электронный спектр вблизи точки вырождения	356
Глава VII. Магнетизм	
69. Уравнение движения магнитного момента в ферромагнетике	362
70. Магноны в ферромагнетике. Спектр	369
71. Магноны в ферромагнетике. Термодинамические величины	375
72. Спиновый гамилтониан	382
73. Взаимодействие магнонов	388
74. Магноны в антиферромагнетике	394
74*. Антиферромагнитное состояние спинового гамилтониана	400

Глава VIII. Электромагнитные флуктуации

75. Гриновская функция фотона в среде	406
76. Флуктуации электромагнитного поля	412
77. Электромагнитные флуктуации в неограниченной среде	414
78. Флуктуации тока в линейных цепях	421
79. Температурная функция Грина фотона в среде	422
80. Тензор напряжений ван-дер-ваальсовых сил	427
81. Молекулярные силы взаимодействия между твердыми телами. Общая формула	435
82. Молекулярные силы взаимодействия между твердыми телами. Предельные случаи	440
83. Асимптотическое поведение корреляционной функции в жидкости	446
84. Операторное выражение для диэлектрической проницаемости	450
85. Вырожденная плазма	454

Глава IX. Гидродинамические флуктуации

86. Динамический формфактор жидкости	463
87. Правила сумм для формфактора	468
88. Гидродинамические флуктуации	473
89. Гидродинамические флуктуации в неограниченной среде . . .	478
90. Операторные выражения для кинетических коэффициентов .	484
91. Динамический формфактор ферми-жидкости	487
Некоторые обозначения	491
Предметный указатель	492

ПРЕДИСЛОВИЕ КО ВТОРОМУ ИЗДАНИЮ

Над подготовкой нового издания этой книги мне, к сожалению, пришлось работать одному. Мой соавтор и друг Е.М. Лифшиц скончался в 1985 году. Хотя в теории конденсированного состояния вещества в последние годы были получены многие важные результаты, я не считал необходимым подвергать книгу существенной переработке. В книге изложены основы теории и это изложение, как кажется, выдержало испытание временем. Тем не менее некоторые дополнения и изменения оказались необходимыми.

Добавлен параграф 35*, посвященный теории фазового перехода Березинского–Костерлица–Тоулесса в сверхтекучих пленках. Эта теория составляет основу современных представлений о процессах, происходящих в двумерных системах, и ее создание существенно обогатило наши представления о природе фазовых переходов.

Глава VII, посвященная магнетизму, подверглась существенной переработке. В частности, добавлен § 74*, в котором рассматривается применение метода Холштейна и Примакова к исследованию свойств антиферромагнетиков. Этот метод играет важную роль в микроскопической теории магнетизма и его включение в книгу представляется необходимым.

Одним из важнейших достижений последних лет в области физики явилось открытие высокотемпературных сверхпроводников. Однако, несмотря на огромные усилия экспериментаторов и теоретиков, природа этого интересного явления остается во многом непонятной. Неясно даже, какое именно взаимодействие ответственно за переход в сверхпроводящее состояние. При таком положении дел мне пришлось ограничиться лишь краткими замечаниями по этому вопросу.

Июнь 2000 г.

Л. П. Питаевский

ПРЕДИСЛОВИЕ К ПЕРВОМУ ИЗДАНИЮ

Если кратко охарактеризовать содержание предлагаемого читателю IX тома «Курса теоретической физики», то можно сказать, что он посвящен квантовой теории конденсированного состояния вещества. Он начинается с подробного изложения теории квантовых жидкостей — бозевской и фермиевской. Эта теория, созданная Л. Д. Ландау вслед за экспериментальными открытиями П. Л. Капицы, представляет в настоящее время самостоятельный раздел теоретической физики. Его важность определяется даже не столько теми интересными явлениями, которые происходят в жидких изотопах гелия, сколько тем, что представления о квантовой жидкости и ее спектре являются по существу основой квантового описания макроскопических тел.

Например, для глубокого понимания свойств металлов необходимо рассматривать электроны в них как ферми-жидкость. Свойства электронной жидкости, однако, усложняются наличием кристаллической решетки, и предварительное изучение более простого случая однородной и изотропной жидкости является необходимым шагом в построении теории. Точно так же сверхпроводимость металлов, которую можно рассматривать как сверхтекучесть электронной жидкости, трудно ясно понять без предварительного знания более простой теории сверхтекучести бозе-жидкости.

Неотъемлемую часть математического аппарата современной статистической физики составляет аппарат гриновских функций. Это связано отнюдь не только с теми вычислительными удобствами, которые предоставляет диаграммная техника вычисления гриновских функций. Дело прежде всего в том, что гриновские функции непосредственно определяют спектр элементарных возбуждений тела и потому являются тем языком, на котором свойства этих возбуждений наиболее естественно описывать. Поэтому в настоящем томе методическим вопросам — теории гриновских функций макроскопических тел — уделено значительное внимание. Хотя основные идеи метода одни и те же для всех систем, конкретный вид диаграммной техники различен в разных случаях. Представляется естественным в этой связи развивать эти методы на примере тех же изотропных квантовых жидкостей, где сущность метода выявляется в чистом

виде, без усложнений, вносимых пространственной неоднородностью, наличием нескольких сортов частиц и т. п.

По аналогичным причинам макроскопическую теорию сверхпроводимости мы излагаем на простой модели изотропного ферми-газа со слабым взаимодействием, отвлекаясь от усложнений, связанных с наличием кристаллической решетки кулоновским взаимодействием.

В связи с главами, посвященными электронам в кристаллической решетке и теории магнетизма, подчеркнем лишний раз, что предлагаемая книга — часть курса теоретической физики и ни в коей мере не призвана заменить собой курс теории твердого тела. В соответствии с этим здесь рассматриваются лишь вопросы наиболее общего характера и не затрагиваются как вопросы, требующие использования конкретных экспериментальных данных, так и те из расчетных методов, которые не имеют под собой ясной теоретической базы. Напомним также, что к данному тому не относятся кинетические свойства твердых тел, которые мы предполагаем рассмотреть в следующем, заключительном томе курса.

Наконец, в этой книге излагаются также теория электромагнитных флуктуаций в материальных средах и теория гидродинамических флуктуаций. Первая из них входила ранее в VIII том. Ее перенесение в настоящий том вызвано необходимостью применения гриновских функций, что позволяет придать всей теории более простой и удобный для применения вид. Кроме того, естественно рассматривать электромагнитные и гидродинамические флуктуации в одном томе.

Л. Д. Ландау отсутствует среди фактических авторов этой книги. Но читатель легко заметит, сколь часто встречается его имя в тексте книги: ему лично или ему в сотрудничестве с его учениками принадлежит значительная доля излагаемых здесь результатов. Многолетнее общение с ним дает нам основание надеяться, что нам удалось верно отразить его точку зрения по этим вопросам — разумеется, с учетом также и того нового, что было внесено в них за 15 лет, прошедших со дня, когда так трагически прервалась его деятельность.

Мы хотели бы поблагодарить А. Ф. Андреева, И. Е. Дзялошинского и И. М. Лифшица за постоянное обсуждение вопросов, рассмотренных в этой книге. Мы извлекли также много пользы из известной книги А. А. Абрикосова, Л. П. Горькова и И. Е. Дзялошинского — одной из первых книг в физической литературе, посвященных новым методам статистической физики. Наконец, мы благодарны Л. П. Горькову и Ю. Л. Климонтовичу, прочитавшим книгу в рукописи и сделавшим ряд замечаний.

Апрель 1977 г.

Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский

НОРМАЛЬНАЯ ФЕРМИ-ЖИДКОСТЬ

§ 1. Элементарные возбуждения в квантовой ферми-жидкости

При температурах настолько низких, что де-бройлевская длина волны, отвечающая тепловому движению атомов жидкости, становится сравнимой с межатомными расстояниями, макроскопические свойства жидкости определяются квантовыми эффектами. Теория таких квантовых жидкостей представляет значительный принципиальный интерес, хотя в природе существуют лишь два объекта такого рода, являющиеся жидкостями в буквальном смысле этого слова; это — жидкие изотопы гелия (^3He и ^4He) при температурах $\sim 1\text{--}2\text{ K}$. Все другие вещества затвердевают значительно раньше, чем становятся существенными квантовые эффекты в них. Напомним в этой связи, что, согласно классической механике, все тела должны были бы быть твердыми при абсолютном нуле (см. V, § 64); гелий же, благодаря особой слабости взаимодействия его атомов, остается жидким вплоть до температур, когда вступают в силу квантовые явления, после чего затвердевание уже перестает быть обязательным.

Вычисление термодинамических величин макроскопического тела требует знания спектра его уровней энергии. Разумеется, в случае системы сильно взаимодействующих частиц, каковой является квантовая жидкость, речь должна идти именно об уровнях, соответствующих квантовомеханическим стационарным состояниям всей жидкости в целом, а отнюдь не состояниям отдельных атомов. При вычислении статистической суммы в области достаточно низких температур должны учитываться лишь слабо возбужденные уровни энергии жидкости — уровни, расположенные не слишком высоко над основным.

Следующее обстоятельство имеет фундаментальное значение для всей теории. Всякое слабо возбужденное состояние макроскопического тела можно рассматривать в квантовой механике как совокупность отдельных *элементарных возбуждений*. Эти элементарные возбуждения ведут себя как некоторые *квазичастицы*, движущиеся в занимаемом телом объеме и обладающие определенными энергиями ϵ и импульсами $\mathbf{p}$. Вид зависимости $\epsilon(\mathbf{p})$ (или, как говорят, *закон дисперсии* элементарных возбуждений) является важной характеристикой энергетического спектра тела. Подчеркнем лишний раз, что понятие элементарных возбуждений возникает как способ квантовомеханического

описания коллективного движения атомов тела и квазичастицы отнюдь не могут быть отождествлены с отдельными атомами или молекулами.

Существуют различные типы энергетических спектров, которыми могут, в принципе, обладать квантовые жидкости. В зависимости от типа спектра жидкость будет иметь также и совершенно различные макроскопические свойства. Мы начнем с изучения жидкости со спектром типа, который можно назвать *фермиевским*. Теория такой ферми-жидкости была создана Л. Д. Ландау (1956–1958 гг.); ему принадлежат результаты, излагаемые в § 1–4¹⁾.

Энергетический спектр квантовой жидкости фермиевского типа строится в известном смысле аналогично спектру идеального ферми-газа (из частиц со спином $1/2$). Основное состояние последнего соответствует заполнению частицами всех состояний внутри *фермиевской сферы* — сферы в импульсном пространстве с радиусом p_F , связанным с концентрацией газа N/V (числом частиц в единице объема) формулой

$$\frac{N}{V} = 2 \frac{4\pi p_F^3}{3(2\pi\hbar)^3} = \frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3} \quad (1.1)$$

(см. V, § 57). Возбужденные состояния газа возникают, когда частицы переходят из состояний заполненной сферы в какие-либо состояния с $p > p_F$.

В жидкости, разумеется, не существует квантовых состояний для отдельных частиц. Однако исходный пункт для построения спектра ферми-жидкости состоит в утверждении, что классификация уровней энергии остается неизменной при постепенном «включении» взаимодействия между атомами, т. е. при переходе от газа к жидкости. В этой классификации роль частиц газа переходит к элементарным возбуждениям (квазичастицам), число которых совпадает с числом атомов и которые подчиняются статистике Ферми.

Сразу же отметим, что спектром такого типа может обладать, очевидно, только жидкость из частиц с полуцелым спином — состояние системы из бозонов (частиц с целым спином) не может описываться в терминах квазичастиц, подчиняющихся статистике Ферми. В то же время следует подчеркнуть, что спектр этого типа не может быть универсальным свойством всех таких жидкостей. Тип спектра зависит также и от конкретного

¹⁾ Забегая вперед, сразу же уточним, во избежание недоразумений, что речь идет о несверхтекучей (или, как говорят, *нормальной*) ферми-жидкости. Таковой является жидкий изотоп ^3He (с оговоркой, которая будет сделана в примечании на с. 285).

характера взаимодействия между атомами. Простое соображение делает это обстоятельство очевидным: если взаимодействие таково, что в результате его атомы стремятся ассоциироваться в пары, то в пределе мы получили бы молекулярную жидкость, состоящую из частиц (молекул) с целым спином, для которой рассматриваемый спектр заведомо невозможен.

Каждая из квазичастиц обладает определенным импульсом $\mathbf{p}$ (мы еще вернемся к вопросу о справедливости этого утверждения). Пусть $n(\mathbf{p})$ есть функция распределения квазичастиц по импульсам, нормированная условием

$$\int n d\tau = \frac{N}{V}, \quad d\tau = \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

(это условие будет уточнено ниже). Упомянутый выше принцип классификации состоит в предположении, что задание этой функции однозначно определяет энергию E жидкости и что основное состояние соответствует функции распределения, в которой заняты все состояния внутри ферми-сферы с радиусом p_F , связанным с плотностью жидкости той же формулой (1.1), что и в случае идеального газа.

Важно подчеркнуть, что полная энергия жидкости E отнюдь не сводится к сумме энергий ε квазичастиц. Другими словами, E представляет собой функционал от функции распределения, не сводящийся к интегралу $\int n\varepsilon d\tau$ (как это имеет место для идеального газа, где квазичастицы совпадают с истинными частицами и не взаимодействуют друг с другом). Поскольку первичным понятием является именно E , то возникает вопрос об определении энергии квазичастиц с учетом их взаимодействия.

Для этого рассмотрим изменение E при бесконечно малом изменении функции распределения. Оно должно, очевидно, определяться интегралом от выражения, линейного по вариации δn , т. е. иметь вид

$$\frac{\delta E}{V} = \int \varepsilon(p) \delta n d\tau.$$

Величина ε есть вариационная производная от энергии E по функции распределения. Она соответствует изменению энергии системы при добавлении одной квазичастицы с импульсом $\mathbf{p}$, и именно эта величина играет роль гамильтоновой функции квазичастицы в поле других частиц. Она тоже является функционалом функции распределения, т. е. вид функции $\varepsilon(\mathbf{p})$ зависит от распределения всех частиц в жидкости.

Отметим в этой связи, что элементарное возбуждение в рассматриваемом типе спектра можно в известном смысле трактовать как атом в самосогласованном поле других атомов. Эту

самосогласованность нельзя, однако, понимать в обычном в квантовой механике смысле. Она имеет здесь более глубокий характер; в гамильтониане атома учитывается влияние окружающих частиц не только на потенциальную энергию, но меняется также и зависимость оператора кинетической энергии от оператора импульса.

До сих пор мы отвлекались от наличия у квазичастиц спина. Так как спин является квантовомеханической величиной, то он не может рассматриваться классически, ввиду чего мы должны считать функцию распределения статистической матрицей в отношении спина. Энергия же элементарного возбуждения ϵ в общем случае является не только функцией от импульса, но и оператором по отношению к спиновым переменным, который можно выразить через оператор спина квазичастицы $\hat{\mathbf{s}}$. В однородной и изотропной жидкости (не находящейся в магнитном поле и не ферромагнитной) оператор $\hat{\mathbf{s}}$ может входить в скалярную функцию ϵ тоже лишь в виде скаляров $\hat{\mathbf{s}}^2$ или $(\hat{\mathbf{s}}\mathbf{p})^2$; первая степень произведения $\hat{\mathbf{s}}\mathbf{p}$ недопустима, поскольку в виду аксиальности вектора спина она является псевдоскаляром. Квадрат $\hat{\mathbf{s}}^2 = s(s+1)$, а для спина $s = 1/2$ сводится к не зависящей от $\hat{\mathbf{s}}$ постоянной также и скаляр $(\hat{\mathbf{s}}\mathbf{p})^2 = p^2/4$. Таким образом, в этом случае энергия квазичастицы вовсе не зависит от оператора спина, т. е. все уровни энергии квазичастиц двукратно вырождены.

По существу утверждение о наличии спина у квазичастицы и выражает факт существования этого вырождения. В этом смысле можно утверждать, что спин квазичастиц в данном типе спектра всегда равен $1/2$, вне зависимости от величины спина истинных частиц жидкости. Действительно, для любого отличного от $1/2$ спина s члены вида $(\hat{\mathbf{s}}\mathbf{p})^2$ привели бы к расщеплению $(2s+1)$ -кратно вырожденных уровней на $(2s+1)/2$ уровней с двукратным вырождением. Другими словами, появляются $(2s+1)/2$ различных ветвей функции $\epsilon(\mathbf{p})$, каждая из которых соответствует «квазичастицам со спином $1/2$ ».

Как уже было отмечено, с учетом спина квазичастиц функция распределения становится матрицей или оператором $\hat{n}(\mathbf{p})$ по отношению к спиновым переменным. В явном виде этот оператор записывается как эрмитова статистическая матрица $n_{\alpha\beta}(\mathbf{p})$, где α, β — спиновые матричные индексы, пробегающие два значения $\pm 1/2$. Диагональные матричные элементы определяют числа квазичастиц в определенных спиновых состояниях. Поэтому условие нормировки функции распределения квазичастиц надо писать теперь в виде

$$\text{Sp} \int \hat{n} d\tau \equiv \int n_{\alpha\alpha} d\tau = \frac{N}{V}, \quad d\tau = \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (1.2)$$

(символ Sp означает взятие следа матрицы по спиновым индексам)¹⁾.

Оператором — матрицей по спиновым переменным — является в общем случае также и энергия квазичастицы $\hat{\varepsilon}$. Ее определение надо записывать так:

$$\frac{\delta E}{V} = \text{Sp} \int \hat{\varepsilon} \delta \hat{n} d\tau \equiv \int \varepsilon_{\alpha\beta} \delta n_{\beta\alpha} d\tau. \quad (1.3)$$

Если спиновая зависимость функции распределения и энергии отсутствует, т. е. $n_{\alpha\beta}$ и $\varepsilon_{\alpha\beta}$ сводятся к единичной матрице

$$n_{\alpha\beta} = n \delta_{\alpha\beta}, \quad \varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon \delta_{\alpha\beta}, \quad (1.4)$$

то взятие следа в (1.2), (1.3) сводится просто к умножению на 2:

$$2 \int n d\tau = \frac{N}{V}, \quad \frac{\delta E}{V} = 2 \int \varepsilon \delta n d\tau. \quad (1.5)$$

Легко видеть, что в статистическом равновесии функция распределения квазичастиц имеет вид распределения Ферми, причем роль энергии играет определенная согласно (1.3) величина $\hat{\varepsilon}$. Действительно, в силу совпадения классификационных свойств уровней энергии жидкости и идеального ферми-газа энтропия S жидкости определяется таким же комбинаторным выражением

$$\frac{S}{V} = -\text{Sp} \int \{ \hat{n} \ln \hat{n} + (1 - \hat{n}) \ln(1 - \hat{n}) \} d\tau, \quad (1.6)$$

как и в случае газа (см. V, § 55). Варьируя это выражение при дополнительных условиях постоянства полного числа частиц и полной энергии

$$\frac{\delta N}{V} = \text{Sp} \int \delta \hat{n} d\tau = 0, \quad \frac{\delta E}{V} = \text{Sp} \int \hat{\varepsilon} \delta \hat{n} d\tau = 0,$$

мы получим искомое распределение

$$\hat{n} = [e^{(\hat{\varepsilon} - \mu)/T} + 1]^{-1}, \quad (1.7)$$

где μ — химический потенциал жидкости.

При не зависящей от спина энергии квазичастиц формула (1.7) означает такую же связь между величинами n и ε :

$$n = [e^{(\varepsilon - \mu)/T} + 1]^{-1}. \quad (1.8)$$

При температуре $T = 0$ химический потенциал совпадает с граничной энергией на поверхности сферы Ферми:

$$\mu|_{T=0} = \varepsilon_F \equiv \varepsilon(p_F). \quad (1.9)$$

¹⁾ Здесь и везде ниже по дважды повторяющимся индексам, как обычно, подразумевается суммирование.

Подчеркнем, что несмотря на формальную аналогию выражения (1.8) с обычным распределением Ферми, оно не тождественно с ним: поскольку ϵ само есть функционал от n , формула (1.8) представляет собой, строго говоря, сложное неявное определение n .

Вернемся к сделанному предположению о том, что каждой квазичастице может быть приписан определенный импульс. Условие справедливости этого предположения требует, чтобы неопределенность импульса (связанная с конечностью длины свободного пробега квазичастицы) была мала не только по сравнению с величиной самого импульса, но и по сравнению с шириной Δp «области размытости» распределения — области, в которой оно существенно отличается от «ступенчатой» функции¹⁾:

$$\theta(\mathbf{p}) \equiv \theta(p) = \begin{cases} 1, & p < p_F, \\ 0, & p > p_F. \end{cases} \quad (1.10)$$

Легко видеть, что это условие соблюдается, если распределение $n(\mathbf{p})$ отличается от (1.10) лишь в малой области вблизи поверхности ферми-сферы. Действительно, в силу принципа Паули взаимно рассеиваться могут только квазичастицы в области размытости распределения, причем в результате рассеяния они должны переходить в свободные состояния в той же области. Поэтому вероятность столкновения пропорциональна квадрату ширины этой области. Соответственно пропорциональна $(\Delta p)^2$ и неопределенность энергии, а с нею и неопределенность импульса квазичастицы. Отсюда ясно, что при достаточно малом Δp неопределенность импульса будет мала не только по сравнению с p_F , но и по сравнению с Δp .

Таким образом, излагаемый метод справедлив только для таких возбужденных состояний жидкости, которые описываются функцией распределения квазичастиц, отличающейся от «ступеньки» лишь в узкой области вблизи поверхности Ферми. В частности, для термодинамически равновесных распределений допустимы лишь достаточно низкие температуры. Ширина (по энергии) области размытости равновесного распределения порядка T . Квантовая же неопределенность энергии квазичастицы, связанная со столкновениями, — порядка величины $\hbar/\tau$, где τ — время свободного пробега квазичастицы. Поэтому

¹⁾ Отметим для дальнейшего, что производная

$$\theta'(p) = -\delta(p - p_F).$$

Действительно, обе стороны этого равенства дают одинаковый результат (единицу) при интегрировании по любому интервалу p , содержащему точку $p = p_F$.

условие применимости теории

$$\hbar/\tau \ll T. \quad (1.11)$$

При этом, согласно сказанному выше, время τ обратно пропорционально квадрату ширины области размытости, т. е.

$$\tau \propto T^{-2},$$

так что (1.11) заведомо выполняется при $T \rightarrow 0$. Для жидкости, в которой взаимодействие между частицами не является слабым, все энергетические параметры по порядку величины совпадают с граничной энергией ε_F ; в этом смысле условие (1.11) эквивалентно условию $T \ll |\varepsilon_F|$ ¹⁾.

Для распределений, близких к «ступенчатому» (распределение при $T = 0$), можно, в первом приближении, заменить функционал ε его значением, вычисленным для $n(\mathbf{p}) = \theta(p)$. Тогда ε становится определенной функцией величины импульса, и формула (1.7) становится обычным распределением Ферми.

При этом вблизи поверхности ферми-сферы, где функция $\varepsilon(\mathbf{p})$ только и имеет непосредственный физический смысл, ее можно разложить по степеням разности $p - p_F$. Имеем

$$\varepsilon - \varepsilon_F \approx v_F(p - p_F), \quad (1.12)$$

где

$$\mathbf{v}_F = \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} \right|_{p=p_F} \quad (1.13)$$

есть «скорость» квазичастиц на ферми-поверхности. В идеальном ферми-газе, где квазичастицы тождественны с истинными частицами, имеем $\varepsilon = p^2/2m$, так что $v_F = p_F/m$. По аналогии можно ввести для ферми-жидкости величину

$$m^* = p_F/v_F, \quad (1.14)$$

назвав ее *эффективной массой* квазичастицы; эта величина положительна (см. конец § 2).

В терминах введенных таким образом величин условие применимости теории можно записать как $T \ll v_F p_F$, причем реальным смыслом обладают лишь квазичастицы с импульсами p , для которых $|p - p_F| \ll p_F$. Подчеркнем лишний раз последнее обстоятельство и отметим, что оно придает в особенности нетривиальный характер соотношению (1.1) между p_F и плотностью жидкости, поскольку его наглядный вывод (для ферми-газа)

¹⁾ Для жидкого ^3He , однако, область количественной применимости теории, как показывает эксперимент, фактически ограничена температурами $T \lesssim 0,1\text{ K}$ (между тем как $|\varepsilon_F| \approx 2,5\text{ K}$).

основан на представлении о частицах в состояниях, заполняющих всю ферми-сферу, а не только окрестность ее поверхности¹⁾.

Эффективная масса определяет, в частности, энтропию S и теплоемкость C жидкости при низких температурах. Они даются той же формулой, что и для идеального газа (V, § 58), в которой надо только заменить массу частицы m эффективной массой m^* :

$$S = C = V\gamma T, \quad \gamma = \frac{m^* p_F}{3\hbar^3} = \left(\frac{\pi}{3}\right)^{2/3} \frac{m^*}{\hbar^2} \left(\frac{N}{V}\right)^{1/3} \quad (1.15)$$

(ввиду линейной зависимости от T величины S и C совпадают). Действительно, выражение (1.6) энтропии через функцию распределения одинаково для жидкости и для газа, а при вычислении этого интеграла существенна лишь область импульсов вблизи p_F , в которой функции распределения квазичастиц в жидкости и частиц в газе даются одним и тем же выражением (1.8)²⁾.

Перед тем как продолжить развитие теории, сделаем следующее замечание. Хотя излагаемый способ введения понятия квазичастиц в ферми-жидкости в полной аналогии с частицами газа наиболее удобен для систематического построения теории, связанная с ним физическая картина имеет тот недостаток, что в ней фигурирует ненаблюдаемая заполненная ферми-сфера квазичастиц. Этот недостаток можно было бы устранить формулировкой, в которой элементарные возбуждения появляются только при $T \neq 0$. В такой картине роль элементарных возбуждений играют квазичастицы вне ферми-сферы и «дырки» внутри нее; первым надо приписать (в приближении, отвечающем формуле (1.12)) энергию $\varepsilon = v_F(p - p_F)$, а вторым $\varepsilon = v_F(p_F - p)$. Статистическое распределение тех и других дается формулой распределения Ферми с равным нулю химическим потенциалом (в соответствии с тем, что число элементарных возбуждений при этом не постоянно, а определяется температурой³⁾)

$$n = [e^{\varepsilon/T} + 1]^{-1}. \quad (1.16)$$

¹⁾ Доказательство соотношения (1.1) требует применения более сложных математических методов и будет дано ниже, в § 20.

²⁾ Для жидкого ^3He (при нулевом давлении): $p_F/\hbar = 0,8 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$; $m^* = 3,1 m(^3\text{He})$; p_F определяется по плотности жидкости; m^* — по теплоемкости.

³⁾ Напомним (ср. V, § 63), что в таких условиях число квазичастиц $N_{\text{кв}}$ определяется условием термодинамического равновесия — минимальностью свободной энергии F как функции $N_{\text{кв}}$ при заданных температуре и объеме: $(\partial F / \partial N_{\text{кв}})_{T, V} = 0$; но эта производная и есть «химический потенциал квазичастиц» (не смешивать его с химическим потенциалом μ жидкости, определяемым производной от F по числу истинных частиц N).

Элементарные возбуждения в этой картине появляются или исчезают лишь парами, так что полные числа возбуждений с импульсами $p > p_F$ и $p < p_F$ всегда одинаковы.

Отметим также, что при таком определении элементарных возбуждений их энергия непременно положительна: это есть превышение энергии возбужденного уровня над энергией нормального уровня системы. Энергия же квазичастиц, определенная согласно (1.3), может быть как положительной, так и отрицательной.

Более того, для жидкости при нулевых температуре и давлении величина $\varepsilon_F = \mu$ заведомо отрицательна, а потому отрицательны и близкие к ε_F значения ε . Это ясно из того, что при $T = 0$ и $P = 0$ величина $-\mu$ совпадает с положительной величиной — предельным значением отнесенной к одной частице теплотой испарения жидкости.

§ 2. Взаимодействие квазичастиц

Являясь функционалом от функции распределения квазичастиц, их энергия меняется при изменении этой функции. Изменение энергии при малом отклонении δn от функции распределения от «ступеньки» (1.10) должно иметь вид

$$\delta\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{p}) = \int f_{\alpha\gamma, \beta\delta}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n_{\delta\gamma}(\mathbf{p}') d\tau' \quad (2.1)$$

или, в более символическом виде,

$$\delta\hat{\varepsilon}(\mathbf{p}) = \text{Sp}' \int \hat{f}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta\hat{n}(\mathbf{p}') d\tau',$$

где Sp' означает взятие следа по паре спиновых индексов, отвечающих импульсу $\mathbf{p}'$. Функцию $\hat{f}$ можно назвать *функцией взаимодействия* квазичастиц (в ферми-газе $\hat{f} \equiv 0$). По своему определению эта функция представляет собой вторую вариационную производную от полной энергии жидкости E и поэтому симметрична по переменным $\mathbf{p}, \mathbf{p}'$ и соответствующим им парам спиновых индексов:

$$f_{\alpha\gamma, \beta\delta}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_{\gamma\alpha, \delta\beta}(\mathbf{p}', \mathbf{p}). \quad (2.2)$$

С учетом изменения (2.1) энергия квазичастиц вблизи поверхности ферми-сферы дается суммой

$$\hat{\varepsilon}(\mathbf{p}) - \varepsilon_F = v_F(p - p_F) + \text{Sp}' \int \hat{f}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta\hat{n}(\mathbf{p}') d\tau'. \quad (2.3)$$

В частности, для термодинамически равновесных распределений второй член в формуле (2.3) определяет зависимость энергии

квазичастицы от температуры. Отклонение $\delta\hat{n}'$ заметно отличается от нуля только в узком слое значений $\mathbf{p}'$ вблизи поверхности ферми-сферы, и в таком же слое находятся импульсы $\mathbf{p}$ реальных квазичастиц. Поэтому функцию $\hat{f}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ в формулах (2.1), (2.3) фактически можно заменить ее значением на самой этой поверхности, т. е. положить $p = p' = p_F$, так что $\hat{f}$ будет зависеть только от направлений векторов $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$.

Спиновая зависимость функции $\hat{f}$ связана как с релятивистскими эффектами (спин-спиновое и спин-орбитальное взаимодействия), так и с обменным взаимодействием. Последнее наиболее существенно. С его учетом функция взаимодействия квазичастиц имеет (на ферми-поверхности) вид

$$\frac{p_F m^*}{\pi^2 \hbar^3} \hat{f}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = F(\vartheta) + \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\sigma}' G(\vartheta), \quad (2.4)$$

где $\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}'$ — матрицы Паули, действующие на соответствующие (т. е. отвечающие переменным $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$) спиновые индексы, а F и G — две функции угла ϑ между $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ ¹⁾. Вид этого выражения связан с характерным свойством обменного взаимодействия: оно не зависит от ориентации полного момента системы в пространстве; поэтому операторы двух спинов могут входить в него лишь в виде скалярного произведения. Определенные, согласно (2.4), функции F и G безразмерны. Введенный для этой цели в левой стороне (2.4) множитель представляет собой число состояний квазичастицы на ферми-поверхности, отнесенное к единичному интервалу энергий:

$$\begin{aligned} \nu(\varepsilon_F) &= \left. \frac{2d\tau}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\varepsilon_F} = \frac{2 \cdot 4\pi p_F^2}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{dp}{d\varepsilon} \right)_{p_F} \\ \text{или} \quad \nu_F &= \frac{p_F^2}{\pi^2 \hbar^3 v_F} = \frac{p_F m^*}{\pi^2 \hbar^3}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Поскольку след матриц Паули равен нулю, то после взятия следа Sp' второй член в (2.4) исчезает, так что $\text{Sp}' \hat{f}$ не зависит уже и от $\boldsymbol{\sigma}$. Такая независимость имеет место в действительности также и при учете спин-орбитального и спин-спинового взаимодействий. Дело в том, что скалярная функция $\text{Sp}' \hat{f}$ могла бы содержать оператор спина лишь в виде произведения $\hat{\mathbf{s}}[\mathbf{p}\mathbf{p}']$ двух аксиальных векторов $\hat{\mathbf{s}}$ и $[\mathbf{p}\mathbf{p}']$ (выражения же, квадратичные

¹⁾ В явной матричной форме

$$\frac{p_F m^*}{\pi^2 \hbar^3} f_{\alpha\gamma, \beta\delta} = F \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + G \sigma_{\alpha\beta} \sigma_{\gamma\delta}. \quad (2.4a)$$

по компонентам $\hat{s}$, можно не рассматривать, так как для спина 1/2 они сводятся к членам, линейным по $\hat{s}$ и не содержащим $\hat{s}$ вовсе). Но это произведение не инвариантно по отношению к обращению времени и потому не может войти в инвариантную величину $\text{Sp}'\hat{f}$.

Введем удобное для дальнейшего обозначение

$$f_{\alpha\gamma, \beta\gamma}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \delta_{\alpha\beta} f(\mathbf{p}, \mathbf{p}'), \quad f = \frac{1}{2} \text{Sp} \text{Sp}' \hat{f}. \quad (2.6)$$

Из выражения (2.4) имеем

$$\frac{p_F m^*}{\pi^2 \hbar^3} f(\vartheta) = 2F(\vartheta). \quad (2.7)$$

Функция взаимодействия квазичастиц удовлетворяет определенному интегральному соотношению, следующему из принципа относительности Галилея. Прямым следствием этого принципа является совпадение импульса единицы объема жидкости с плотностью потока ее массы. Скорость квазичастицы есть $\partial\epsilon/\partial\mathbf{p}$, так что поток квазичастиц дается интегралом

$$\text{Sp} \int \hat{n} \frac{\partial\epsilon}{\partial\mathbf{p}} d\tau.$$

Поскольку число квазичастиц в жидкости совпадает с числом истинных частиц, то ясно, что полный перенос массы квазичастицами получится умножением потока их числа на массу m истинной частицы. Таким образом, получим следующее равенство:

$$\text{Sp} \int \mathbf{p} \hat{n} d\tau = \text{Sp} \int m \frac{\partial\epsilon}{\partial\mathbf{p}} \hat{n} d\tau. \quad (2.8)$$

Положив $n_{\alpha\beta} = n\delta_{\alpha\beta}$, $\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon\delta_{\alpha\beta}$, варьируем обе стороны (2.8). Используя (2.1) и обозначение f из (2.6), получим

$$\begin{aligned} \int \mathbf{p} \delta n d\tau &= m \int \frac{\partial\epsilon}{\partial\mathbf{p}} \delta n d\tau + m \int \frac{\partial f(\mathbf{p}, \mathbf{p}')}{\partial\mathbf{p}} n \delta n' d\tau d\tau' = \\ &= m \int \frac{\partial\epsilon}{\partial\mathbf{p}} \delta n d\tau - m \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\partial n'}{\partial\mathbf{p}'} \delta n d\tau d\tau', \end{aligned}$$

где $n' \equiv n(\mathbf{p}')$ (во втором интеграле заменено обозначение переменных и произведено интегрирование по частям). Ввиду произвольности δn отсюда следует искомое соотношение

$$\frac{\mathbf{p}}{m} = \frac{\partial\epsilon}{\partial\mathbf{p}} - \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\partial n(\mathbf{p}')}{\partial\mathbf{p}'} d\tau'. \quad (2.9)$$

Для ступенчатой функции

$$n(\mathbf{p}') = \theta(p')$$

производная $\partial n' / \partial \mathbf{p}'$ сводится к δ -функции:

$$\frac{\partial \theta(p)}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{\mathbf{p}}{p} \delta(p - p_F). \quad (2.10)$$

Подставив в (2.9) функцию $\varepsilon(\mathbf{p})$ из (1.12), заменив затем везде импульс $\mathbf{p} = p\mathbf{n}$ значением $\mathbf{p}_F = p_F\mathbf{n}$ на ферми-поверхности и умножив обе стороны равенства на $\mathbf{p}_F$, получим следующее соотношение между массой m истинных частиц и эффективной массой квазичастиц:

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m^*} + \frac{p_F}{(2\pi\hbar)^3} \int f(\vartheta) \cos \vartheta d\vartheta, \quad (2.11)$$

где $d\vartheta$ — элемент телесного угла в направлении $\mathbf{p}'$. Если подставить сюда для $f(\vartheta)$ выражение (2.7), то это равенство принимает вид

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \overline{F(\vartheta) \cos \vartheta}, \quad (2.12)$$

где черта означает усреднение по направлениям (т. е. интегрирование по $d\vartheta' / 4\pi = \sin \vartheta d\vartheta / 2$).

Вычислим еще сжимаемость ферми-жидкости (при абсолютном нуле), т. е. величину $u^2 = \partial P / \partial \rho^1$). Плотность жидкости $\rho = mN/V$, так что

$$u^2 = -\frac{V^2}{mN} \frac{\partial P}{\partial V}.$$

Для вычисления этой производной удобно выразить ее через производную от химического потенциала. Заметив, что последний зависит от N и V только в виде отношения N/V , а также, что при $T = \text{const} = 0$ дифференциал $d\mu = VdP/N$, имеем

$$\frac{\partial \mu}{\partial N} = -\frac{V}{N} \frac{\partial \mu}{\partial V} = -\frac{V^2}{N^2} \frac{\partial P}{\partial V},$$

так что

$$u^2 = \frac{N}{m} \frac{\partial \mu}{\partial N}. \quad (2.13)$$

Поскольку $\mu = \varepsilon_F$ при $T = 0$, то изменение $\delta\mu$ при изменении числа частиц на δN равно

$$\delta\mu = \int f(p_F, \mathbf{p}') \delta n' d\tau' + \frac{\partial \varepsilon_F}{\partial p_F} \delta p_F. \quad (2.14)$$

Первый член в этом выражении — изменение величины $\varepsilon(p_F)$ благодаря изменению функции распределения. Второй же член

¹⁾ При $T = 0$ также и $S = 0$, так что нет необходимости различать изотермическую и адиабатическую сжимаемость. Величина u определена как известное выражение скорости звука в жидкости. Следует, однако, иметь в виду, что фактически при $T = 0$ обычный звук вообще не может распространяться в ферми-жидкости — см. § 4.

связан с тем, что изменение полного числа частиц меняет также и значение предельного импульса: в силу (1.1) имеем $\delta N = V p_F^2 \delta p_F / \pi^2 \hbar^3$. Поскольку $\delta n'$ заметно отлично от нуля лишь при $p' \approx p_F$, то, заменив в интеграле функцию f ее значением на ферми-поверхности, можем написать

$$\int f \delta n' d\tau' \approx \frac{1}{2} \int f d\omega' \int \delta n' \frac{2d\tau'}{4\pi} = \frac{1}{2} 4\pi \bar{f} \frac{\delta N}{4\pi V}.$$

Подставив это выражение в (2.14) и введя m^* согласно $\partial \varepsilon_F / \partial p_F = p_F / m^*$, получим

$$\frac{\partial \mu}{\partial N} = \frac{\bar{f}}{2V} + \frac{\pi^2 \hbar^3}{p_F m^* V}. \quad (2.15)$$

Наконец, взяв $1/m^*$ из (2.11) и снова учтя (1.1), получим окончательно

$$u^2 = \frac{p_F^2}{3m^2} + \frac{1}{3m} \left(\frac{p_F}{2\pi \hbar} \right)^3 \int f(\vartheta) (1 - \cos \vartheta) d\omega'. \quad (2.16)$$

С функцией $f(\vartheta)$ из (2.7) и с использованием (2.12) это выражение можно привести к виду

$$u^2 = \frac{p_F^2}{3mm^*} (1 + \overline{F(\vartheta)}). \quad (2.17)$$

Функция $\hat{f}$ должна удовлетворять определенным условиям, возникающим из требования устойчивости основного состояния жидкости. Последнему отвечает заполнение всех состояний квазичастиц внутри ферми-сферы, и энергия этого состояния должна быть минимальна по отношению к произвольной малой деформации сферы. Не приводя всех вычислений, укажем здесь лишь их окончательный результат¹⁾. Его удобно сформулировать, разложив функции $F(\vartheta)$ и $G(\vartheta)$ из (2.4) по полиномам Лежандра, т. е. представив их в виде

$$F(\vartheta) = \sum_l (2l+1) F_l P_l(\cos \vartheta), \quad G(\vartheta) = \sum_l (2l+1) G_l P_l(\cos \vartheta) \quad (2.18)$$

(при таком определении коэффициентов F_l и G_l они совпадают со средними значениями произведений $F P_l$ и $G P_l$). Тогда условия устойчивости записываются в виде неравенств

$$F_l + 1 > 0, \quad (2.19)$$

$$G_l + 1 > 0. \quad (2.20)$$

Сравнив условие (2.19) при $l = 1$ с выражением (2.12) для эффективной массы, убеждаемся в положительности последней. Условие же (2.19) при $l = 0$ обеспечивает положительность выражения (2.17).

¹⁾ См. Померанчук И. Я. // ЖЭТФ. 1958. Т. 35. С. 524.

§ 3. Магнитная восприимчивость ферми-жидкости

Квазичастица с отличным от нуля спином обладает, вообще говоря, также и магнитным моментом. Для спина $1/2$ оператор этого момента имеет вид $\beta\sigma$ (z -проекция магнитного момента равна $\pm\beta$). Постоянная $2\beta/\hbar$, определяющая отношение магнитного момента квазичастицы к механическому ($\hbar/2$), совпадает со значением такой же постоянной для истинных частиц: очевидно, что величина этого отношения не меняется при любом способе сложения спинов частиц в спин квазичастицы.

Наличие у квазичастиц магнитного момента приводит, в свою очередь, к парамагнетизму жидкости. Вычислим соответствующую магнитную восприимчивость.

Для «свободной» квазичастицы оператор дополнительной энергии, приобретаемой ею в магнитном поле $\mathbf{H}$, был бы $-\beta\sigma\mathbf{H}$. Но в ферми-жидкости необходимо учесть тот факт, что в силу взаимодействия квазичастиц энергия каждой из них изменится еще и в результате изменения функции распределения в магнитном поле. При вычислении магнитной восприимчивости надо поэтому писать оператор изменения энергии квазичастицы в виде

$$\delta\hat{\varepsilon} = -\beta\sigma\mathbf{H} + \text{Sp}' \int \hat{f} \delta\hat{n}' d\tau'. \quad (3.1)$$

Изменение же функции распределения само выражается через $\delta\hat{\varepsilon}$ согласно $\delta\hat{n} = (\partial n / \partial \varepsilon) \delta\hat{\varepsilon}$ ¹⁾; таким образом, для $\delta\hat{\varepsilon}$ получаем уравнение

$$\delta\hat{\varepsilon}(\mathbf{p}) = -\beta\sigma\mathbf{H} + \text{Sp}' \int \hat{f}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{dn'}{d\varepsilon'} \delta\hat{\varepsilon}(\mathbf{p}') d\tau'. \quad (3.2)$$

Нам понадобится ниже решение этого уравнения лишь на поверхности ферми-сферы. Ищем его в виде

$$\delta\hat{\varepsilon} = -\frac{\beta}{2} g \sigma \mathbf{H}, \quad (3.3)$$

где g — постоянная. Для ступенчатой функции $n(\mathbf{p}') = \theta(\mathbf{p}')$ имеем

$$\frac{dn'}{d\varepsilon'} = -\delta(\varepsilon' - \varepsilon_F),$$

¹⁾ При вычислении добавки δn , зависящей от поля, изменение химического потенциала можно не учитывать. Изменение макроскопической величины μ в изотропной жидкости может быть лишь квадратичным по полю $\mathbf{H}$ (являющимся при вычислении восприимчивости малой величиной), между тем как $\delta\hat{\varepsilon}$ первого порядка малости по полю. Отметим также, что ввиду малости магнитной восприимчивости жидкости здесь можно не делать различия между напряженностью и индукцией поля в ней.

так что интегрирование по $dp' = d\varepsilon'/v_F$ сводится к взятию значения подынтегрального выражения на ферми-поверхности. Подставив функцию $\hat{f}$ из (2.4) и заметив, что для матриц Паули

$$\text{Sp } \sigma = 0, \quad \text{Sp}'(\sigma\sigma')\sigma' = \frac{1}{3}\sigma\text{Sp}'\sigma'\sigma' = 2\sigma,$$

находим $g = 2 - g\overline{G}(\vartheta)$, или

$$g = \frac{2}{1 + \overline{G}(\vartheta)}, \quad (3.4)$$

где черта снова (как и в (2.12)) означает усреднение по направлениям.

Восприимчивость χ определяется из выражения для магнитного момента единицы объема жидкости:

$$\chi\mathbf{H} = \beta \text{Sp} \int \sigma \delta \hat{n} d\tau = \beta \text{Sp} \int \sigma \delta \hat{\varepsilon} \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} d\tau$$

или, после интегрирования со ступенчатой функцией $n(\mathbf{p})$:

$$\chi\mathbf{H} = -\beta \frac{p_F m^*}{2\pi^2 \hbar^3} \text{Sp } \sigma \delta \hat{\varepsilon}(p_F).$$

Наконец, подставив сюда (3.3), (3.4) и заметив, что $\text{Sp } (\sigma\mathbf{H})\sigma = 2\mathbf{H}$, получим

$$\chi = \frac{\beta^2 p_F m^*}{\pi^2 \hbar^3 (1 + \overline{G})} = \frac{3\gamma\beta^2}{\pi^2 (1 + \overline{G})}, \quad (3.5)$$

где γ — коэффициент в линейном законе теплоемкости (1.15). Выражение $\chi = 3\gamma\beta^2/\pi^2$ есть восприимчивость вырожденного ферми-газа из частиц с магнитным моментом β (см. V, (59.5)). Множитель же $(1 + \overline{G})^{-1}$ выражает собой отличие ферми-жидкости от ферми-газа¹⁾.

Отметим, что условие устойчивости (2.20) с $l = 0$ совпадает с условием $\chi > 0$.

§ 4. Нулевой звук

Неравновесные состояния ферми-жидкости описываются функциями распределения квазичастиц, зависящими не только от импульсов, но также и от координат и времени. Эти функции $\hat{n}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ подчиняются кинетическому уравнению вида

$$\frac{d\hat{n}}{dt} = \text{St } \hat{n}, \quad (4.1)$$

¹⁾ Для ^3He : $\overline{G} \approx -2/3$.

где $St \hat{n}$ — так называемый интеграл столкновений, определяющий изменение числа квазичастиц в данном элементе фазового объема, обусловленное их столкновениями друг с другом¹⁾.

Полная производная по времени в (4.1) учитывает как явную зависимость $\hat{n}$ от t , так и неявную зависимость, связанную с изменением координат, импульса и спиновых переменных квазичастицы согласно ее уравнениям движения. Специфика ферми-жидкости состоит в том, что поскольку энергия квазичастицы является функционалом от функции распределения, то в неоднородной жидкости вместе с $\hat{n}$ зависит от координат также и $\hat{\varepsilon}$.

Для распределений $\hat{n}$, слабо отличающихся от равновесного n_0 , пишем

$$\hat{n}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = n_0(\mathbf{p}) + \delta\hat{n}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t). \quad (4.2)$$

При этом энергия квазичастицы $\hat{\varepsilon} = \varepsilon_0 + \delta\hat{\varepsilon}$, где ε_0 — энергия, отвечающая равновесному распределению, а $\delta\hat{\varepsilon}$ дается выражением (2.1), так что

$$\frac{\partial \hat{\varepsilon}}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial \delta\hat{\varepsilon}}{\partial \mathbf{r}} = \text{Sp}' \int \hat{f}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\partial \delta\hat{n}(\mathbf{p}')}{\partial \mathbf{r}} d\tau'. \quad (4.3)$$

В отсутствие внешнего магнитного поля ε_0 и n_0 от спина не зависят.

Явная зависимость $\hat{n}$ от времени дает в $d\hat{n}/dt$ член

$$\frac{\partial \hat{n}}{\partial t} = \frac{\partial \delta\hat{n}}{\partial t}.$$

Зависимость же через координаты и импульс дает члены

$$\frac{\partial \hat{n}}{\partial \mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} + \frac{\partial \hat{n}}{\partial \mathbf{p}} \hat{\mathbf{p}}.$$

Роль гамильтоновой функции квазичастицы играет ее энергия $\hat{\varepsilon}$. В силу уравнений Гамильтона имеем

$$\hat{\mathbf{r}} = \frac{\partial \hat{\varepsilon}}{\partial \mathbf{p}}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -\frac{\partial \hat{\varepsilon}}{\partial \mathbf{r}}.$$

Поэтому имеем, с точностью до членов первого порядка по $\delta\hat{n}$:

$$\frac{\partial \delta\hat{n}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \delta\hat{\varepsilon}}{\partial \mathbf{r}}.$$

¹⁾ Содержание этого параграфа предполагает знакомство с понятием кинетического уравнения и в этом смысле выпадает из профиля данного тома. Однако без кинетического уравнения (и его применения в этом и следующем параграфах) формулировка теории ферми-жидкости была бы недостаточно полна. Нам понадобится здесь лишь уравнение без интеграла столкновений; вопросы, связанные с конкретным видом интеграла столкновений, будут рассмотрены в другом томе, посвященном физической кинетике.

Наконец, изменение со временем функции $\hat{n}$ как оператора по спиновым переменным дается, по общим правилам квантовой механики, коммутатором

$$\frac{i}{\hbar} \{\hat{\varepsilon}, \hat{n}\}. \quad (4.4)$$

Однако при не зависящих от спина n_0 и ε_0 члены первого порядка по $\delta\hat{n}$ в этом коммутаторе отсутствуют.

Собирая написанные члены, получим уравнение

$$\frac{\partial \delta\hat{n}}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \delta\hat{n}}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \delta\hat{\varepsilon}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} = \text{St } \hat{n}. \quad (4.5)$$

Прежде, чем приступить к использованию кинетического уравнения, остановимся на условиях его применимости. Используя классические (по координатам и импульсу) уравнения, мы тем самым предполагали движение квазичастиц квазиклассическим; это же предположение лежит по существу уже в основе самого описания жидкости функцией распределения, зависящей одновременно от координат и импульсов квазичастиц. Условие квазиклассичности состоит в малости де-бройлевской длины волны квазичастиц $\hbar/p_F$ по сравнению с характерной длиной L , на которой существенно меняется функция n . Введя вместо L «волновой вектор» неоднородности $k \sim 1/L$, запишем это условие в виде¹⁾

$$\hbar k \ll p_F. \quad (4.6)$$

Частота ω изменения функции распределения, устанавливающаяся при заданном k , порядка величины $\omega \sim v_F k$ и автоматически удовлетворяет условию

$$\hbar \omega \ll \varepsilon_F. \quad (4.7)$$

Соотношение же между $\hbar \omega$ и температурой T может быть любым. Если $\hbar \omega \gg T$, то роль ширины области размытости функции распределения играет именно величина $\hbar \omega$; тогда (4.7) есть обязательное для применимости всей теории условие, обеспечивающее малость квантовой неопределенности энергии квазичастицы (связанной с их столкновениями) по сравнению с $\hbar \omega$.

Применим теперь кинетическое уравнение к исследованию колебательных движений ферми-жидкости.

При низких, но отличных от нуля температурах в ферми-жидкости происходят взаимные столкновения квазичастиц, причем время их свободного пробега $\tau \propto T^{-2}$. Характер распространяющихся в жидкости волн существенно зависит от величины произведения $\omega \tau$.

¹⁾ Согласно определению (1.1) $\hbar/p_F$ порядка величины межатомных расстояний, так что условие (4.6) — очень слабое.

При $\omega\tau \ll 1$ (что фактически эквивалентно условию малости длины пробега квазичастицы l по сравнению с длиной волны λ) столкновения успевают установить термодинамическое равновесие в каждом (малом по сравнению с λ) элементе объема жидкости. Это значит, что мы имеем дело с обычными гидродинамическими звуковыми волнами, распространяющимися со скоростью $u = \sqrt{\partial P / \partial \rho}$. Поглощение звуковых волн при $\omega\tau \ll 1$ мало, но при увеличении $\omega\tau$ оно возрастает и при $\omega\tau \sim 1$ становится очень сильным, так что распространение звуковых волн становится невозможным¹⁾.

При дальнейшем увеличении $\omega\tau$, когда уже $\omega\tau \gg 1$, в ферми-жидкости снова становится возможным распространение волн, имеющих, однако, другой физический характер. В этих колебаниях столкновения квазичастиц не играют роли и термодинамическое равновесие в каждом элементе объема не успевает устанавливаться. Процесс можно рассматривать как происходящий при абсолютном нуле температуры. Эти волны называют *нулевым звуком*.

Согласно сказанному выше, при $\omega\tau \gg 1$ в кинетическом уравнении можно опустить интеграл столкновений; тогда

$$\frac{\partial \delta \hat{n}}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta \hat{n}}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \delta \hat{\varepsilon}}{\partial \mathbf{r}} = 0, \quad (4.8)$$

где $\mathbf{v} = \partial \varepsilon / \partial \mathbf{p}$ — скорость квазичастиц, вычисленная по невозмущенной энергии ε ($\mathbf{v} = v_F \mathbf{n}$, где $\mathbf{n}$ — единичный вектор в направлении $\mathbf{p}$); индекс 0 у ε здесь и ниже опускаем.

При $T = 0$ равновесная функция распределения n_0 представляет собой ступенчатую функцию $\theta(p)$, обрывающуюся у предельного импульса $p = p_F$. Ее производная

$$\frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} = -\mathbf{n} \delta(p - p_F) = -\mathbf{v} \delta(\varepsilon - \varepsilon_F).$$

Предполагая, что зависимость $\delta \hat{n}$ в волне от времени и координат дается множителем $\exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)]$, будем искать решение кинетического уравнения в виде

$$\delta \hat{n} = \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \hat{\nu}(\mathbf{n}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}. \quad (4.9)$$

Тогда уравнение (4.8) с $\partial \delta \hat{\varepsilon} / \partial \mathbf{r}$ из (4.3) принимает вид

$$(\omega - v_F \mathbf{n}\mathbf{k}) \hat{\nu}(\mathbf{n}) = \mathbf{n}\mathbf{k} \frac{p_F^2}{(2\pi\hbar)^3} \text{Sp}' \int \hat{f}(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \hat{\nu}(\mathbf{n}') d\mathbf{o}', \quad (4.10)$$

¹⁾ При $\omega\tau \ll 1$ коэффициент поглощения звука $\gamma \sim \omega^2 \eta / \rho u^3$, где η — вязкость жидкости. По порядку величины имеем $u \sim v_F$, $\eta / \rho \sim v_F l \sim v_F^2 \tau$, где v_F — скорость квазичастиц (не зависящая от температуры), так что $\eta \propto T^{-2}$ (И. Я. Померанчук, 1950). При этом $\gamma u / \omega \sim \omega\tau \propto \omega / T^2$.

где $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$ — единичные векторы в направлениях $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$, а интегрирование производится по направлениям $\mathbf{n}'$.

Рассмотрим колебания (нулевой звук), не затрагивающие спиновых характеристик жидкости. Это значит, что от спиновых переменных не зависит не только равновесная функция распределения, но и ее «возмущение» δn . В такой волне изменение функции распределения при колебаниях сводится к деформации граничной ферми-поверхности (сферы в невозмущенном распределении), остающейся при этом резкой границей между заполненными и незаполненными состояниями квазичастиц. Функция же $\nu(\mathbf{n})$ представляет собой величину смещения (в единицах энергии) этой поверхности в заданном направлении $\mathbf{n}$.

Поскольку $\nu(\mathbf{n}')$ не зависит от спиновых переменных, то операция Sp' в (4.10) применяется только к функции $\hat{f}$. Написав последнюю в виде (2.4), будем иметь $\text{Sp}' \hat{f} = (2\pi^2 \hbar^3 / p_F m^*) F(\vartheta)$. Таким образом, оператор σ выпадает вовсе из уравнения, принимающего теперь вид

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})\nu(\mathbf{n}) = \mathbf{k}\mathbf{v} \int F(\vartheta)\nu(\mathbf{n}') \frac{d\vartheta'}{4\pi}. \quad (4.11)$$

Выберем направление $\mathbf{k}$ в качестве полярной оси, и пусть углы θ, φ определяют направление $\mathbf{n}$. Введя также скорость распространения волны $u_0 = \omega/k$ и обозначение $s = u_0/v_F$, напомним окончательно полученное уравнение в виде

$$(s - \cos \theta)\nu(\theta, \varphi) = \cos \theta \int F(\vartheta)\nu(\theta', \varphi') \frac{d\vartheta'}{4\pi}. \quad (4.12)$$

Это интегральное уравнение определяет, в принципе, скорость распространения волн и функцию $\nu(\mathbf{n}')$ в них. Сразу же отметим, что для незатухающих колебаний (которые здесь нас только и интересуют) величина s должна превышать 1, т. е. должно быть

$$u_0 > v_F \quad (4.13)$$

Происхождение этого неравенства можно понять, переписав (4.12) в виде

$$\tilde{\nu}(\theta, \varphi) = \cos \theta \int F(\vartheta) \frac{\tilde{\nu}(\theta', \varphi')}{s - \cos \theta'} \frac{d\vartheta'}{4\pi},$$

где вместо ν введена другая неизвестная функция $\tilde{\nu} = (s - \cos \theta)\nu$. При $s = \omega/kv_F < 1$ подынтегральное выражение имеет полюс в точке $\cos \theta' = s$, и для придания интегралу смысла этот полюс должен быть обойден по определенному правилу в плоскости комплексного переменного $\cos \theta'$. Этот обход вносит в интеграл мнимую часть, в результате чего приобретает мнимую часть

также и частота ω (при заданном вещественном k), что и означает затухание волны. Физический смысл равенства $\cos \theta = u_0/v_F$ (отвечающего полюсу) состоит в том, что это есть условие черенковского излучения волн нулевого звука квазичастицами¹⁾.

Рассмотрим в качестве примера случай, когда функция $F(\vartheta)$ сводится к постоянной (обозначим ее F_0). Интеграл в правой стороне уравнения (4.12) не зависит при этом от углов θ , φ . Поэтому искомая функция ν имеет вид

$$\nu = \text{const} \cdot \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta}. \quad (4.14)$$

Ферми-поверхность приобретает, таким образом, форму поверхности вращения, вытянутой вперед по направлению распространения волны и сплюснутой в обратном направлении. Эта анизотропия является проявлением неравновесности состояния жидкости в каждом элементе ее объема: в равновесии все свойства жидкости должны быть изотропными и тем самым ферми-поверхность — сферической. Укажем для сравнения, что обычной звуковой волне соответствует сферическая ферми-поверхность колеблющегося радиуса (граничный импульс p_F колеблется вместе с плотностью жидкости), смещенная как целая на величину, связанную со скоростью движения жидкости в волне; соответствующая функции ν имеет вид $\nu = \delta p_F + \text{const} \cdot \cos \theta$.

Для определения скорости распространения волны нулевого звука u_0 подставляем (4.14) в (4.12) и находим

$$F_0 \int_0^{\pi} \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \frac{2\pi \sin \theta d\theta}{4\pi} = 1.$$

Произведя интегрирование, получим уравнение, определяющее в неявном виде скорость u_0 по заданной величине F_0 :

$$\frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1} - 1 = \frac{1}{F_0}. \quad (4.15)$$

Функция в левой стороне уравнения убывает от ∞ до 0 при изменении s от 1 до ∞ , оставаясь всегда положительной. Отсюда следует, что рассматриваемые волны могут существовать только при $F_0 > 0$. Подчеркнем, что возможность распространения нулевого звука зависит, таким образом, от свойств взаимодействия квазичастиц в ферми-жидкости.

¹⁾ Такой механизм затухания называют затуханием Ландау; оно будет подробно изучено в томе X в связи с колебаниями плазмы. Правило обхода полюса в интеграле устанавливается заменой ω на $\omega + i0$ (т. е. $s \rightarrow s + i0$), смысл которой состоит в том, что ею обеспечивается конечность возмущения во все предыдущие моменты времени (в том числе при $t \rightarrow -\infty$).

При $F_0 \rightarrow 0$ найдем из (4.15), что s стремится к 1 по закону

$$s - 1 \approx 2e^{-2}e^{-2/F_0}. \quad (4.16)$$

Этот случай имеет более общее значение, чем формула (4.15), предполагающая $F = \text{const} \equiv F_0$: он соответствует нулевому звуку в почти идеальном ферми-газе при произвольном виде функции $F(\vartheta)$. Действительно, почти идеальному газу соответствует малая по абсолютной величине функция $F(\vartheta)$. Из уравнения (4.12) видно, что при этом s будет близким к 1, а функция ν — заметно отличной от нуля лишь при малых углах θ . На этом основании, рассматривая лишь область малых углов, можно заменить в интеграле в правой стороне (4.12) функцию $F(\vartheta)$ ее значением при $\vartheta = 0$ (при $\theta = 0$ и $\theta' = 0$ также и $\vartheta = 0$). В результате мы снова вернемся к формулам (4.14) и (4.16) с заменой константы F_0 на $F(0)$ ¹). Отметим, что в слабо неидеальном газе скорость нулевого звука превышает скорость обычного звука в $\sqrt{3}$ раз. Действительно, для первой имеем $u_0 \approx v_F$, а для второй находим из формулы (2.17) (пренебрегая в ней $\bar{F}$ и положив $m^* \approx m$), $u^2 \approx p_F^2/3m^{*2} = v_F^2/3$.

В общем случае произвольной зависимости $F(\theta)$ решение уравнения (4.12) неоднозначно. Оно, в принципе, допускает существование различных типов нулевого звука, отличающихся друг от друга угловой зависимостью их амплитуды $\nu(\theta, \varphi)$ и распространяющихся с различными скоростями. При этом наряду с аксиально-симметричными решениями $\nu(\theta)$ могут существовать и асимметричные решения, в которых ν содержит азимутальные множители $e^{\pm im\varphi}$, где m — целые числа (см. задачу). Отметим, что для всех таких решений интеграл $\int \nu d\omega = 0$, т. е. объем, заключенный внутри ферми-поверхности, остается неизменным; это значит, что колебания происходят без изменения плотности жидкости.

Возможность распространения волн в ферми-жидкости при абсолютном нуле означает, что ее энергетический спектр может содержать ветвь, отвечающую элементарным возбуждениям с импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и энергией $\varepsilon = \hbar\omega = u_0 p$ — «кванты нулевого звука». Тот факт, что нулевой звук (с любым заданным $\mathbf{k}$) может иметь произвольную (малую) интенсивность, в терминах элементарных возбуждений означает, что последние могут заполнять свои квантовые состояния в любом числе; другими словами,

¹) Колебания, соответствующие нулевому звуку в слабо неидеальном ферми-газе, были впервые рассмотрены Ю. Л. Климонтовичем и В. П. Силиным (1952).

они подчиняются статистике Бозе и образуют, как говорят, *бозевскую ветвь* спектра ферми-жидкости. Подчеркнем, однако, что в рамках теории Ландау было бы неправильным вводить соответствующие этой ветви поправки в термодинамические величины ферми-жидкости, поскольку они содержат более высокие степени температуры (T^3 в теплоемкости), чем уже первые поправки к изложенной приближенной теории.

Вопрос о поглощении нулевого звука требует рассмотрения столкновений квазичастиц и не относится к содержанию этого тома.

Задача

Найти скорость распространения асимметричных волн нулевого звука при $F = F_0 + F_1 \cos \vartheta$.

Решение. При

$$F = F_0 + F_1 (\cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi'))$$

могут существовать решения с $\nu \propto e^{\pm i\varphi}$. Действительно, положив $\nu = f(\theta)e^{i\varphi}$, подставив в (4.12) и произведя интегрирование по $d\varphi'$, получим

$$(s - \cos \theta)f = \frac{F_1}{4} \cos \theta \sin \theta \int_0^\pi \sin^2 \theta' f(\theta') d\theta'.$$

Отсюда

$$\nu = \text{const} \cdot \frac{\sin \theta \cos \theta}{s - \cos \theta} e^{i\varphi}.$$

Подставив это выражение обратно в уравнение, получим соотношение

$$\int_0^\pi \frac{\sin^3 \theta \cos \theta}{s - \cos \theta} d\theta = \frac{4}{F_1},$$

определяющее зависимость скорости распространения от F_1 . Интеграл в левой стороне равенства является монотонно убывающей функцией s . Поэтому его наибольшее значение достигается при $s = 1$. Вычислив интеграл при $s = 1$, найдем, что распространение асимметричной волны рассмотренного вида возможно при $F_1 > 6^{1/2}$.

§ 5. Спиновые волны в ферми-жидкости

Наряду с рассмотренными в предыдущем параграфе решениями $\psi_{\mathbf{n}}$, не зависящими от спина, уравнение (4.10) имеет также и решения вида

$$\hat{\psi} = \sigma \mu(\mathbf{n}), \quad (5.1)$$

¹) Для жидкого ³Не можно вычислить F_0 и F_1 по известным значениям m^* и u^2 с помощью формул (2.12) и (2.17): $F_0 = 10,8$, $F_1 = 6,3$ (при нулевом давлении).

в которых изменение функции распределения квазичастиц зависит от проекции их спина. Такие волны можно назвать *спиновыми*.

Подставив (5.1) в (4.10), снова взяв функцию $\hat{f}$ в виде (2.4) и заметив, что $\text{Sp}' \sigma'(\sigma\sigma') = 2\sigma$, получим (после сокращения на σ)

$$(s - \cos \theta)\mu(\theta, \varphi) = \cos \theta \int G(\vartheta)\mu(\theta', \varphi') \frac{d\sigma'}{4\pi}. \quad (5.2)$$

Таким образом, для каждой из компонент вектора μ получается уравнение, отличающееся от (4.12) лишь заменой F на G . Поэтому все дальнейшие вычисления, произведенные в § 4, могут быть применены и к спиновым волнам¹⁾.

Спиновые волны другого типа могут распространяться в ферми-жидкости в присутствии магнитного поля (*В. П. Силин*, 1958). Мы ограничимся здесь рассмотрением колебаний с $\mathbf{k} = 0$, в которых $\delta\hat{n}$ не зависит от координат.

При наличии магнитного поля $\mathbf{H}$ уже «невозмущенные» колебаниями энергия квазичастиц и функция их распределения зависят от спина. Эти зависимости связаны друг с другом и выражаются формулами (см. § 3)

$$\hat{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0(\mathbf{p}) - \beta_1 \sigma \mathbf{H}, \quad \beta_1 = \beta/(1 + \overline{G}), \quad (5.3)$$

$$\hat{n}_0 = n_0(\mathbf{p}) - \frac{dn_0}{d\varepsilon} \beta_1 \sigma \mathbf{H} = n_0(\mathbf{p}) + \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \beta_1 \sigma \mathbf{H}, \quad (5.4)$$

где $\varepsilon_0(\mathbf{p})$ — энергия в отсутствие поля; индекс 0 снова напоминает о том, что эти выражения относятся к равновесной жидкости.

Снова ищем малую переменную часть функции распределения в волне в виде

$$\delta\hat{n} = \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \sigma \mu(\mathbf{n}) e^{-i\omega t}.$$

Соответствующее изменение энергии квазичастицы:

$$\delta\hat{\varepsilon} = \sigma \int \mu(\mathbf{n}') G(\vartheta) \frac{d\sigma'}{4\pi} \cdot e^{-i\omega t}.$$

В кинетическом уравнении должен быть учтен теперь член (4.4) с коммутатором $\{\hat{\varepsilon}, \hat{n}\}$; для не зависящих от координат распределений оно принимает вид

$$\frac{\partial \delta\hat{n}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \{\hat{\varepsilon}, \hat{n}\} = 0. \quad (5.5)$$

С точностью до линейных по $\delta\hat{n}$ членов имеем

$$\{\hat{\varepsilon}, \hat{n}\} = -\beta_1 \{\sigma \mathbf{H}, \delta\hat{n}\} + \beta_1 \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \{\delta\hat{\varepsilon}, \sigma \mathbf{H}\}.$$

¹⁾ В жидком ³Не величина $G_0 = \overline{G(\vartheta)} < 0$ (см. примечание на с. 25). Поэтому распространение таких волн в этой жидкости невозможно.

Стоящие здесь коммутаторы определяются формулой

$$\{\sigma \mathbf{a}, \sigma \mathbf{b}\} = 2i\sigma[\mathbf{ab}],$$

где $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ — произвольные векторы (см. III, (55.10)); в результате кинетическое уравнение приводится к виду

$$i\omega\boldsymbol{\mu}(\mathbf{n}) = \frac{2\beta_1}{\hbar}[\mathbf{H}\boldsymbol{\rho}(\mathbf{n})], \quad (5.6)$$

где

$$\boldsymbol{\rho}(\mathbf{n}) = \boldsymbol{\mu}(\mathbf{n}) + \int \boldsymbol{\mu}(\mathbf{n}')G(\vartheta) \frac{d\vartheta'}{4\pi}. \quad (5.7)$$

В общем случае решение уравнения (5.6) может быть разложено в ряд по шаровым функциям $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (с полярной осью вдоль $\mathbf{H}$). Каждый член разложения представляет определенный тип колебаний со своей частотой ω_{lm} .

Первой из них, ω_{00} , отвечают колебания с $\boldsymbol{\mu} = \text{const}$; при этом $\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{\mu}(1 + \overline{G})$ и уравнение (5.6) сводится к

$$i\omega_{00}\boldsymbol{\mu} = \frac{2\beta}{\hbar}[\mathbf{H}\boldsymbol{\mu}];$$

колебания поперечны к полю ($\boldsymbol{\mu} \perp \mathbf{H}$). Расписав уравнение в компонентах (в плоскости, перпендикулярной $\mathbf{H}$) и составив определитель этой системы, найдем частоту

$$\omega_{00} = 2\beta H/\hbar. \quad (5.8)$$

Напомним, что β — магнитный момент частицы (истинной) жидкости. Таким образом, частота ω_{00} оказывается вовсе не зависящей от специфических свойств жидкости. Значения же всех остальных частот ω_{lm} зависят от конкретного вида функции $G(\vartheta)$.

§ 6. Вырожденный почти идеальный ферми-газ с отталкиванием между частицами

В этом параграфе мы рассмотрим свойства почти идеального вырожденного ферми-газа. Этот вопрос представляет существенный методический интерес, несмотря на то, что такие газы не существуют в природе как равновесные системы, поскольку все газы при температуре абсолютного нуля конденсируются. Тем не менее, разреженный ферми-газ может быть осуществлен как метастабильный объект с достаточно большим временем жизни. Излагаемая ниже теория, в которой конденсация исключена характером сделанных приближений, пригодна для описания таких систем на временах, много меньших времени жизни.

Условие слабой неидеальности газа заключается в малости радиуса действия молекулярных сил r_0 по сравнению со средним расстоянием между частицами $l \sim (V/N)^{1/3}$. Вместе с условием $r_0 \ll l$ будет справедливо также и неравенство

$$pr_0/\hbar \ll 1 \quad (6.1)$$

для импульсов p частиц. Действительно, для вырожденного ферми-газа предельный импульс p_F оценивается по формуле (1.1), согласно которой $p_F/\hbar \sim (N/V)^{1/3} \ll 1/r_0$.

Мы будем рассматривать здесь лишь парное взаимодействие между частицами, причем для простоты будем считать это взаимодействие $U(r)$ не зависящим от спинов частиц. Наша цель состоит в вычислении первых членов разложения термодинамических величин по степеням отношения r_0/l путем применения квантовомеханической теории возмущений. Затруднение заключается в том, что, ввиду быстрого возрастания энергии взаимодействия на малых расстояниях между частицами, теория возмущений (так называемое борновское приближение) к столкновениям частиц в действительности неприменима. Это затруднение можно, однако, обойти следующим образом.

В предельном случае «медленных» (какими они являются при условии (6.1)) столкновений, амплитуда взаимного рассеяния частиц с массой m стремится к постоянному пределу $-a$, который в борновском приближении дается выражением (см. III, (126.13))

$$-a = -\frac{m}{4\pi\hbar^2}U_0, \quad U_0 = \int U(r) d^3x, \quad (6.2)$$

причем этот предел отвечает s -состоянию пары частиц (со спином $1/2$); постоянную величину a называют *длиной рассеяния*¹⁾. Поскольку эта величина полностью определяет свойства столкновений, то она же должна определять и термодинамические свойства газа.

Отсюда вытекает возможность применения следующего приема (его называют *перенормировкой*). Формально заменяем истинную энергию $U(r)$ другой функцией, с тем же самым значением a , но допускающей применение теории возмущений. До тех пор (т. е. до такого приближения) пока окончательный

¹⁾ Выражение (6.2) не учитывает квантовомеханической тождественности частиц. В предельном случае медленных столкновений тождественных частиц со спинами $1/2$ рассеяние происходит только при антипараллельных спинах, причем дифференциальное сечение рассеяния в телесный угол $d\Omega$ (в системе центра инерции) есть $d\sigma = 4a^2 d\Omega$; полное сечение получается интегрированием $d\sigma$ по полусфере: $\sigma = 8\pi a^2$ (см. III, § 137).

результат вычислений содержит U только в виде амплитуды рассеяния, этот результат будет совпадать с тем, к которому приведено было истинное взаимодействие.

Радиус действия истинного взаимодействия, вообще говоря, совпадает по порядку величины с длиной рассеяния a . Для фиктивного же поля $U(r)$, введенного в качестве вспомогательного понятия, условие применимости борновского приближения означает, что $a \ll r_0$. Истинным малым параметром разложения теории является, конечно, величина $ap_F/\hbar$.

Ниже нам понадобится связь между U_0 и a не только в первом (формула (6.2)), но и во втором борновском приближении. Для ее нахождения вспомним, что если вероятность некоторого перехода системы под влиянием постоянного возмущения $\hat{V}$ определяется в первом приближении матричным элементом V_{00} , то во втором приближении V_{00} заменяется на

$$V_{00} + \sum_n' \frac{V_{0n}V_{n0}}{E_0 - E_n},$$

где суммирование производится по состояниям ($n \neq 0$) невозмущенной системы (см. III, § 43). В данном случае речь идет о системе двух сталкивающихся частиц, а возмущением является их взаимодействие $U(r)$. Матричные элементы возмущения для переходов с изменением импульсов частиц $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \rightarrow \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$ (причем $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2$) равны

$$\langle \mathbf{p}'_1 \alpha_1, \mathbf{p}'_2 \alpha_2 | U | \mathbf{p}_1 \alpha_1, \mathbf{p}_2 \alpha_2 \rangle = \frac{1}{V} \int U(r) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} d^3x, \quad (6.3)$$

где $\mathbf{p} = \mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}_2 = -(\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_1)$; ввиду независимости взаимодействия от спинов проекции спинов частиц (указываемые индексами α_1, α_2) при столкновении не меняются. Роль V_{00} играет матричный элемент при нулевых импульсах: U_0/V . Таким образом, для перехода от первого ко второму приближению надо заменить U_0 на

$$U_0 + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'_1} \left[\frac{p_1^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2}{2m} \right]^{-1} \left| \int U e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} d^3x \right|^2$$

(суммирование производится при заданных $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ по $\mathbf{p}'_1 \neq \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$). Поскольку в нашем случае импульсы частиц предполагаются малыми, то во всех существенных членах в сумме можно заменить матричные элементы их значениями при $\mathbf{p} = 0$. Сделав это,

получим следующее выражение для длины рассеяния¹⁾:

$$a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \left[U_0 + \frac{U_0^2}{V} \sum_{\mathbf{p}'_1} \frac{2m}{p_1^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2} \right]. \quad (6.4)$$

С той же точностью имеем отсюда

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \left[1 - \frac{4\pi\hbar^2 a}{mV} \sum_{\mathbf{p}'_1} \frac{2m}{p_1^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2} \right]. \quad (6.5)$$

Расходимость суммы в (6.4) (при больших $\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$) связана с произведенной заменой всех матричных элементов постоянными значениями и несущественна, так как при дальнейшем использовании этого выражения для вычисления энергии системы все равно получится сходящееся выражение, в котором большие импульсы не играют роли. Мы понимаем под a длину рассеяния медленных частиц, не зависящую от их энергии. Формула же (6.4) содержит, на первый взгляд, зависимость от импульсов $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$. В действительности эта зависимость заключена лишь в мнимой части амплитуды рассеяния, возникающей при надлежащем определении способа суммирования (см. III, (130.9)), на которую можно не обращать внимания, поскольку нам заранее известно, что окончательный результат будет все равно вещественным; к этому вопросу мы еще вернемся в § 21.

В этом параграфе мы рассмотрим модель ферми-газа с отталкивательным характером взаимодействия между частицами; для такого взаимодействия $a > 0$. Именно в этом случае газ имеет энергетический спектр описанного в § 1, 2 фермиевского типа.

Гамильтониан системы частиц (со спином $1/2$) с парным взаимодействием между ними записывается в методе вторичного квантования в виде

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\mathbf{p}\alpha} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha} + \\ & + \frac{1}{2} \sum \langle \mathbf{p}'_1 \alpha_1, \mathbf{p}'_2 \alpha_2 | U | \mathbf{p}_1 \alpha_1, \mathbf{p}_2 \alpha_2 \rangle \hat{a}_{\mathbf{p}'_1 \alpha_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}'_2 \alpha_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2 \alpha_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_1 \alpha_1} \end{aligned} \quad (6.6)$$

(см. III, § 64). Здесь $\hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+$ и $\hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}$ — операторы рождения и уничтожения свободной частицы с импульсом $\mathbf{p}$ и проекцией спина α

¹⁾ Во всех промежуточных формулах мы пишем суммы по дискретным значениям импульсов частиц, заключенных в конечном объеме V ; при окончательном вычислении суммирование заменяется, по общему правилу, интегрированием по $V d^3 p / (2\pi\hbar)^3$.

($\alpha = \pm 1/2$). Первый член в (6.6) отвечает кинетической, а второй — потенциальной энергии частиц; в последнем суммирование производится по всем значениям импульсов и проекцией спинов с соблюдением закона сохранения импульса при столкновениях.

В соответствии с предположением о малости импульсов частиц снова заменяем матричные элементы в (6.6) их значением при нулевых импульсах: $\langle 0\alpha_1, 0\alpha_2 | U | 0\alpha_1, 0\alpha_2 \rangle = U_0/V$. Далее, замечаем, что в силу антикоммутативности операторов $\hat{a}_{\mathbf{p}_1\alpha_1}$, $\hat{a}_{\mathbf{p}_2\alpha_2}$ в статистике Ферми, их произведение антисимметрично по отношению к перестановке индексов; то же самое относится к произведениям $\hat{a}_{\mathbf{p}'_1\alpha_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}'_2\alpha_2}^+$. В результате взаимно сокращаются все члены во второй сумме в (6.6), содержащие пары одинаковых индексов α_1, α_2 (физически это связано с упомянутым уже обстоятельством, что в пределе медленных столкновений взаимно рассеиваться могут лишь частицы с противоположными спинами).

Таким образом, гамильтониан системы принимает вид

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}\alpha} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+ a_{\mathbf{p}\alpha} + \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\mathbf{p}'_1} \hat{a}_{1+}'^+ \hat{a}_{2-}'^+ \hat{a}_{2-} \hat{a}_{1+}, \quad (6.7)$$

где $\hat{a}_{1+} \equiv \hat{a}_{\mathbf{p}_1+}$, $\hat{a}_{1+}' \equiv \hat{a}_{\mathbf{p}'_1+}$ и т. п., а индексы + и — здесь и ниже стоят вместо +1/2 и -1/2.

Собственные значения этого гамильтониана вычисляются с помощью обычной теории возмущений, причем второй член в (6.7) рассматривается как малая поправка к первому члену. Последний уже имеет диагональный вид и его собственные значения равны

$$E^{(0)} = \sum_{\mathbf{p}\alpha} \frac{p^2}{2m} n_{\mathbf{p}\alpha}, \quad (6.8)$$

где $n_{\mathbf{p}\alpha}$ — числа заполнения состояний $\mathbf{p}\alpha$ ¹⁾.

Поправка первого порядка дается диагональными матричными элементами энергии взаимодействия:

$$E^{(1)} = \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2} n_{1+} n_{2-}, \quad (6.9)$$

где $n_{1+} \equiv n_{\mathbf{p}_1+}$ и т. п.

¹⁾ Предполагая, что частицы обладают определенными значениями проекции спина, мы тем самым предполагаем приведенной к диагональному виду также и статистическую матрицу $n_{\alpha\beta}(\mathbf{p})$; функции же $n_{\alpha}(\mathbf{p})$ с $\alpha = \pm 1/2$ являются при этом ее диагональными компонентами.

Для нахождения поправки второго порядка пользуемся известной формулой теории возмущений

$$E_n^{(2)} = \sum'_m \frac{|V_{nm}|^2}{E_n - E_m},$$

где индексы n, m нумеруют состояния невозмущенной системы. Простое вычисление (с использованием известных матричных элементов операторов $\hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}, \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+$) приводит к результату

$$\frac{U_0^2}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}'_1} \frac{n_{1+} n_{2-} (1 - n'_{1+}) (1 - n'_{2-})}{(p_1^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2)/2m}. \quad (6.10)$$

Структура этого выражения вполне понятна: квадрат матричного элемента перехода $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \rightarrow \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$ пропорционален числам заполнения состояний $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ и числам свободных мест в состояниях $\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$.

Входящий в (6.9), (6.10) интеграл U_0 должен быть выражен через реальную физическую величину — амплитуду рассеяния — a . В членах второго порядка это может быть сделано по (6.2), а в членах первого порядка требуется более точная формула (6.5). Произведя эти подстановки, получим для поправки первого порядка по a :

$$E^{(1)} = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2} n_{1+} n_{2-} \quad (6.11)$$

и для поправки второго порядка:

$$E^{(2)} = \frac{2mg^2}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}'_1} \frac{n_{1+} n_{2-} [(1 - n'_{1+}) (1 - n'_{2-}) - 1]}{p_1^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2}$$

(для краткости вводим в промежуточных формулах «константу связи» частиц газа¹⁾ $g = 4\pi\hbar^2 a/m$). Раскрывая выражение в числителе, замечаем, что члены с произведениями четырех n взаимно сокращаются, поскольку их числители симметричны, а знаменатели антисимметричны по отношению к перестановке $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ и $\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$; суммирование же по этим переменным производится симметричным образом. Таким образом, окончательно

¹⁾ После перенормировки амплитуды рассеяния эта величина уже отнюдь не совпадает с постоянной U_0 , фигурирующей в (6.2)!

имеем

$$E^{(2)} = -\frac{2mg^2}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}'_1} \frac{n_{1+} n_{2-} (n'_{1+} + n'_{2-})}{p_1^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2}. \quad (6.12)$$

Эта сумма (в которой все $n_{\mathbf{p}\alpha} \rightarrow 0$ при $\mathbf{p} \rightarrow \infty$) уже сходится.

С помощью полученных формул можно прежде всего вычислить энергию основного состояния. Для этого надо положить все $n_{\mathbf{p}\alpha}$ равными единице внутри ферми-сферы ($p < p_F = \hbar(3\pi^2 N/V)^{1/3}$) и равными нулю вне ее. Заметим в этой связи, что хотя в исходном гамильтониане собственные значения операторных произведений $\hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}$ дают числа заполнения состояний самих частиц газа, но после диагонализации гамильтониана с помощью теории возмущений мы уже имеем дело с функцией распределения квазичастиц (обозначенной нами, как и в предыдущих параграфах, через $n_{\mathbf{p}\alpha}$).

Замечая, что $\sum n_{\mathbf{p}+} = \sum n_{\mathbf{p}-} = N/2$, получим из (6.11) поправку первого порядка

$$E_0^{(1)} = gN^2/4V.$$

В формуле (6.12) заменяем суммирование по трем импульсам с учетом условия $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2$ интегрированием по

$$\frac{V^3}{(2\pi\hbar)^9} \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}'_2) d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 p'_1 d^3 p'_2,$$

так что

$$E_0^{(2)} = -\frac{4mg^2 V}{(2\pi\hbar)^9} \int \frac{\delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}'_2)}{p_1^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2} d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 p'_1 d^3 p'_2,$$

причем интегрирование происходит по области $p_1, p_2, p'_1 \leq p_F$. Вычисление интеграла¹⁾ приводит к следующему окончательному результату для энергии основного состояния:

$$E_0 = N \frac{3p_F^2}{10m} \left[1 + \frac{10}{9\pi} \frac{p_F a}{\hbar} + \frac{4(11 - 2 \ln 2)}{21\pi^2} \left(\frac{p_F a}{\hbar} \right)^2 \right], \quad (6.13)$$

где величина, стоящая перед скобками, — энергия идеального ферми-газа (*K. Huang, C. N. Yang, 1957*).

¹⁾ Фактически проще производить вычисления в другом порядке, начав с вычисления функции f (см. ниже).

Химический потенциал газа при абсолютном нуле определяется как производная $\mu = (\delta E_0 / \delta N)_V$; выраженный через предельный импульс p_F он имеет вид

$$\mu = \frac{p_F^2}{2m} \left[1 + \frac{4}{3\pi} \frac{p_F a}{\hbar} + \frac{4(11 - 2 \ln 2)}{15\pi^2} \left(\frac{p_F a}{\hbar} \right)^2 \right]. \quad (6.14)$$

Согласно общим положениям теории Ландау, спектр элементарных возбуждений $\varepsilon(\mathbf{p})$ и функция взаимодействия квазичастиц $f_{\alpha\alpha'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ определяются первой и второй вариациями полной энергии по функции распределения квазичастиц¹⁾. Если писать E в виде дискретной суммы по $\mathbf{p}$ и α , то имеем, по определению,

$$\delta E = \sum_{\mathbf{p}\alpha} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p}) \delta n_{\mathbf{p}\alpha} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}\alpha, \mathbf{p}'\alpha'} f_{\alpha\alpha'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n_{\mathbf{p}\alpha} \delta n_{\mathbf{p}'\alpha'} \quad (6.15)$$

(причем после дифференцирования энергии надо заменить $n_{\mathbf{p}\alpha}$ единицей внутри и нулем вне ферми-сферы). В вычислении таким путем эффективной массы квазичастиц m^* , однако, нет необходимости, поскольку она может быть найдена и более простым способом (см. ниже).

Для вычисления же функции $f_{\alpha\alpha'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ (на ферми-поверхности), дифференцируем дважды сумму выражений (6.11), (6.12), после чего надо положить $p = p' = p_F$. Произведя это простое вычисление и перейдя от суммирования к интегрированию, получим

$$f_{+-}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = g - \frac{4mg^2}{(2\pi\hbar)^3} \int \left[\frac{\delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}' - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)}{2p_F^2 - p_1^2 - p_2^2} + \frac{\delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}' - \mathbf{p}_2) + \delta(\mathbf{p}' + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p} - \mathbf{p}_2)}{2(p_1^2 - p_2^2)} \right] d^3 p_1 d^3 p_2,$$

$$f_{++}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_{--}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{2mg^2}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{\delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}' - \mathbf{p}_2) + \delta(\mathbf{p}' + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p} - \mathbf{p}_2)}{(p_1^2 - p_2^2)} d^3 p_1 d^3 p_2.$$

Интегрирование в этих формулах сравнительно просто ввиду меньшей кратности интегралов.

¹⁾ Матрица $f_{\alpha\alpha'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ в этом параграфе — это совокупность диагональных по двум парам индексов (α, β и γ, δ) компонент матрицы $f_{\alpha\gamma, \beta\delta}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$.

Окончательный результат должен быть представлен в виде (2.4), не зависящем от выбора оси квантования спинов. В таком виде он дается формулой

$$f_{\alpha\gamma, \beta\delta} = \frac{2\pi a\hbar^2}{m} \left\{ \left[1 + \frac{2ap_F}{\pi\hbar} \left(2 + \frac{\cos\vartheta}{2\sin\frac{\vartheta}{2}} \ln \frac{1+\sin\frac{\vartheta}{2}}{1-\sin\frac{\vartheta}{2}} \right) \right] \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} - \left[1 + \frac{2ap_F}{\pi\hbar} \left(1 - \frac{1}{2} \sin\frac{\vartheta}{2} \ln \frac{1+\sin\frac{\vartheta}{2}}{1-\sin\frac{\vartheta}{2}} \right) \right] \sigma_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta} \right\}, \quad (6.16)$$

где ϑ — угол между векторами $\mathbf{p}_F$ и $\mathbf{p}'_F$ (А. А. Абрикосов, И. М. Халатников, 1957)¹⁾.

Эффективная масса квазичастиц получается отсюда интегрированием по формуле (2.12) и равна

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{8}{15\pi^2} (7 \ln 2 - 1) \left(\frac{ap_F}{\hbar} \right)^2. \quad (6.17)$$

Формула же (2.17) позволяет найти скорость звука в газе:

$$u^2 = \frac{p_F^2}{3m^2} \left[1 + \frac{2}{\pi} \frac{ap_F}{\hbar} + \frac{8(11 - 2 \ln 2)}{15\pi^2} \left(\frac{ap_F}{\hbar} \right)^2 \right]. \quad (6.18)$$

Интегрируя затем величину $u^2 m/N$ (выраженную через N/V вместо p_F) по dN , найдем, согласно (2.13), химический потенциал газа, а еще одно интегрирование по dN приведет к выражению (6.13) для энергии основного состояния.

Формула (6.13) представляет собой первые члены разложения энергии газа по степеням «параметра газовости» $\eta = p_F a / \hbar \sim \sim a(N/V)^{1/3}$. Аналогичными, хотя и значительно более громоздкими вычислениями можно было бы получить еще и несколько следующих членов разложения. Дело в том, что в случае ферми-газа тройные столкновения вносят вклад в энергию лишь в сравнительно далеком приближении. Из трех сталкивающихся

¹⁾ Функция (6.16) обращается логарифмически в бесконечность при $\vartheta = \pi$. Это обстоятельство связано со сделанными пренебрежениями. Более точное исследование показывает, что хотя значение $\vartheta = \pi$ действительно является особой точкой функции, но последняя обращается в ней не в бесконечность, а в нуль (см. примечание на с. 285). Неприменимость формулы (6.16) вблизи $\vartheta = \pi$ несущественна для дальнейших приложений, в которых фигурируют интегралы, сходящиеся в этой точке.

частиц по крайней мере две имеют одинаковую проекцию спина; при этом координатная волновая функция системы должна быть антисимметричной по отношению к этим двум частицам. Это значит, что орбитальный момент относительного движения этих частиц равен по крайней мере 1 (p -состояние). Соответствующая волновая функция содержит лишнюю (по сравнению с волновой функцией s -состояния) степень $p/\hbar$ (см. III, § 33), и, следовательно, вероятность такого столкновения содержит лишнее p^2 , т. е. ослабляется в $\sim (pa/\hbar)^2 \sim \eta^2$ раз по сравнению с вероятностью «лобового» столкновения частиц, неподчиняющихся принципу Паули. В результате тройные столкновения дадут вклад в энергию лишь в членах, содержащих объем как $V^{-2}V^{-2/3}$. Другими словами, через характеристики одних только парных столкновений выражаются все члены разложения энергии вплоть до членов порядка

$$N \frac{p_F^2}{m} \eta^5$$

включительно (т. е. еще три члена, следующих за выписанными в (6.13)). Однако в числе характеристик парных столкновений будет фигурировать не только амплитуда s -рассеяния для медленных столкновений (как в (6.13)), но и ее производные по энергии, а также амплитуда p -рассеяния.

ГРИНОВСКИЕ ФУНКЦИИ ФЕРМИ-СИСТЕМЫ ПРИ $T = 0$ **§ 7. Функция Грина макроскопической системы**

Примененный в предыдущем параграфе метод становится громоздким и практически неприменимым в высших приближениях теории возмущений. Этот недостаток тем более существен, что в реальных физических задачах взаимодействие между частицами отнюдь не является слабым, так что для выяснения различных общих свойств макроскопических систем требуется рассмотрение бесконечных совокупностей членов ряда теории возмущений. Для преодоления подобных трудностей существует математическая техника, подобная той, которая применяется в квантовой теории поля.

Конкретная форма этого математического аппарата существенно зависит от характера макроскопической системы, к которой она должна применяться. Последующие параграфы этой главы посвящены развитию аппарата для ферми-жидкости при абсолютном нуле температур¹⁾. При этом изложение имеет своей целью не только фактическое применение метода к данному объекту, но и демонстрацию того, каким образом вообще строится такой аппарат.

Исходным материалом в нем являются вторично-квантованные ψ -операторы, свойства которых известны из квантовой механики (см. III, § 64, 65). Нам сейчас понадобятся эти операторы в гейзенберговском представлении, в котором они зависят явно от времени. Поэтому мы начнем с выяснения некоторых свойств ψ -операторов в этом представлении.

Мы будем рассматривать системы, составленные из частиц со спином $1/2$. Соответственно этому, ψ -операторам должен быть приписан индекс, указывающий значение проекции спина и пробегающий значения $\pm 1/2$; спиновые индексы будем по-прежнему обозначать буквами греческого алфавита, а по дважды повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

По общему правилу (см. III, § 13) оператор $\hat{f}(t)$ любой физической величины в гейзенберговском представлении выражается через не зависящий от времени (шредингеровский) оператор $\hat{f}$

¹⁾ Систематическое построение этого аппарата принадлежит В.М. Галицкому и А.Б. Мигдалу (1958).

той же величины согласно¹⁾).

$$\hat{f}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{f} e^{-i\hat{H}t},$$

где $\hat{H}$ — гамильтониан системы.

Здесь, однако, будет целесообразно несколько изменить это определение. Дело в том, что в квантовой статистике удобнее рассматривать состояния системы не при заданном числе частиц N в ней, а при заданном химическом потенциале μ . При этом основное состояние системы, в котором она находится при $T=0$, можно определить как состояние с наименьшим собственным значением оператора

$$\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N} \quad (7.1)$$

(а не $\hat{H}$, как при заданном N). Действительно, вероятность системе находиться (при заданном значении μ) в состоянии с энергией E_n и числом частиц N_n равна

$$\omega \propto \exp\left(-\frac{E_n - \mu N_n}{T}\right) = \exp\left(-\frac{E'_n}{T}\right)$$

(см. V, (35.1)), E'_n — собственные значения оператора $\hat{H}'$; и мы видим, что при $T=0$ остается только состояние с наименьшим E'_n ²⁾.

Таким образом, определим гейзенберговские ψ -операторы формулами

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) &= e^{i\hat{H}'t} \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}) e^{-i\hat{H}'t}, \\ \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) &= e^{i\hat{H}'t} \hat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{r}) e^{-i\hat{H}'t}. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Мы будем обозначать гейзенберговские ψ -операторы заглавной буквой $\hat{\Psi}$, а шредингеровские — строчной буквой $\hat{\psi}$.

Шредингеровские ψ -операторы удовлетворяют известным правилам коммутации. Коммутаторы же гейзенберговских операторов, взятых в различные моменты времени t и t' , нельзя вычислить в общем виде. Однако при $t = t'$ их правила коммутации совпадают с правилами для шредингеровских операторов. Так из правила

$$\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\beta^+(\mathbf{r}') + \hat{\psi}_\beta^+(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

¹⁾ С целью упрощения записи формул мы будем широко пользоваться системой единиц, в которой квантовая постоянная $\hbar = 1$ (так что импульс имеет размерность см^{-1} , а энергия — с^{-1}). Для перехода от этой системы к обычным единицам все импульсы $\mathbf{p}$ и энергии E в формулах надо заменить на $\mathbf{p}/\hbar$ и $E/\hbar$. Такие единицы используются, в частности, в этой главе.

²⁾ Мы будем называть оператор $\hat{H}'$, как и $\hat{H}$, гамильтонианом.

следует аналогичное правило

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r})\hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') + \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}')\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) = \\ = e^{i\hat{H}'t}(\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r})\hat{\psi}_\beta^+(\mathbf{r}') + \hat{\psi}_\beta^+(\mathbf{r}')\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}))e^{-i\hat{H}'t} = \delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (7.3)$$

Таким же образом:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r})\hat{\Psi}_\beta(t, \mathbf{r}') + \hat{\Psi}_\beta(t, \mathbf{r}')\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) = 0, \\ \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r})\hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') + \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}')\hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) = 0. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Дифференцируя определение (7.2) по времени, найдем, что гейзенберговский ψ -оператор удовлетворяет уравнению

$$-i\frac{\partial}{\partial t}\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) = \hat{H}'\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) - \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r})\hat{H}' \quad (7.5)$$

(см. III, (13.7)).

Гейзенберговское и шредингеровское представления тождественны для оператора всякой сохраняющейся величины (т. е. оператора, коммутативного с гамильтонианом). Это относится, в частности, к самому гамильтониану, а также к оператору числа частиц — тоже, разумеется, сохраняющейся величины. Выражения этих операторов через шредингеровские или гейзенберговские ψ -операторы одинаковы. Так, оператор числа частиц

$$\hat{N} = \int \hat{\psi}_\alpha^+(\mathbf{r})\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) d^3x = \int \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r})\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) d^3x. \quad (7.6)$$

Гамильтониан же системы взаимодействующих частиц имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \hat{H}'^{(0)} + \hat{V}^{(1)} + \hat{V}^{(2)} + \dots \\ \hat{H}'^{(0)} &= -\frac{1}{2m} \int \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r})\Delta\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) d^3x - \mu\hat{N}, \\ \hat{V}^{(1)} &= \int \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r})U^{(1)}(\mathbf{r})\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) d^3x, \end{aligned} \quad (7.7)$$

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r})\hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}')U^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}')\hat{\Psi}_\beta(t, \mathbf{r}) d^3x d^3x'.$$

Здесь $\hat{H}'^{(0)}$ — гамильтониан системы свободных частиц; $\hat{V}^{(1)}$ — оператор их взаимодействия с внешним полем $U^{(1)}(\mathbf{r})$; $\hat{V}^{(2)}$ — оператор парного взаимодействия частиц, причем $U^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ — энергия взаимодействия двух частиц; опущенные члены — тройные и т. д. взаимодействия (см. III, (64.25)). Для простоты предполагаем все взаимодействия не зависящими от спинов частиц.

Коммутатор $\hat{H}'$ и $\hat{\Psi}_\alpha$ в (7.5) вычисляется с помощью правил (7.3), (7.4); возникающие при этом δ -функции устраняются интегрированием. В результате получим «уравнение Шредингера» для $\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r})$ в виде

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) = \left(-\frac{1}{2m}\Delta - \mu + U^{(1)}(\mathbf{r})\right)\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) + \int \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') U^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}_\beta(t, \mathbf{r}') d^3x' \cdot \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) + \dots \quad (7.8)$$

Основную роль в излагаемом методе играет понятие *функции Грина* макроскопической системы. Она определяется следующим выражением¹⁾:

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = -i\langle T\hat{\Psi}_\alpha(X_1)\hat{\Psi}_\beta^+(X_2)\rangle. \quad (7.9)$$

Здесь и ниже X обозначает, для краткости, совокупность момента времени t и радиус-вектора точки $\mathbf{r}$. Угловые скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по основному состоянию системы (вместо более громоздкого символа диагонального матричного элемента $\langle 0 | \dots | 0 \rangle$). Символ же T есть знак хронологического произведения: следующие за ним операторы должны быть расположены справа налево в порядке возрастания времен t_1, t_2 . При этом в случае фермионов перестановка пары ψ -операторов (по сравнению с их расположением в первоначальной записи произведения) должна сопровождаться изменением знака произведения. В явном виде это значит, что

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \begin{cases} -i\langle \hat{\Psi}_\alpha(X_1)\hat{\Psi}_\beta^+(X_2)\rangle, & t_1 > t_2, \\ i\langle \hat{\Psi}_\beta^+(X_2)\hat{\Psi}_\alpha(X_1)\rangle, & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (7.10)$$

Отметим некоторые очевидные свойства функции Грина. Если система не ферромагнитна и не находится во внешнем поле, то спиновая зависимость функции Грина сводится к единичной матрице:

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \delta_{\alpha\beta}G(X_1, X_2) \quad (7.11)$$

(всякая другая форма зависимости выделяла бы избранное направление в пространстве — ось z квантования спина)²⁾. В силу

¹⁾ Это определение аналогично определению точных функций Грина (пропагаторов) в квантовой электродинамике (см. IV, § 103, 105).

²⁾ Это утверждение требует пояснения. Спиновые компоненты $\hat{\Psi}_\alpha$ составляют контравариантный спинор первого ранга (и в этом смысле более правильным было бы обозначение $\hat{\Psi}^\alpha$ с индексом α сверху). Компоненты же $\hat{\Psi}_\beta^+$ составляют ковариантный спинор. Поэтому $G_{\alpha\beta}$ есть смешанный спинор второго ранга. Единичным же смешанным спинором второго ранга является именно $\delta_{\alpha\beta}$.

однородности времени моменты t_1 и t_2 входят в функцию Грина лишь в виде разности $t = t_1 - t_2$. Если, сверх того, система микроскопически однородна в пространстве, то лишь в виде разности $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ входят также и координаты двух точек. Другими словами, в этом случае

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \delta_{\alpha\beta}G(X), \quad X = X_1 - X_2. \quad (7.12)$$

Подчеркнем, что макроскопическая однородность означает, что тело предполагается однородным не только по своей средней (макроскопической) плотности, но и по плотности вероятности различных (микроскопических) положений его частиц в пространстве. Именно таковы жидкости и газы (но не твердые кристаллы). В силу их изотропии $G(t, \mathbf{r}) = G(t, -\mathbf{r})$. В этой связи подчеркнем лишний раз, что в то же время функция $G(t, \mathbf{r})$, по самому своему определению, отнюдь не четна по переменной t . В этом смысле порядок t_1 и t_2 в разности $t = t_1 - t_2$ существен.

Координатная матрица плотности частицы в системе определяется как среднее значение

$$\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{N} \langle \hat{\Psi}_{\beta}^{+}(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_{\alpha}(t, \mathbf{r}_1) \rangle. \quad (7.13)$$

Знание этой матрицы позволяет определить среднее значение любой величины, относящейся к отдельной частице. Действительно, пусть $\hat{F}_{\alpha\beta}$ — некоторый «одночастичный» оператор, т. е. оператор вида

$$\hat{F}_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha} \hat{f}_{\alpha\beta}^{(0)}, \quad (7.14)$$

где $\hat{f}_{\alpha\beta}^{(0)}$ — оператор, действующий на координаты и спин лишь одной (α -й) частицы, а суммирование производится по всем частицам в системе. В аппарате вторичного квантования такой оператор записывается (в гейзенберговском представлении) как

$$\hat{F}_{\alpha\beta}(t) = \int \hat{\Psi}_{\alpha}^{+}(t, \mathbf{r}) \hat{f}_{\beta\gamma} \hat{\Psi}_{\gamma}(t, \mathbf{r}) d^3x \quad (7.15)$$

(см. III, (64.23)). Отсюда ясно, что среднее значение величины F может быть выражено в терминах матрицы плотности в виде

$$\langle F \rangle = N \langle f \rangle = N \int [\hat{f}_{\alpha\beta}^{(1)} \rho_{\beta\alpha}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)]_{\mathbf{r}_2=\mathbf{r}_1} d^3x_1, \quad (7.16)$$

где $\hat{f}_{\alpha\beta}^{(1)}$ — оператор, действующий на координаты $\mathbf{r}_1$ (положить $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1$ надо после воздействия оператора, но перед интегрированием).

Согласно (7.10), матрица плотности может быть выражена через гриновскую функцию

$$\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{i}{N} G_{\alpha\beta}(t_1, \mathbf{r}_1; t_1 + 0, \mathbf{r}_2). \quad (7.17)$$

Здесь (как и везде ниже) обозначение аргумента функции в виде $t_1 + 0$ означает, что имеется в виду предел при стремлении аргумента к значению t_1 сверху. Взятием этого предела обеспечивается правильная расстановка ψ -операторов, совпадающая с их расстановкой в произведении (7.13).

Для микроскопически однородной системы матрица плотности зависит только от разности $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, а при независимости от спинов $\rho_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}\rho$, причем

$$\rho(\mathbf{r}) = -\frac{i}{N} G(t = -0, \mathbf{r}), \quad (7.18)$$

где вместо $G_{\alpha\beta}(X_1, X_2)$ введена функция $G(X_1 - X_2) \equiv G(X)$, согласно (7.12). При $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ и после взятия следа по спиновым переменным произведение операторов в (7.13) превращается в $\hat{\Psi}_\alpha^+ \hat{\Psi}_\alpha$ — оператор плотности числа частиц в системе. Поэтому средняя плотность тела

$$\frac{N}{V} = 2N\rho(0) = -2i G(t = -0, \mathbf{r} = 0) \quad (7.19)$$

(t стремится к нулю снизу). Это равенство связывает химический потенциал μ при $T = 0$ (от которого G зависит как от параметра) с плотностью числа частиц N/V .

Фурье-разложение функции $\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ определяет распределение частиц по импульсам¹⁾

$$\begin{aligned} N(\mathbf{p}) &= N \int \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} d^3(x_1 - x_2) = \\ &= -i \int G(t, \mathbf{r}) \Big|_{t=-0} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} d^3x. \end{aligned} \quad (7.20)$$

¹⁾ Напомним (см. III, § 14), что одночастичная матрица плотности есть интеграл

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int \Psi^*(\mathbf{r}_2, q) \Psi(\mathbf{r}_1, q) dq,$$

где $\Psi(\mathbf{r}, q)$ — волновая функция системы в целом, причем $\mathbf{r}$ обозначает радиус-вектор одной частицы, а q — совокупность координат всех остальных частиц; по последним производится интегрирование. Фурье-компоненты матрицы плотности совпадают с выражением

$$\int \left| \int \Psi(\mathbf{r}, q) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} d^3x \right|^2 dq,$$

откуда и следует ее связь с распределением частиц по импульсам.

Это есть число частиц (в единице объема) с определенным значением проекции спина и с импульсами в интервале $d^3p/(2\pi)^3$. Подчеркнем, что речь идет здесь об истинных частицах, а не о квазичастицах (последние в излагаемом аппарате еще не появились!). Обозначение $N(\mathbf{p})$ введено в отличие от функции распределения квазичастиц $n(\mathbf{p})$.

В дальнейшем мы будем обычно иметь дело с функцией Грина в импульсном представлении, определенной как компонента фурье-разложения функции $G(t, \mathbf{r})$ по t и $\mathbf{r}$:

$$G(t, \mathbf{r}) = \int G(\omega, \mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - \omega t)} \frac{d\omega d^3p}{(2\pi)^4}, \quad (7.21)$$

$$G(\omega, \mathbf{p}) = \int G(t, \mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r} - \omega t)} dt d^3x. \quad (7.22)$$

Распределение частиц по импульсам выражается через эту функцию формулой

$$N(\mathbf{p}) = -i \lim_{t \rightarrow -0} \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega, \mathbf{p}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}, \quad (7.23)$$

получающейся подстановкой (7.21) в (7.20). Ее нормировка выражается формулой

$$-2i \lim_{t \rightarrow -0} \int G(\omega, \mathbf{p}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega d^3p}{(2\pi)^4} = \frac{N}{V}, \quad (7.24)$$

представляющей собой условие (7.19), выраженное в импульсном представлении. Таким образом, распределение $N(\mathbf{p})$ автоматически правильно нормировано:

$$2 \int N(\mathbf{p}) \frac{d^3p}{(2\pi)^3} = \frac{N}{V}.$$

Отметим, что предел, в котором берутся интегралы (7.23), (7.24), эквивалентен определенному правилу обхода в плоскости комплексной переменной ω . Наличие множителя $e^{-i\omega t}$ с $t < 0$ позволяет замкнуть путь интегрирования (вещественная ось) бесконечно удаленной полуокружностью в верхней полуплоскости ω , так что интеграл определяется вычетами функции $G(\omega, \mathbf{p})$ в ее полюсах, лежащих в этой полуплоскости.

§ 8. Определение энергетического спектра по функции Грина

Для микроскопически однородной системы легко определить зависимость от времени и координат матричных элементов гейзенберговского ψ -оператора по отношению к стационарным состояниям с определенными значениями энергии и импульса.

Зависимость от времени дается обычным экспоненциальным множителем

$$\langle n | \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) | m \rangle = e^{i\omega_{nm}t} \langle n | \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) | m \rangle, \quad (8.1)$$

но поскольку гейзенберговский ψ -оператор определен с помощью гамильтониана $\hat{H}'$, то

$$\omega_{nm} = E'_n - E'_m = E_n - E_m - \mu(N_n - N_m).$$

Согласно общим свойствам ψ -операторов оператор $\hat{\Psi}$ уменьшает (а $\hat{\Psi}^+$ увеличивает) число частиц в системе на 1. Поэтому в матричном элементе (8.1) $N_n = N_m - 1$, так что

$$\omega_{nm} = E_n(N) - E_m(N + 1) + \mu, \quad (8.2)$$

где в виде аргументов указаны числа частиц в соответствующих состояниях.

Для определения координатной зависимости замечаем, что в силу однородности системы матричные элементы ее ψ -операторов не могут измениться при смещении на любое расстояние $\mathbf{r}$ относительно системы. Это, однако, не означает, что матричные элементы вообще не зависят от координат. Дело в том, что отличие $\psi_{nm}(\mathbf{r})$ от значения $\psi_{nm}(0)$ в некоторой заданной точке $\mathbf{r} = 0$ связано с двумя причинами: со смещением на расстояние $\mathbf{r}$ относительно самой системы и с перемещением точки наблюдения в другое место пространства, что также меняет фазы волновых функций. Чтобы исключить последнее изменение, сместим систему на вектор $-\mathbf{r}$, т. е. применим к ее волновым функциям оператор параллельного переноса

$$\hat{\mathbf{T}}(-\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{r}\hat{\mathbf{P}}}$$

($\hat{\mathbf{P}}$ — оператор полного импульса системы; см. III, (15.13)). В результате этих операций точка наблюдения вернется в исходное место пространства, но останется смещенной относительно системы на вектор $\mathbf{r}$. Инвариантность матричных элементов по отношению к такому преобразованию выразится равенством

$$\langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle = \langle n | e^{i\mathbf{r}\hat{\mathbf{P}}} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{r}\hat{\mathbf{P}}} | m \rangle. \quad (8.3)$$

Если в состояниях n и m система обладает определенными импульсами $\mathbf{P}_n$ и $\mathbf{P}_m$, то

$$\langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle = e^{i\mathbf{k}_{nm}\mathbf{r}} \langle n | \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) | m \rangle,$$

откуда

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) | m \rangle &= e^{i(\omega_{nm}t - \mathbf{k}_{nm}\mathbf{r})} \langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle, \\ \langle n | \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) | m \rangle &= \langle m | \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) | n \rangle^*, \end{aligned} \quad (8.4)$$

где $\mathbf{k}_{nm} = \mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m$.

С помощью этих формул можно получить важное разложение для функции Грина в импульсном пространстве, проясняющее ее физический смысл.

Ввиду «разрывного» определения функции $G(t, \mathbf{r})$, при вычислении $G(\omega, \mathbf{p})$ надо разбить интеграл по dt в (7.22) на два интеграла: от $-\infty$ до 0 и от 0 до ∞ . Во втором из них (т. е. при $t = t_1 - t_2 > 0$) имеем, раскрывая определение (7.10) по правилу умножения матриц:

$$G(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{2} G_{\alpha\alpha} = -\frac{i}{2} \sum_m \langle 0 | \hat{\Psi}_\alpha(X_1) | m \rangle \langle m | \hat{\Psi}_\alpha^+(X_2) | 0 \rangle$$

(суммирование по всем квантовым состояниям системы). Подставив сюда (8.4) и учтя, что в основном состоянии $\mathbf{P}_0 = 0$, находим

$$G(t, \mathbf{r}) = -\frac{i}{2} \sum_m |\langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2 e^{i(\omega_{0m}t + \mathbf{P}_m\mathbf{r})}, \quad (8.5)$$

где $\omega_{0m} = E_0(N) - E_m(N+1) + \mu$.

Интегрирование по пространству в (7.22) (с $G(t, \mathbf{r})$ из (8.5)) дает в каждом члене суммы δ -функцию $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)$. При интегрировании же по dt ($t > 0$) для обеспечения сходимости надо добавить к ω бесконечно малую положительную мнимую часть, т. е. заменить $\omega \rightarrow \omega + i0^1$). Тогда получим

$$\int_0^\infty G(t, \mathbf{r}) e^{i(\omega t - \mathbf{p}\mathbf{r})} d^3x dt = \frac{(2\pi)^3}{2} \sum_m |\langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2 \frac{\delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega + \omega_{0m} + i0}.$$

¹⁾ Эта процедура аналогична способу вычисления функций Грина в квантовой электродинамике (ср. IV, § 75).

Аналогичным образом вычисляется интеграл по dt от $-\infty$ до 0. При $t < 0$ вместо (8.5) имеем

$$G(t, \mathbf{r}) = \frac{i}{2} \sum_m |\langle m | \hat{\psi}_\alpha(0) | 0 \rangle|^2 e^{i(\omega_{m0}t - \mathbf{P}_m \mathbf{r})}, \quad (8.6)$$

где $\omega_{m0} = E_m(N-1) - E_0(N) + \mu$. Вычислив теперь интеграл от $-\infty$ до 0 и сложив оба интеграла, получим

$$G(\omega, \mathbf{p}) = \frac{(2\pi)^3}{2} \sum_m \left\{ \frac{A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega + \mu + E_0(N) - E_m(N+1) + i0} + \frac{B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)}{\omega + \mu + E_m(N-1) - E_0(N) - i0} \right\}, \quad (8.7)$$

где обозначено

$$A_m = |\langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2, \quad B_m = |\langle m | \hat{\psi}_\alpha(0) | 0 \rangle|^2. \quad (8.8)$$

Это и есть искомое разложение¹⁾.

Введем обозначения

$$\varepsilon_m^{(+)} = E_m(N+1) - E_0(N), \quad \varepsilon_m^{(-)} = E_0(N) - E_m(N-1) \quad (8.9)$$

для энергий возбуждения, определенных по разностям между возбужденным уровнем системы с определенным числом частиц и основным уровнем системы, содержащей на одну частицу больше или меньше. Индексы $(+)$ и $(-)$ указывают, что эти энергии

$$\varepsilon_m^{(+)} > \mu, \quad \varepsilon_m^{(-)} < \mu. \quad (8.10)$$

Действительно, заметив, что $E_0(N+1) - E_0(N) \approx \partial E_0 / \partial N = \mu$ — химический потенциал при $T = 0$, получим, например,

$$\begin{aligned} \varepsilon_m^{(+)} &= E_m(N+1) - E_0(N+1) + E_0(N+1) - E_0(N) \approx \\ &\approx [E_m(N+1) - E_0(N+1)] + \mu. \end{aligned}$$

Но разность в квадратных скобках (где обе энергии относятся к системам с одинаковым числом частиц) положительна по определению основного состояния, откуда и следует, что $\varepsilon_m^{(+)} > \mu$. К смыслу определения (8.9) мы еще вернемся ниже.

¹⁾ Аналогичное разложение в квантовой теории поля называют формулой Челлена–Лемана (см. IV, § 104,111).

Сдвиг полюсов членов суммы (как функций ω), выражаемый слагаемыми $\pm i0$ в их знаменателях, эквивалентен появлению δ -функциональных мнимых частей согласно правилу¹⁾

$$\frac{1}{x \pm i0} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x). \quad (8.11)$$

Применив его к (8.7), найдем вещественную часть гриновской функции

$$\operatorname{Re} G(\omega, \mathbf{p}) = 4\pi^3 \sum_m P \left[\frac{A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega + \mu - \varepsilon_m^{(+)}} + \frac{B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)}{\omega + \mu - \varepsilon_m^{(-)}} \right] \quad (8.12)$$

и ее мнимую часть (здесь надо учесть, что все разности $\varepsilon_m^{(+)} - \mu > 0$, а все разности $\varepsilon_m^{(-)} - \mu < 0$):

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} G(\omega, \mathbf{p}) &= \\ &= \begin{cases} -4\pi^4 \sum_m A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m) \delta(\omega + \mu - \varepsilon_m^{(+)}) & \text{при } \omega > 0, \\ 4\pi^4 \sum_m B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m) \delta(\omega + \mu - \varepsilon_m^{(-)}) & \text{при } \omega < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (8.13)$$

Отсюда видно, что всегда

$$\operatorname{sign} \operatorname{Im} G(\omega, \mathbf{p}) = -\operatorname{sign} \omega. \quad (8.14)$$

Отметим также асимптотическое поведение функции $G(\omega, \mathbf{p})$ при $\omega \rightarrow \infty$. Из (8.7) имеем

$$G(\omega, \mathbf{p}) \approx \frac{4\pi^3}{\omega} \sum_m [A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m) + B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)].$$

Коэффициент при $1/\omega$ равен, как легко убедиться, компоненте

¹⁾ См. III, (43.10). Знак P означает, что при интегрировании выражений вида $f(x)/(x \pm i0)$ интеграл должен пониматься в смысле главного значения

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x \pm i0} dx = \oint_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x} dx \mp i\pi f(0).$$

Второй член возникает от обхода полюса $x = -i0$ (или $x = i0$) по полуокружности сверху (или снизу).

Фурье по $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ от

$$\frac{1}{2}\{\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}_1)\hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}_2) + \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}_2)\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}_1)\} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

т. е. единице. Таким образом,

$$G(\omega, \mathbf{p}) \rightarrow 1/\omega \text{ при } |\omega| \rightarrow \infty. \quad (8.15)$$

Главное свойство функции Грина в импульсном представлении состоит в том, что ее полюсы могут лежать только в точках $\omega = \varepsilon_m - \mu$, где ε_m — определенные указанным выше образом дискретные энергии возбуждения системы. Каждая из этих энергий отвечает определенному значению импульса системы $\mathbf{P}_m$, о чем свидетельствует наличие соответствующей δ -функции в каждом полюсном члене функции Грина.

Нас, однако, интересует здесь функция Грина макроскопического тела. Это значит, что рассматривается предел, когда объем V и число частиц N стремятся к бесконечности (при заданном конечном значении отношения N/V). В этом пределе расстояния между уровнями системы стремятся к нулю, полюсы функции $G(\omega, \mathbf{p})$ сливаются и можно утверждать лишь, что эта функция имеет мнимую часть при значениях $\omega + \mu$ в непрерывной области возможных значений энергии возбуждения системы. Исключение составляют, однако, возбуждения, в которых весь импульс $\mathbf{p}$ макроскопической системы может быть приписан всего одной квазичастице с определенным законом дисперсии $\varepsilon(\mathbf{p})$ (напомним, что в основном состоянии системы $\mathbf{p} = 0$); таким значениям отвечают изолированные полюсы функции Грина.

Если же импульс $\mathbf{p}$ складывается из импульсов нескольких квазичастиц, то энергия системы уже не определяется однозначно значением $\mathbf{p}$: заданный импульс системы может складываться различным образом из импульсов квазичастиц, сумма энергий которых пробегает при этом непрерывный ряд значений; интегрирование по всем таким состояниям устраняет полюс.

Таким образом, уравнением

$$G^{-1}(\varepsilon - \mu, \mathbf{p}) = 0 \quad (8.16)$$

определяется закон дисперсии квазичастиц (*В. Л. Бонч-Бруевич, 1955*).

Подчеркнем, что способ определения энергии возбуждения, согласно (8.9), как раз соответствует определению энергии квазичастиц в теории Ландау. Действительно, разность $\varepsilon_m^{(+)}$ есть изменение энергии системы при добавлении к ней одной частицы; приписав все это изменение одной квазичастице, мы определяем

ε в соответствии с (1.3). Аналогичным образом, $-\varepsilon_m^{(-)}$ есть изменение энергии при удалении одной частицы, так что $\varepsilon_m^{(-)}$ есть энергия удаленной квазичастицы. Естественно поэтому, что $\varepsilon_m^{(-)} < \mu$, так как в теории Ландау квазичастица может быть удалена только изнутри ферми-сферы¹⁾.

Поскольку все фигурирующие в разложении (8.7) возбужденные состояния получаются из основного состояния добавлением или удалением одной частицы (со спином $1/2$), то ясно, что для системы фермионов полюсы функции Грина определяют лишь спектр элементарных возбуждений фермиевского типа. Как определяется бозевская ветвь, будет показано ниже, в § 18.

Описание спектра макроскопической системы с помощью понятия о квазичастицах с определенной зависимостью ε от $\mathbf{p}$ — приближенное описание, точность которого падает с увеличением $|\varepsilon - \mu|$. Отклонение от картины независимых квазичастиц проявляется в сдвиге полюса функции Грина в комплексную область: энергия $\varepsilon(\mathbf{p})$ становится комплексной. Согласно общим правилам квантовой механики (см. III, § 134), комплексность уровней энергии означает конечность времени жизни τ возбужденного состояния системы ($\tau \sim 1/|\text{Im } \varepsilon|$). Сама же величина $\text{Im } \varepsilon$ характеризует степень «размазанности» значений энергии квазичастицы (ширина уровня). Разумеется, такая трактовка имеет смысл лишь при условии достаточной малости мнимой части: $|\text{Im } \varepsilon| \ll |\varepsilon - \mu|$. Как было объяснено в § 1, это условие действительно выполняется для слабо возбужденных состояний системы, поскольку $|\text{Im } \varepsilon| \sim 1/\tau \propto (p - p_F)^2$, в то время как $\text{Re } (\varepsilon - \mu) \propto |p - p_F|$.

Необходимый знак $\text{Im } \varepsilon$ обеспечивается определенностью знака мнимой части функции Грина. Действительно, вблизи своего полюса эта функция имеет вид

$$G(\omega, \mathbf{p}) \approx \frac{Z}{\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{p})}, \quad (8.17)$$

причем постоянная $Z > 0$, как это следует из положительности коэффициентов A_m , B_m в разложении (8.7); величину Z часто называют (по аналогии с квантовой электродинамикой) *перенормировочной постоянной*. Мнимая часть функции Грина

$$\text{Im } G \approx \frac{Z \text{Im } \varepsilon}{|\omega + \mu - \varepsilon|^2}.$$

¹⁾ Обратим внимание на то, что в определение энергии квазичастиц $\varepsilon_m^{(-)}$ возбужденный уровень системы E_m входит со знаком минус. С этим связан и тот факт, что импульс этих квазичастиц $\mathbf{p} = -\mathbf{P}_m$, как видно из δ -функции $\delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)$ в соответствующих членах разложения (8.7).

Заметив, что это выражение относится к значениям $\omega \approx \varepsilon - \mu$ и сравнив его знак с правилом (8.14), найдем, что

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \varepsilon < 0 & \quad \text{при} \quad \operatorname{Re} \varepsilon > \mu, \\ \operatorname{Im} \varepsilon > 0 & \quad \text{при} \quad \operatorname{Re} \varepsilon < \mu, \end{aligned} \quad (8.18)$$

как и должно быть: такой знак $\operatorname{Im} \varepsilon$ в обоих случаях ($\varepsilon_m^{(+)}$ и $\varepsilon_m^{(-)}$ в (8.9)) соответствует правильной отрицательной мнимой добавке к энергии возбужденного состояния E_m .

К аналитическим свойствам гриновской функции мы вернемся в § 36, где этот вопрос будет рассмотрен сразу для общего случая произвольных температур.

§ 9. Функция Грина идеального ферми-газа

Для иллюстрации рассмотренных в предыдущем параграфе общих соотношений вычислим функцию Грина идеального газа.

Шредингеровские ψ -операторы всегда можно представить в виде разложения

$$\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \hat{a}_{\mathbf{p}\sigma} \psi_{\mathbf{p}\alpha}(\mathbf{r}, \sigma) \quad (9.1)$$

по полному набору функций $\psi_{\mathbf{p}\alpha}(\mathbf{r}, \sigma)$ — спинорных волновых функций свободной частицы с импульсом $\mathbf{p}$ и проекцией спина σ , т. е. по плоским волнам

$$\psi_{\mathbf{p}\alpha} = \frac{u_\alpha(\sigma)}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (9.2)$$

(u_α — спинорная амплитуда, нормированная условием $u_\alpha u_\alpha^* = 1$); такой выбор функций $\psi_{\mathbf{p}\alpha}$ не имеет отношения к реальному взаимодействию частиц в системе.

Но для системы невзаимодействующих частиц может быть записан в явном виде также и гейзенберговский ψ -оператор. В этом случае переход от шредингеровского к гейзенберговскому представлению сводится к введению в каждый член суммы в (9.1) соответствующего временного множителя

$$\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \hat{a}_{\mathbf{p}\sigma} \psi_{\mathbf{p}\alpha}(\mathbf{r}, \sigma) \exp \left[-i \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right) t \right]. \quad (9.3)$$

В этом легко убедиться, заметив, что матричные элементы гейзенберговского оператора для всякого перехода $i \rightarrow f$ должны

содержать множители $\exp[-i(E'_i - E'_f)t]$, где E'_i, E'_f — энергии начального и конечного состояний (в данном случае это — собственные значения гамильтониана $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$). Для перехода с уменьшением числа частиц в состоянии $\mathbf{p}\alpha$ на 1 разность $E'_i - E'_f = p^2/2m - \mu$, так что указанное требование выполнено.

Однако вместо прямого вычисления функции Грина с помощью (9.3) по определению (7.10), удобнее свести сначала это определение к эквивалентному ему дифференциальному уравнению. Для этого продифференцируем функцию $G_{\alpha\beta}(X_1 - X_2)$ по t_1 . При этом надо учесть, что в точке $t_1 = t_2$ эта функция разрывна. Действительно, согласно определению (7.10), скачок функции

$$[G_{\alpha\beta}] \equiv G_{\alpha\beta}|_{t_1=t_2+0} - G_{\alpha\beta}|_{t_1=t_2-0} = \\ = -i\langle \hat{\Psi}_\alpha(t_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_\beta^+(t_1, \mathbf{r}_2) + \hat{\Psi}_\beta^+(t_1, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_\alpha(t_1, \mathbf{r}_1) \rangle$$

или в силу (7.3)¹⁾

$$[G_{\alpha\beta}] = -i\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (9.4)$$

Наличие скачка приводит при дифференцировании к появлению члена $[G_{\alpha\beta}]\delta(t_1 - t_2)$. Поэтому

$$\frac{\partial}{\partial t_1} G_{\alpha\beta} = -i \left\langle T \frac{\partial \hat{\Psi}_\alpha(X_1)}{\partial t_1} \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \right\rangle - i\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\delta(t_1 - t_2). \quad (9.5)$$

Для системы свободных частиц гейзенберговский ψ -оператор удовлетворяет уравнению

$$i \frac{\partial \hat{\Psi}_\alpha}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \Delta \hat{\Psi}_\alpha - \mu \hat{\Psi}_\alpha$$

(ср. с (7.8)). Подставив эту производную в (9.5) и снова воспользовавшись определением (7.10), получим уравнение для функции Грина

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2m} + \mu \right) G^{(0)}(t, \mathbf{r}) = \delta(t) \delta(\mathbf{r}), \quad (9.6)$$

¹⁾ Подчеркнем, что величина этого скачка вообще не зависит от взаимодействия частиц!

где уже положено $G_{\alpha\beta}^{(0)} = \delta_{\alpha\beta} G^{(0)}$, а индекс (0) у G указывает на отсутствие взаимодействия между частицами.

Преобразуем это уравнение по Фурье:

$$\left(\omega - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu\right) G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = 1.$$

Определяя отсюда гриновскую функцию, надо добавить к ω бесконечно малую мнимую часть таким образом, чтобы мнимая часть G имела правильный знак (в соответствии с (8.14)):

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = \left[\omega - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu + i0 \cdot \text{sign } \omega\right]^{-1}. \quad (9.7)$$

Полус этого выражения лежит при $\omega + \mu = \varepsilon(\mathbf{p}) = p^2/2m$ в соответствии с тем, что в идеальном газе квазичастицы совпадают с реальными частицами. Химический потенциал идеального ферми-газа $\mu = p_F^2/2m$. Для слабо возбужденных состояний p близко к p_F , так что можно заменить $p^2/2m \approx \mu + v_F(p - p_F)$ (где $v_F = p_F/m$) и для таких состояний переписать функцию Грина в виде

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = [\omega - v_F(p - p_F) + i0 \cdot \text{sign } \omega]^{-1}. \quad (9.8)$$

При всяких интегрированиях с участием функции $G^{(0)}$ наличие бесконечно малой мнимой части в ее знаменателе существенно только вблизи полюса, когда $\omega \approx v_F(p - p_F)$. В этом смысле $\text{sign } \omega$ в (9.7) можно заменить на $\text{sign } (p - p_F)$ и написать $G^{(0)}$ в виде

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = \left[\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu + i0 \cdot \text{sign } (p - p_F)\right]^{-1}. \quad (9.9)$$

Такая замена существенна в том отношении, что в виде (9.9) $G^{(0)}$ оказывается единой аналитической во всей плоскости функцией комплексной переменной ω и для вычисления интегралов можно пользоваться методами теории аналитических функций.

Так, для вычисления интеграла (7.23) (распределение частиц по импульсам) при отличном от нуля отрицательном t замыкаем путь интегрирования (вещественная ось ω) бесконечно удаленной полуокружностью в верхней полуплоскости (после этого можно положить $t = 0$). Интеграл

$$N(\mathbf{p}) = -\frac{i}{2\pi} \int \frac{d\omega}{\omega - p^2/2m + \mu + i0 \cdot \text{sign } (p - p_F)}$$

определяется теперь вычетом подынтегрального выражения в полюсе, находящемся в верхней полуплоскости. При $p > p_F$ такой полюс отсутствует, так что $N(\mathbf{p}) = 0$. Если же $p < p_F$, то находим $N(\mathbf{p}) = 1$ — как и должно было быть для основного состояния идеального ферми-газа.

§ 10. Распределение частиц ферми-жидкости по импульсам

Гриновская функция ферми-жидкости не может быть, конечно, вычислена в общем виде, как это было сделано для ферми-газа. Но утверждение о том, что ферми-жидкость обладает спектром описанного в § 1 типа означает, что ее функция Грина имеет полюс при

$$\omega = \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu \approx v_F(p - p_F), \quad v_F = p_F/m^*. \quad (10.1)$$

Другими словами, она может быть представлена в виде

$$G(\omega, \mathbf{p}) = \frac{Z}{\omega - v_F(p - p_F) + i0 \cdot \text{sign } \omega} + g(\omega, \mathbf{p}), \quad (10.2)$$

где $g(\omega, \mathbf{p})$ — функция, конечная в точке (10.1). Как уже было отмечено в связи с (8.17), коэффициент Z (вычет функции G в полюсе) положителен.

Из выражения (10.2) можно сделать интересное заключение о характере распределения частиц жидкости (не квазичастиц!) по импульсам. Именно, вычислим разность значений функции распределения $N(\mathbf{p})$ (фактически зависящей лишь от абсолютной величины p) по обе стороны поверхности ферми-сферы, т. е. предел разности

$$N(p_F - q) - N(p_F + q)$$

при $q \rightarrow 0$.

Распределение $N(\mathbf{p})$ выражается через функцию Грина интегралом (7.23). Ввиду конечности функции $g(\omega, \mathbf{p})$ заранее очевидно, что разность интегралов от нее будет стремиться при $q \rightarrow 0$ к нулю. Поэтому достаточно рассмотреть лишь разность интегралов от полюсных членов в (10.2). Поскольку при интегрировании член $i0$ в знаменателе существен только вблизи полюса, можно (как уже было указано в § 9) писать $\text{sign}(p - p_F)$ вместо $\text{sign } \omega$. Тогда имеем

$$N(p_F - q) - N(p_F + q) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{Z}{\omega + v_F q - i0} - \frac{Z}{\omega - v_F q + i0} \right\} \frac{d\omega}{2\pi}$$

(ввиду сходимости этого интеграла от разности, множитель $e^{-i\omega t}$ с $t = -0$ в нем можно опустить). Замыкая теперь путь интегрирования бесконечно удаленной полуокружностью (все равно в которой из полуплоскостей), найдем, что весь интеграл равен Z и не зависит от q . Таким образом, имеем

$$N(p_F - 0) - N(p_F + 0) = Z \quad (10.3)$$

(А. Б. Мигдал, 1957).

Выше было указано, что $Z > 0$. Поскольку $N(\mathbf{p}) \leq 1$, то из (10.3) следует, что

$$0 < Z \leq 1 \quad (10.4)$$

(причем значение $Z = 1$ достигается лишь в предельном случае идеально-го газа).

Таким образом, распределение частиц по импульсам в ферми-жидкости при $T = 0$ имеет, как и в газе, скачок на поверхности ферми-сферы, уменьшаясь в направлении изнутри сферы наружу. В отличие от случая газа, величина скачка, однако, меньше единицы, и функция $N(\mathbf{p})$ остается отличной от нуля также и при $p > p_F$, как это показано на рис. 1 сплошной кривой (штриховая линия отвечает газу).

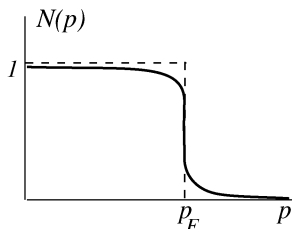


Рис. 1.

§ 11. Вычисление термодинамических величин по функции Грина

Знание гриновской функции системы достаточно для описания ее термодинамических свойств. При $T = 0$ эти свойства выражаются зависимостью энергии системы (совпадающей с энергией основного состояния E_0) от плотности N/V .

После того как решением уравнения (8.16) определен закон дисперсии квазичастиц $\varepsilon(p)$, эту зависимость можно найти, воспользовавшись тем, что

$$\varepsilon(p_F) = \mu. \quad (11.1)$$

Поскольку зависимость p_F от N/V известна, согласно (1.1),

$$p_F = (3\pi^2)^{1/3} (N/V)^{1/3}, \quad (11.2)$$

равенство (11.1) определяет функцию $\mu(N/V)$ (хотя и в неявном виде, так как и закон дисперсии $\varepsilon(p)$ содержит, вообще говоря, μ как параметр). При $T = 0$ (а потому и $S = 0$) химический потенциал $\mu = (\partial E_0 / \partial N)_V$; интегрируя это равенство, найдем искомую энергию

$$E_0 = \int_0^N \mu \left(\frac{N}{V} \right) dN \quad (11.3)$$

(при $N = 0$, разумеется, и $E_0 = 0$).

Другой способ описания термодинамических свойств при $T=0$ состоит в вычислении термодинамического потенциала Ω . Согласно общему определению (см. V, § 24), этот потенциал $\Omega = E - TS - \mu N = -PV$ и его дифференциал $d\Omega = -S dT - N d\mu$; при $T = 0$ имеем также и $S = 0$, и эти выражения сводятся к

$$\Omega = E - \mu N, \quad (11.4)$$

$$d\Omega = -N d\mu. \quad (11.5)$$

Напомним также, что по смыслу потенциала Ω он описывает свойства системы при $V = \text{const}$.

Простейший способ выразить Ω через функцию Грина состоит в использовании связи (7.24) N/V с G . Подставив N из (7.24) в (11.5) и интегрируя по $d\mu$ (при $V = \text{const}$), получим

$$\Omega(\mu) = 2iV \int_0^\mu d\mu \cdot \lim_{t \rightarrow -0} \int G(\omega, \mathbf{p}) e^{-i\omega t} \frac{d^3 p d\omega}{(2\pi)^4}, \quad (11.6)$$

поскольку, опять-таки, $\Omega = 0$ при $\mu = 0$.

§ 12. Ψ -операторы в представлении взаимодействия

Гриновскую функцию системы взаимодействующих частиц нельзя, разумеется, вычислить в общем виде. Существует, однако, математическая техника (подобная диаграммной технике квантовой теории поля), позволяющая вычислять ее в виде ряда по степеням энергии взаимодействия частиц. При этом каждый член ряда выражается через функции Грина системы свободных частиц и оператор взаимодействия.

Введем, наряду с гейзенберговским, еще и другое представление операторов — представление, в котором их зависимость от времени определяется не истинным гамильтонианом системы

$$\hat{H}' = \hat{H}'^{(0)} + \hat{V} = \hat{H}^{(0)} - \mu \hat{N} + \hat{V}$$

($\hat{V}$ — оператор взаимодействия), а гамильтонианом свободных частиц $\hat{H}'^{(0)}$:

$$\hat{\Psi}_0(t, \mathbf{r}) = \exp(i\hat{H}'^{(0)}t) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \exp(-i\hat{H}'^{(0)}t). \quad (12.1)$$

Операторы и волновые функции в этом представлении (так называемое *представление взаимодействия*) будем отличать индексом 0. Выразив функцию Грина через операторы $\hat{\Psi}_0$ (вместо гейзенберговских $\hat{\Psi}$), мы тем самым сделаем первый шаг к достижению поставленной цели — выражению G через $G^{(0)}$ и $\hat{V}$.

Обозначим в этом параграфе буквой Φ (или φ) волновые функции в «пространстве чисел заполнения» (в отличие от координатных волновых функций Ψ или ψ); на эти функции действуют вторично-квантованные операторы. Пусть φ — такая функция в шредингеровском представлении; ее зависимость от времени определяется волновым уравнением

$$i\frac{\partial \varphi}{\partial t} = (\hat{H}'^{(0)} + \hat{V})\varphi. \quad (12.2)$$

В гейзенберговском представлении, где вся временная зависимость перенесена на операторы, волновая функция системы Φ вообще не зависит от времени: $\Phi = \text{const}$. В представлении же взаимодействия волновая функция Φ_0 зависит от времени, но эта зависимость связана только со взаимодействием частиц в системе и определяется уравнением

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Phi_0(t) = \hat{V}_0(t)\Phi_0(t), \quad (12.3)$$

где

$$\hat{V}_0 = \exp(i\hat{H}'^{(0)}t) \hat{V} \exp(-i\hat{H}'^{(0)}t) \quad (12.4)$$

— оператор взаимодействия в том же представлении (в операторах вида (7.6), (7.7) переход к этому представлению сводится просто к замене $\hat{\Psi}$ на $\hat{\Psi}_0$). Уравнение (12.3) легко получить, заметив, что преобразованию операторов, согласно (12.1), отвечает

преобразование волновых функций согласно

$$\Phi_0 = \exp(i\hat{H}'^{(0)}t)\varphi \quad (12.5)$$

(см. III, § 12). Дифференцируя это выражение с учетом (12.2), получим (12.3)¹⁾.

В силу (12.3) значения $\Phi_0(t)$ в два бесконечно близких момента времени связаны друг с другом равенством

$$\Phi_0(t + \delta t) = [1 - i\delta t \cdot \hat{V}_0(t)] \Phi_0(t) = \exp\{-i\delta t \cdot \hat{V}_0(t)\} \Phi_0(t).$$

Соответственно значение Φ_0 в произвольный момент t может быть выражено через значение в некоторый начальный момент t_0 ($t_0 < t$) как

$$\Phi_0(t) = \hat{S}(t, t_0)\Phi_0(t_0), \quad (12.6)$$

где

$$\hat{S}(t, t_0) = \prod_{t_i=t_0}^t \exp\{-i\delta t \cdot \hat{V}_0(t_i)\}, \quad (12.7)$$

причем сомножители в этом произведении расположены, очевидно, справа налево в порядке возрастания времени t_i ; подразумевается предел произведения по всем бесконечно малым интервалам δt между t_0 и t . Если бы $V_0(t)$ было обычной функцией, то этот предел сводился бы просто к

$$\exp\left\{-i\int_{t_0}^t V_0(t) dt\right\}.$$

Но такое сведение основано на коммутативности множителей, взятых в различные моменты времени, подразумевающейся при переходе от произведения в (12.7) к суммированию в показателе. Для оператора $\hat{V}_0(t)$ такой коммутативности нет и сведение к обычному интегралу невозможно. Вместо этого можно записать (12.7) в символическом виде

$$\hat{S}(t, t_0) = T \exp\left\{-i\int_{t_0}^t \hat{V}_0(t) dt\right\}, \quad (12.8)$$

где T — символ хронологического расположения множителей в той же последовательности, что и в (12.7), т. е. справа налево от меньших времен к большим.

¹⁾ Уравнение (12.3) совпадает с уравнением (72.5) (см. IV), и следующий ниже процесс его решения повторяет изложение в IV, § 72.

Оператор $\hat{S}$ унитарен ($\hat{S}^{-1} = \hat{S}^+$) и обладает очевидными свойствами:

$$\begin{aligned}\hat{S}(t_3, t_2)\hat{S}(t_2, t_1) &= \hat{S}(t_3, t_1), \\ \hat{S}^{-1}(t_2, t_1)\hat{S}^{-1}(t_3, t_2) &= \hat{S}^{-1}(t_3, t_1).\end{aligned}\quad (12.9)$$

Для упрощения дальнейших рассуждений сделаем формальное предположение (не отражающееся на окончательных результатах), что взаимодействие $\hat{V}_0(t)$ адиабатически «включается» от $t = -\infty$ к конечным временам и адиабатически «выключается» при $t = +\infty$. Тогда при $t \rightarrow -\infty$, до включения взаимодействия, волновая функция $\Phi_0(t)$ совпадает с гейзенберговской функцией Φ . Положив в (12.6) $t_0 = -\infty$, получим

$$\Phi_0(t) = \hat{S}(t, -\infty)\Phi. \quad (12.10)$$

Установив, таким образом, связь между волновыми функциями в обоих представлениях, мы устанавливаем тем самым и закон преобразования операторов, в том числе ψ -операторов:

$$\hat{\Psi} = \hat{S}^{-1}(t, -\infty)\hat{\Psi}_0\hat{S}(t, -\infty). \quad (12.11)$$

В силу унитарности $\hat{S}$ по такому же закону преобразуются и операторы $\hat{\Psi}^+$.

Выразим теперь функцию Грина через ψ -операторы в представлении взаимодействия¹⁾. Пусть $t_1 > t_2$; тогда

$$\begin{aligned}G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) &= -i\langle \hat{\Psi}_\alpha(t_1)\hat{\Psi}_\beta^+(t_2) \rangle = \\ &= -i\langle \hat{S}^{-1}(t_1, -\infty)\hat{\Psi}_{0\alpha}(t_1)\hat{S}(t_1, -\infty)\hat{S}^{-1}(t_2, -\infty) \times \\ &\quad \times \hat{\Psi}_{0\beta}^+(t_2)\hat{S}(t_2, -\infty) \rangle.\end{aligned}$$

Согласно (12.9) имеем

$$\begin{aligned}\hat{S}(t_1, -\infty)\hat{S}^{-1}(t_2, -\infty) &= \\ &= \hat{S}(t_1, t_2)\hat{S}(t_2, -\infty)\hat{S}^{-1}(t_2, -\infty) = \hat{S}(t_1, t_2), \\ \hat{S}^{-1}(t_1, -\infty) &= \hat{S}^{-1}(t_1, -\infty)\hat{S}^{-1}(\infty, t_1)\hat{S}(\infty, t_1) = \\ &= \hat{S}^{-1}(\infty, -\infty)\hat{S}(\infty, t_1)\end{aligned}$$

¹⁾ Этот вывод повторяет рассуждения в IV, § 103.

Подставляя в предыдущее выражение, получим

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \\ = -i\langle \hat{S}^{-1}(\infty, -\infty) \hat{S}(\infty, t_1) \hat{\Psi}_{0\alpha}(t_1) \hat{S}(t_1, t_2) \hat{\Psi}_{0\beta}^+(t_2) \hat{S}(t_2, -\infty) \rangle.$$

Понимая операторы $\hat{S}$ как произведения (12.7), мы видим, что все множители в усредняемом выражении, начиная со второго, расположены в хронологическом порядке справа налево от $t = -\infty$ до $t = \infty$. Поэтому можно написать

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = -i\langle \hat{S}^{-1} T[\hat{\Psi}_{0\alpha}(t_1)] \hat{\Psi}_{0\beta}^+(t_2) \hat{S} \rangle, \quad (12.12)$$

где обозначено

$$\hat{S} = \hat{S}(\infty, -\infty) = T \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{\infty} \hat{V}_0(t) dt \right\}. \quad (12.13)$$

Вычисления при $t_1 < t_2$ отличаются от произведенных лишь обозначениями, и окончательный результат (12.12), (12.13) справедлив при любых t_1, t_2 .

Произведенное преобразование не зависит от того, по какому состоянию системы подразумевается усреднение. Но если усреднение производится по основному состоянию (как в (12.12)), то преобразование может быть продвинуто еще и дальше. Для этого заметим, что адиабатическое включение или выключение взаимодействия, как всякое адиабатическое возмущение, не может вызвать перехода с изменением энергии квантовой системы (см. III, § 41). Поэтому система, находившаяся в невырожденном состоянии (каковым и является основное состояние), в этом состоянии и остается. Другими словами, действие оператора $\hat{S}$ на волновую функцию $\Phi = \Phi_0(-\infty)$ должно сводиться к умножению на (несущественный для состояния) фазовый множитель — среднее значение $\hat{S}$ в основном состоянии: $\hat{S}\Phi = \langle \hat{S} \rangle \Phi$. Точно так же $\Phi^* \hat{S}^{-1} = \langle \hat{S} \rangle^{-1} \Phi^*$. Таким образом, окончательно получаем следующую формулу для функции Грина, выраженной через операторы в представлении взаимодействия¹⁾:

$$iG_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \frac{1}{\langle \hat{S} \rangle} \langle T[\hat{\Psi}_{0\alpha}(X_1) \hat{\Psi}_{0\beta}^+(X_2) \hat{S}] \rangle. \quad (12.14)$$

¹⁾ Отметим некоторую условность обозначений в (12.14): хотя символ T в нем фигурирует дважды (в явном виде и в определении $\hat{S}$), в действительности же все множители в произведении должны расставляться в единой хронологической последовательности.

По смыслу этого представления усреднение в (12.14) производится по основному состоянию системы свободных частиц. Действительно, свойства операторов $\hat{\Psi}_0$ совпадают со свойствами гейзенберговских операторов $\hat{\Psi}$ в отсутствие взаимодействий, а гейзенберговская волновая функция Φ от времени не зависит, так что совпадает со своим значением при $t = -\infty$, когда взаимодействие отсутствует. Поэтому, в частности,

$$\langle T\hat{\Psi}_{0\alpha}(X_1)\hat{\Psi}_{0\beta}^+(X_2) \rangle = iG_{\alpha\beta}^{(0)}(X_1, X_2) \quad (12.15)$$

есть функция Грина системы невзаимодействующих частиц.

§ 13. Диаграммная техника для ферми-систем

Смысл символических выражений типа (12.14) состоит в том, что они дают возможность легко написать последовательные члены разложений по степеням $\hat{V}$. Так,

$$\begin{aligned} \langle T\hat{\Psi}_{0\alpha}(X)\hat{\Psi}_{0\beta}^+(X')\hat{S} \rangle = \\ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \langle T\hat{\Psi}_{0\alpha}(X)\hat{\Psi}_{0\beta}^+(X')\hat{V}_0(t_1)\dots\hat{V}_0(t_n) \rangle, \end{aligned} \quad (13.1)$$

а выражение для $\langle \hat{S} \rangle$ отличается от написанного лишь отсутствием множителей $\hat{\Psi}_{0\alpha}\hat{\Psi}_{0\beta}^+$ под знаком T -произведения. Как уже было указано, оператор $\hat{V}_0(t)$ в представлении взаимодействия получается из (7.7) заменой всех $\hat{\Psi}$ на $\hat{\Psi}_0$. Вычисление последовательных членов разложения (13.1) сводится, следовательно, к вычислению средних по основному состоянию от T -произведения различного числа ψ -операторов свободных частиц.

Эти вычисления в значительной степени автоматизируются с помощью правил *диаграммной техники*, которые, однако, существенно зависят от характера исследуемой физической системы. Излагаемая в этом параграфе техника относится к несверхтекучим ферми-системам, причем взаимодействие частиц предполагается парным и не зависящим от спинов. Соответствующий оператор взаимодействия:

$$\begin{aligned} \hat{V}_0(t) = \\ = \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}_{0\gamma}^+(t, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_{0\delta}^+(t, \mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_{0\delta}(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_{0\gamma}(t, \mathbf{r}_1) d^3x_1 d^3x_2, \end{aligned} \quad (13.2)$$

где $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ — энергия взаимодействия двух частиц (индексы (2) у $\hat{V}$ и U опускаем).

Среднее значение произведений ψ -операторов вычисляется с помощью *теоремы Вика*, которая гласит¹⁾:

Среднее от произведения любого (четного) числа операторов $\hat{\Psi}$ и $\hat{\Psi}^+$ равно сумме произведений всех возможных попарных средних (сверток) этих операторов. В каждой паре операторы стоят в той же последовательности, что и в первоначальном произведении. Знак каждого члена в сумме определяется множителем $(-1)^P$, где P — число перестановок операторов, которые надо произвести, чтобы поставить рядом все усредняемые операторы.

Отличны от нуля лишь свертки, в которые входит один оператор $\hat{\Psi}$ и один $\hat{\Psi}^+$: в диагональном матричном элементе все частицы, уничтожаемые оператором $\hat{\Psi}$, должны быть вновь рождены оператором $\hat{\Psi}^+$. Ясно поэтому, что среднее от произведения нескольких ψ -операторов может быть отлично от нуля, только если в нем содержится одинаковое число операторов $\hat{\Psi}$ и $\hat{\Psi}^+$.

В применении к среднему от T -произведения теорема Вика позволяет выразить его через средние от попарных T -произведений, т. е., согласно (12.15), через гриновские функции свободных частиц. Сделаем это для поправки первого порядка в функции Грина системы взаимодействующих частиц.

Предварительно отметим, что при раскрытии по теореме Вика выражения в числителе формулы (12.14) возникают, в частности, члены вида

$$\langle T\hat{\Psi}_{0\alpha}(X_1)\hat{\Psi}_{0\beta}^+(X_2)\rangle\langle\hat{S}\rangle = iG_{\alpha\beta}^{(0)}(X_1, X_2)\langle\hat{S}\rangle, \quad (13.3)$$

в которых пара «внешних» (по отношению к $\hat{S}$) ψ -операторов сворачивается между собой; выражение же $\langle\hat{S}\rangle$ содержит (в каждом члене его разложения) лишь свертки «внутренних» операторов между собой. Множитель $\langle\hat{S}\rangle$ целиком сокращается со знаменателем в (12.14), и, таким образом, все эти члены дают просто «невозмущенную» гриновскую функцию $iG_{\alpha\beta}^{(0)}$.

Оставив в (13.1) два первых члена разложения, подставив (13.2) и переобозначив переменные, получим

$$iG_{\alpha\beta}(X_1, X_2) \approx iG_{\alpha\beta}^{(0)} + iG_{\alpha\beta}^{(1)},$$

¹⁾ Чтобы не разбивать изложения, доказательство этой теоремы отложим на конец параграфа.

где

$$iG_{\alpha\beta}^{(1)} = -\frac{i}{2} \langle T \hat{\Psi}_{0\alpha}(X_1) \hat{\Psi}_{0\beta}^+(X_2) \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3x_3 d^3x_4 \hat{\Psi}_{0\gamma}^+(t, \mathbf{r}_3) \hat{\Psi}_{0\delta}^+(t, \mathbf{r}_4) U(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4) \hat{\Psi}_{0\delta}(t, \mathbf{r}_4) \hat{\Psi}_{0\gamma}(t, \mathbf{r}_3) \rangle.$$

Для большей компактности записи формул введем обозначение

$$U(X_1 - X_2) = U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2). \quad (13.4)$$

Тогда ¹⁾

$$iG_{12}^{(1)} = -\frac{i}{2} \int \langle T \hat{\Psi}_2 \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi}_3^+ \hat{\Psi}_4^+ \hat{\Psi}_4 \hat{\Psi}_3 \rangle U_{34} d^4X_3 d^4X_4,$$

где $d^4X = dt d^3x$. Чтобы усреднить по теореме Вика, выпишем отдельно операторы и изобразим все нужные варианты свертки:

$$\langle \Psi_1 \Psi_2^+ \Psi_3^+ \Psi_4^+ \Psi_4 \Psi_3 \rangle \rightarrow \overbrace{\Psi_1 \Psi_2^+ \Psi_3^+ \Psi_4^+ \Psi_4 \Psi_3} + \overbrace{\Psi_1 \Psi_2^+ \Psi_3^+ \Psi_4^+ \Psi_4 \Psi_3} + \\ + \overbrace{\Psi_1 \Psi_2^+ \Psi_3^+ \Psi_4^+ \Psi_4 \Psi_3} + \overbrace{\Psi_1 \Psi_2^+ \Psi_3^+ \Psi_4^+ \Psi_4 \Psi_3}$$

Согласно сказанному выше опущены члены, содержащие свертку $\overbrace{\Psi_1 \Psi_2^+}$. Попарно сворачиваемые (соединенные дугами) операторы надо переставить к соседству друг с другом. Так, первый из написанных членов означает произведение

$$\langle T \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_3^+ \rangle \langle T \hat{\Psi}_2^+ \hat{\Psi}_4 \rangle \langle T \hat{\Psi}_4^+ \hat{\Psi}_3 \rangle,$$

а последний

$$-\langle T \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_4^+ \rangle \langle T \hat{\Psi}_2^+ \hat{\Psi}_4 \rangle \langle T \hat{\Psi}_3^+ \hat{\Psi}_3 \rangle.$$

Свертки произведений ψ -операторов различных аргументов заменяются согласно

$$\overbrace{\Psi_1 \Psi_3^+} = \langle T \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_3^+ \rangle = iG_{13}^0, \quad \overbrace{\Psi_2^+ \Psi_4} = -iG_{42}^0 \quad \text{и т. п.}$$

¹⁾ Здесь и ниже для упрощения записи особенно громоздких выражений условимся опускать индекс у $\hat{\Psi}_0$, а цифровыми индексами 1, 2, ... обозначать совокупность значений аргумента X и спинного индекса:

$$\hat{\Psi}_1 \equiv \hat{\Psi}_\alpha(X_1), \quad \hat{\Psi}_2 \equiv \hat{\Psi}_\beta(X_2), \dots \\ G_{12} \equiv G_{\alpha\beta}(X_1, X_2), \quad U_{12} \equiv U(X_1 - X_2).$$

Свертки же ψ -операторов одинаковых аргументов представляют собой пространственную плотность числа частиц в идеальном газе (обозначим ее через $n^{(0)}$), понимаемую как функцию химического потенциала¹⁾:

$$\langle \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} \rangle = n^{(0)}(\mu) = \frac{(2m\mu)^{3/2}}{3\pi^2}. \quad (13.5)$$

Таким образом, получим

$$iG_{12}^{(1)} = \frac{1}{2} \int d^4 X_3 d^4 X_4 \cdot U_{34} [-G_{13}^{(0)} G_{34}^{(0)} G_{42}^{(0)} - G_{14}^{(0)} G_{43}^{(0)} G_{32}^{(0)} + \\ + in^{(0)} G_{13}^{(0)} G_{32}^{(0)} + in^{(0)} G_{14}^{(0)} G_{42}^{(0)}].$$

Эти четыре члена попарно равны друг другу — они отличаются лишь обозначением переменных интегрирования X_3 и X_4 . В результате множитель $1/2$ исчезает и, таким образом, поправка первого порядка в функции Грина содержит всего два члена:

$$iG_{12}^{(1)} = \int U_{34} [in^{(0)} G_{14}^{(0)} G_{42}^{(0)} - G_{13}^{(0)} G_{34}^{(0)} G_{42}^{(0)}] d^4 X_3 d^4 X_4. \quad (13.6)$$

Структуру этих членов удобно изобразить графически с помощью следующих *диаграмм Фейнмана*:

$$1 \quad 4 \quad 2 \quad 1 \quad 3 \quad 4 \quad 2 \quad (13.7)$$

На этих диаграммах сплошная линия $4 \leftarrow 2$ означает свертку $\widehat{\Psi}_4 \Psi_2^+$ (т. е. функцию $iG_{42}^{(0)}$); цифры указывают номера переменных X_4 и X_2 , от которых зависят свертываемые операторы, а направление стрелки отвечает направлению от $\hat{\Psi}^+$ к $\hat{\Psi}$ в свертке.

Свертка $\widehat{\Psi}^+ \hat{\Psi}$ двух операторов, зависящих от одних и тех же переменных (т. е. плотность $n^{(0)}$), изображается соответственно петлей — сплошной линией, «замкнутой на себя». Штриховая линия 34 означает множитель U_{34} .

По всем переменным, обозначенным у внутренних точек диаграммы (точки пересечения линий), подразумевается

¹⁾ Такие свертки всегда происходят от ψ -операторов, входящих в состав одного и того же оператора взаимодействия V . Поэтому в таких членах $\hat{\Psi}^+$ всегда стоит слева от $\hat{\Psi}$.

интегрирование. Переменные (X_1 и X_2), обозначенные у «внешних концов» диаграммы, остаются свободными.

Члены первого порядка, происходящие из (13.3), изобразились бы диаграммами, распадающимися на две отдельные части — прямой отрезок ($iG_{\alpha\beta}^{(0)}$) и фигуру с замкнутыми петлями сплошных линий, например,



Вдумавшись в способ свертывания операторов и структуру соответствующих диаграмм, можно понять происхождение общего правила: во всех порядках теории возмущений роль множителя $\langle S \rangle^{-1}$ в (12.14) сводится к тому, что должны учитываться лишь «связные» диаграммы с двумя внешними концами, не содержащие «отсоединенных» петель без внешних концов, не связанных с другими частями диаграммы ни сплошными, ни штриховыми линиями (ср. аналогичную ситуацию в квантовой электродинамике — см. IV, § 100).

Сокращение коэффициента $1/2$ в (13.6) есть проявление общего правила: не надо учитывать (в членах n -го порядка) множитель $1/n!$, происходящий от разложения (13.1), и множитель 2^{-n} , возникающий от коэффициентов $1/2$ в (13.2). Действительно, диаграммы n -го порядка содержат по n штриховых линий ik . Множитель $1/n!$ сокращается от приведения членов, отличающихся перестановками пар чисел i, k между всеми n штриховыми линиями. Множитель же 2^{-n} сокращается от перестановок чисел i, k между концами каждой из этих линий.

Окончательные правила диаграммной техники мы сформулируем для вычисления функции Грина не в координатных, а сразу в импульсном представлении, наиболее важном для физических применений.

Переход к импульсному представлению осуществляется путем разложения Фурье (7.21), (7.22), которое запишем в «четырехмерном» виде¹⁾.

$$G(X) = \int G(P) e^{iPX} \frac{d^4 P}{(2\pi)^4}, \quad G(P) = \int G(X) e^{iPX} d^4 X, \quad (13.8)$$

где «4-импульс» $P = (\omega, \mathbf{p})$, а $PX = \omega t - \mathbf{p}\mathbf{r}$. Аналогичным

¹⁾ Используя для удобства изложения и обозначений четырехмерную терминологию, подчеркнем лишний раз, что она не имеет здесь никакого отношения к релятивистской инвариантности!

образом разложим также и потенциал взаимодействия:

$$U(X) = \delta(t)U(\mathbf{r}) = \int U(Q)e^{-iQX} \frac{d^4Q}{(2\pi)^4}, \quad (13.9)$$

где $Q = (q_0, \mathbf{q})$; при этом $U(Q)$ совпадает с компонентой трехмерного разложения

$$U(Q) \equiv U(\mathbf{q}) = \int U(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3x. \quad (13.10)$$

Ввиду четности функции $U(\mathbf{r})$ очевидно, что $U(-\mathbf{q}) = U(\mathbf{q})$.

Произведем это разложение для поправки первого порядка $G_{12}^{(1)} \equiv G_{\alpha\beta}^{(1)}(X_1 - X_2)$. Для этого умножаем равенство (13.6) на $\exp[iP(X_1 - X_2)]$ и интегрируем его по $d^4(X_1 - X_2)$.

В первом члене пишем

$$e^{iP(X_1 - X_2)} = e^{iP(X_1 - X_3)}e^{iP(X_3 - X_2)}$$

и, заменив переменные интегрирования, получаем

$$\begin{aligned} & in^{(0)} \int G_{\alpha\gamma}^{(0)}(X_1 - X_3)e^{iP(X_1 - X_3)} d^4(X_1 - X_3) \times \\ & \times \int G_{\gamma\beta}^{(0)}(X_3 - X_2)e^{iP(X_3 - X_2)} d^4(X_3 - X_2) \int U(X_3 - X_4) d^4(X_3 - X_4). \end{aligned}$$

Первые два интеграла дают $G_{\alpha\gamma}^{(0)}(P)G_{\gamma\beta}^{(0)}(P)$, а третий равен $U(0) = \int U(\mathbf{r}) d^3x$ — значению $U(\mathbf{q})$ при $\mathbf{q} = 0$.

Аналогичным образом, во втором члене пишем

$$e^{iP(X_1 - X_2)} = e^{iP(X_1 - X_3)}e^{iP(X_3 - X_4)}e^{iP(X_4 - X_2)}$$

и после перехода к интегрированию по $X_1 - X_3$, $X_3 - X_4$, $X_4 - X_2$, получаем

$$-G_{\alpha\gamma}^{(0)}(P) \int G_{\gamma\delta}^{(0)}(X)U(X)e^{iPX} d^4X \cdot G_{\delta\beta}^{(0)}(P).$$

Оставшийся интеграл выражается через фурье-компоненты функции $G_{\gamma\delta}^{(0)}$ и U с помощью формулы для фурье-компонент

произведения двух функций¹⁾

$$\int f(X)g(X)e^{iPX} d^4X = \int f(P_1)g(P - P_1) \frac{d^4P_1}{(2\pi)^4}. \quad (13.11)$$

Таким образом, для поправки первого порядка в функции Грина в импульсном представлении окончательно находим

$$iG_{\alpha\beta}^{(1)}(P) = in^{(0)}U(0)G_{\alpha\gamma}^{(0)}(P)G_{\gamma\beta}^{(0)}(P) - \\ - \int G_{\alpha\gamma}^{(0)}(P)G_{\gamma\delta}^{(0)}(P_1)G_{\delta\beta}^{(0)}(P)U(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \frac{d^4P_1}{(2\pi)^4}. \quad (13.12)$$

Каждому из двух членов в (13.12) ставится в соответствие определенная диаграмма Фейнмана, и выражение (13.12) записывается в виде

$$iG_{\alpha\beta}^{(1)}(P) = \text{diagram (a)} + \text{diagram (b)}. \quad (13.13)$$

Точки пересечения линий называют *вершинами* диаграммы. Каждая диаграмма имеет $2n$ вершин, где n — порядок теории возмущений. В каждой вершине сходятся две сплошные и одна штриховая линии. Каждой сплошной линии приписывается

¹⁾Для доказательства этой формулы надо в ее левую часть подставить сами функции $f(X)$ и $g(X)$ в виде фурье-разложений:

$$\int f(X)g(X)e^{iPX} d^4X = \int f(P_1)g(P_2)e^{i(P-P_1-P_2)X} d^4X \frac{d^4P_1 d^4P_2}{(2\pi)^4}.$$

Интегрирование по d^4X осуществляется по формуле

$$\int e^{iPX} d^4X = (2\pi)^4 \delta^{(4)}(P),$$

где «четырёхмерная» δ -функция $\delta^{(4)}$ определяется как произведение δ -функций от компонент «4-вектора» P . Множитель $\delta^{(4)}(P-P_1-P_2)$ устанавливается интегрированием по d^4P_2 , и мы в результате приходим к правой части (13.11).

свой «4-импульс» P в направлении, указанном стрелкой (причем вдоль каждой непрерывной последовательности сплошных линий направление стрелок не меняется). Каждой штриховой линии приписывается 4-импульс Q , причем и для этих линий условно выбирается какое-либо (любое) направление стрелки¹⁾.

В вершинах диаграммы выполняется «закон сохранения 4-импульса»: сумма 4-импульсов входящих линий равна сумме 4-импульсов выходящих из вершин линий. Вершине приписывается также и определенный спиновой индекс α . Каждая диаграмма имеет две *внешние* линии (входящую и выходящую), 4-импульс которых есть аргумент искомой функции Грина $G_{\alpha\beta}(P)$; выходящей и входящей линиям приписываются также спиновые индексы α и β этой функции. Остальные линии диаграммы называются *внутренними*.

Аналитическая запись членов, отвечающих каждой диаграмме, производится по следующим правилам:

1) Каждой сплошной линии между вершинами α и β ставится в соответствие множитель $iG_{\alpha\beta}^{(0)}(P)$, каждой штриховой линии — множитель $-iU(Q)$. Замкнутой петле с одной вершиной сопоставляется множитель $n^{(0)}(\mu)$.

2) В каждой вершине выполняется закон сохранения 4-импульса. По остающимся неопределенными 4-импульсам внутренних линий производится интегрирование по $d^4P/(2\pi)^4$. В каждой вершине производится суммирование по паре немых спиновых индексов — по одному от каждого из соседних $G^{(0)}$ -множителей.

3) Общий множитель, с которым диаграмма входит в $iG_{\alpha\beta}$, равен $(-1)^L$, где L — число содержащихся в ней замкнутых петель сплошных линий с более чем одной вершиной.

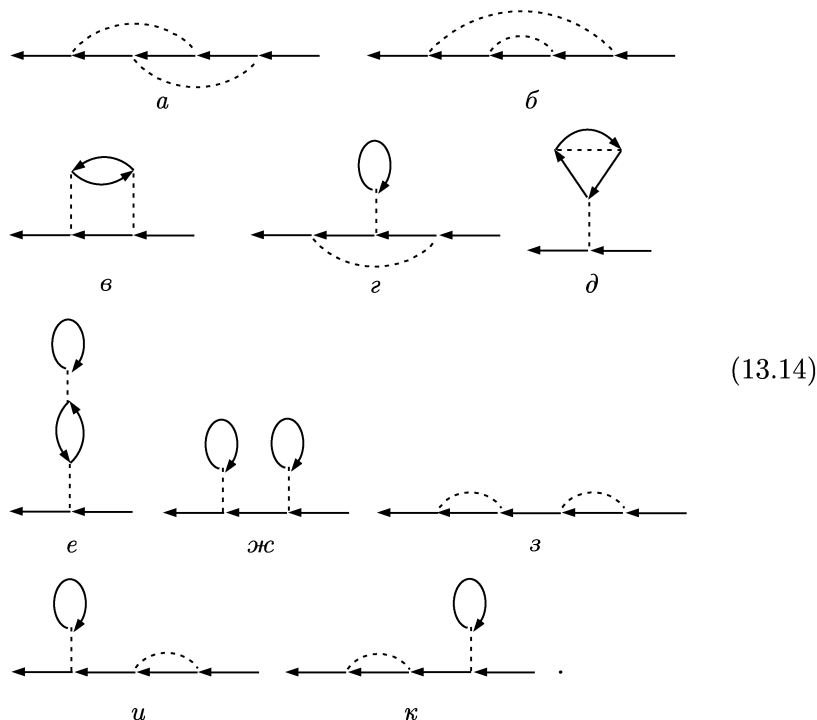
Последнее правило имеет следующее происхождение. Замкнутая петля с $k > 1$ вершинами происходит от свертки ψ -операторов вида

$$\underbrace{\Psi_1^+ \Psi_1 \Psi_2^+ \Psi_2 \dots \Psi_k^+ \Psi_k}_{\text{свертка}}$$

Здесь все свертки равны $iG_{12}^{(0)}, \dots, iG_{k-1,k}^{(0)}$, а последняя равна $-iG_{k1}^{(0)}$. Что касается петель с одной вершиной, то их правильный знак учитывается уже введением $n^{(0)}$ по правилу 1.

¹⁾ «Временные» компоненты 4-векторов $Q = (q_0, \mathbf{q})$, вообще говоря, отличны от нуля, но функция $U(Q)$, по определению (13.10), от q_0 не зависит. Условность направления штриховой линии связана с четностью функции $U(-Q) = U(Q)$.

Для примера изобразим совокупность диаграмм, определяющих поправку второго порядка в функции Грина:



Наконец вернемся к теореме Вика и дадим ее доказательство в применении к «макроскопическому пределу» (т. е. при $V \rightarrow \infty$ или, что то же при заданной плотности системы, при $N \rightarrow \infty$), который только и существен в статистических применениях.

Рассмотрим, например, среднее от произведения четырех ψ -операторов типа

$$\langle \hat{\Psi}_{01} \hat{\Psi}_{02} \hat{\Psi}_{03}^+ \hat{\Psi}_{04}^+ \rangle = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_4} \langle \hat{a}_{p_1} \hat{a}_{p_2} \hat{a}_{p_3}^+ \hat{a}_{p_4}^+ \rangle \exp(\dots) \quad (13.15)$$

(ψ -операторы представлены в виде (9.3); очевидные, но громоздкие показатели экспонент не выписываем). В этой сумме отличны от нуля лишь члены, в которых содержится по одинаковому числу операторов $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ и $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+$ с одинаковыми значениями импульсов. Среди них есть члены, в которых импульсы равны попарно,

например, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_4$ и $\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3$. Эти члены отвечают попарной свертке

$$\widehat{\Psi}_{01} \widehat{\Psi}_{02} \widehat{\Psi}_{03}^+ \widehat{\Psi}_{04}^+$$

и выражаются суммой вида

$$\frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \langle \hat{a}_{\mathbf{p}_1} \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{p}_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \rangle \exp(\dots).$$

В пределе $V \rightarrow \infty$ суммирование по $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_2$ заменяются интегрированием по $V^2 d^3 p_1 d^3 p_2 / (2\pi)^6$, объем V сокращается и это выражение остается конечным. В сумме (13.15) отличны от нуля также и члены с $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 = \mathbf{p}_4$; эти члены образуют сумму вида

$$\frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{p}} \langle \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \rangle \exp(\dots);$$

но после перехода в ней к интегрированию один множитель $1/V$ остается, и в пределе $V \rightarrow \infty$ выражение обращается в нуль.

Ясно, что этот результат имеет общий характер: в пределе $V \rightarrow \infty$ в среднем значении от произведения ψ -операторов не обращаются в нуль лишь результаты попарных сверток.

Отметим, что в изложенном доказательстве по существу не использовалось, что усреднение производится именно по основному состоянию, и поэтому оно остается справедливым и при усреднении по любому квантовому состоянию системы¹⁾.

§ 14. Собственно-энергетическая функция

Сформулированные в предыдущем параграфе правила диаграммной техники обладают важным свойством: общий коэффициент в диаграмме не зависит от ее порядка. В силу этого свойства каждая «фигура» на диаграмме имеет определенный аналитический смысл независимо от того, в какую диаграмму

¹⁾ Но если усреднение производится по основному состоянию, то теорема Вика справедлива не только в макроскопическом пределе. Соответствующее доказательство теоремы в статистике совпадает с ее доказательством в квантовой электродинамике (см. IV, § 77). Единственное отличие между этими случаями — разные основные состояния: в вакууме частицы отсутствуют, а в идеальном газе заполняют ферми-сферу с радиусом p_F . Для операторов $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+$, $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ рождения и уничтожения частиц с $p > p_F$ это отличие вообще существенно и доказательство переносится буквально. Для операторов же с $p < p_F$ надо предварительно переобозначить $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ = \hat{b}_{\mathbf{p}}$, $\hat{a}_{\mathbf{p}} = \hat{b}_{\mathbf{p}}^+$, т. е. перейти от частиц к дыркам, которые в основном состоянии внутри ферми-сферы отсутствуют.

она входит, так что ее можно вычислять независимо, заранее. Мало того, можно заранее вычислить сумму некоторых фигур, имеющих определенное число концов, и затем вставить этот «блок» в более сложные диаграммы. Это — одно из важнейших преимуществ диаграммной техники.

Одним из таких «блоков», имеющих также и существенное самостоятельное значение, является так называемая *собственно-энергетическая функция*¹⁾. Чтобы прийти к этому понятию, рассмотрим все диаграммы для функции Грина, которые нельзя разделить на две части, соединенные лишь одной сплошной линией. К таковым относятся, например, обе диаграммы первого порядка теории возмущений (13.13) и диаграммы (13.14a–e) второго порядка. Все эти диаграммы построены однотипно: по одному множителю $iG_{\alpha\beta}^{(0)}$ по концам и некоторая внутренняя часть (функция от P), которую и называют собственно-энергетической функцией. Сумму всех возможных таких частей называют точной или полной собственно-энергетической функцией или *массовым оператором*; обозначим ее через $-i\Sigma_{\alpha\beta}(P)$.

Все диаграммы собственно-энергетического типа дают в гриновскую функцию вклад, равный

$$iG_{\alpha\beta}^{(0)}(P)[-i\Sigma_{\beta\gamma}(P)]iG_{\gamma\delta}^{(0)}(P) = iG^{(0)}(P)\Sigma(P)G^{(0)}(P)\delta_{\alpha\beta}, \quad (14.1)$$

где помимо $G_{\alpha\beta}^{(0)} = G^{(0)}\delta_{\alpha\beta}$ написано также и

$$\Sigma_{\alpha\beta}(P) = \delta_{\alpha\beta}\Sigma(P). \quad (14.2)$$

Полная же функция Грина (изображаемая графически жирной сплошной линией) дается суммой бесконечного ряда

$$\text{←←} = \text{←←} + \text{←} \bigcirc \text{←} + \text{←} \bigcirc \text{←} \bigcirc \text{←} + \dots, \quad (14.3)$$

где кружки изображают точные собственно-энергетические функции $(-i\Sigma_{\alpha\beta})$. Каждый член этого ряда (начиная с третьего) представляет собой совокупность диаграмм, которые могут быть рассечены на две, три и т. д. части, соединенные между собой одной сплошной линией.

Если от всех членов ряда (14.3), начиная со второго, «отсечь» один кружок с присоединенной к нему справа линией, то оставшийся ряд будет снова совпадать с полным рядом. Это значит, что

$$\text{←←} = \text{←←} + \text{←} \bigcirc \text{←} . \quad (14.4)$$

¹⁾ Ср. аналогичное определение в квантовой электродинамике, где такая функция называлась компактной собственно-энергетической (IV, § 103, 105).

В аналитическом виде это равенство записывается как

$$G = G^{(0)} + G \Sigma G^{(0)} \quad (14.5)$$

или, разделив на $G^{(0)}G$:

$$\frac{1}{G(P)} = \frac{1}{G^{(0)}(P)} - \Sigma(P). \quad (14.6)$$

Отметим, что знак мнимой части Σ совпадает со знаком $\text{Im } G$ и, согласно (8.14),

$$\text{sign Im } \Sigma(\omega, \mathbf{p}) = -\text{sign } \omega. \quad (14.7)$$

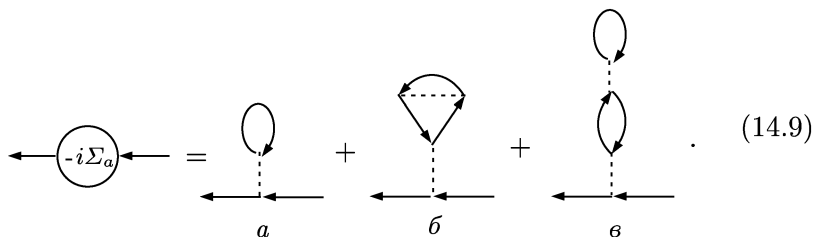
Это следует из (14.6) с учетом того, что знак $\text{Im } G^{-1}$ противоположен знаку $\text{Im } G$, а согласно (9.7), $\text{Im } G^{(0)-1} = 0$.

Таким образом, вычисление G сводится к вычислению Σ , требующему рассмотрения меньшего числа диаграмм. Это число еще более уменьшается в связи с тем, что часть оставшихся диаграмм сразу суммируется к очень простому выражению.

Именно выделим из всей совокупности диаграмм, определяющих Σ (при парном взаимодействии между частицами), те, которые представляют собой различные «отростки», присоединенные к концевым линиям одной штриховой линии: их сумму обозначим через Σ_a . Все такие диаграммы содержатся в одной *скелетной диаграмме* вида ¹⁾



Остальную же часть Σ обозначим через Σ_b . Так, среди диаграмм первого и второго порядков к первой категории относятся следующие:



¹⁾ Как и в квантовой теории поля, скелетными называют диаграммы, составленные из жирных линий и блоков; каждая такая диаграмма эквивалентна определенной совокупности бесконечного числа обычных диаграмм различных порядков.

а ко второй:

$$-i\Sigma_b = \text{diagram (a)} + \text{diagram (b)} + \text{diagram (c)} + \text{diagram (d)} \quad (14.10)$$

Жирной петле на диаграмме (14.8) отвечает точная плотность системы $n(\mu)$ (подобно тому, как тонкой петле на диаграмме (13.13а) отвечает плотность идеального газа $n^{(0)}(\mu)$). Поэтому из определения (14.8) следует, что

$$-i\Sigma_a = -in(\mu)U(0). \quad (14.11)$$

Таким образом,

$$\Sigma = n(\mu)U(0) + \Sigma_b, \quad (14.12)$$

так что особого вычисления требуют лишь диаграммы, входящие в Σ_b .

Закон дисперсии квазичастиц определяется уравнением (8.16). Выразив в нем G через Σ , согласно (14.6), и взяв $G^{(0)}$ из (9.7), получим это уравнение в виде

$$\frac{1}{G^{(0)}(\varepsilon - \mu, \mathbf{p})} = \varepsilon(\mathbf{p}) - \frac{p^2}{2m} = \Sigma(\varepsilon - \mu, \mathbf{p}). \quad (14.13)$$

На границе ферми-сферы при $p = p_F$ энергия квазичастицы совпадает с μ . Отсюда видно, что

$$\mu - \Sigma(0, \mathbf{p}_F) = \frac{p_F^2}{2m}. \quad (14.14)$$

В результате уравнение закона дисперсии принимает (при значениях p вблизи p_F) вид

$$\varepsilon(p) - \mu = \frac{p_F}{m}(p - p_F) + \Sigma(\varepsilon - \mu, \mathbf{p}_F) - \Sigma(0, \mathbf{p}_F). \quad (14.15)$$

Подчеркнем, что здесь $\mathbf{p}_F$ — точное значение граничного импульса для системы взаимодействующих частиц. Соотношением $p_F^3/3\pi^2 = n$ оно связано с точной плотностью $n(\mu)$, а не с приближенной $n^{(0)}$, как в (13.5).

§ 15. Двухчастичная функция Грина

К другим важным понятиям диаграммной техники мы придем, рассмотрев усредненное по основному состоянию T -произведение четырех гейзенберговских ψ -операторов¹⁾:

$$K_{34,12} = \langle T \hat{\Psi}_3 \hat{\Psi}_4 \hat{\Psi}_1^+ \hat{\Psi}_2^+ \rangle. \quad (15.1)$$

Эту функцию называют *двухчастичной функцией Грина* (в отличие от функции Грина (7.9), называемой в этой связи одночастичной).

Для применения теории возмущений и построения диаграммной техники надо снова перейти к ψ -операторам в представлении взаимодействия. Как и в случае функции G , это приведет к появлению множителя $\hat{S}$ под знаком T -произведения:

$$K_{34,12} = \frac{1}{\langle \hat{S} \rangle} \langle T \hat{\Psi}_{03} \hat{\Psi}_{04} \hat{\Psi}_{01}^+ \hat{\Psi}_{02}^+ \hat{S} \rangle. \quad (15.2)$$

В нулевом приближении (т. е. при $\hat{S}=1$) это выражение распадается на сумму произведений двух сверток, выражающихся через $G^{(0)}$ -функции:

$$K_{34,12}^{(0)} = G_{31}^{(0)} G_{42}^{(0)} - G_{32}^{(0)} G_{41}^{(0)}. \quad (15.3)$$

Дальнейшее обсуждение свойств определенной таким образом двухчастичной функции Грина будем проводить в импульсном представлении.

Для однородной системы функция $K_{34,12}$ зависит фактически лишь от трех независимых разностей аргументов, например, от $X_3 - X_2$, $X_4 - X_2$, $X_1 - X_2$. В импульсном представлении это свойство выражается тем, что компонента разложения Фурье по всем переменным $X_1, \dots, X_4$ содержит δ -функцию:

$$\begin{aligned} \int K_{34,12} \exp\{i(P_3 X_3 + P_4 X_4 - P_1 X_1 - P_2 X_2)\} d^4 X_1 \dots d^4 X_4 = \\ = (2\pi)^4 \delta^{(4)}(P_3 + P_4 - P_1 - P_2) K_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2). \end{aligned} \quad (15.4)$$

В этом легко убедиться, заметив, что

$$\begin{aligned} P_3 X_3 + P_4 X_4 - P_1 X_1 - P_2 X_2 = \\ = P_3(X_3 - X_2) + P_4(X_4 - X_2) - P_1(X_1 - X_2) - X_2(P_1 + P_2 - P_3 - P_4), \end{aligned}$$

¹⁾ Мы снова применяем упрощенные обозначения, где индексы 1, 2, ... обозначают совокупности 4-координат и спинowego индекса $X_{1\alpha}$, $X_{2\beta}$, ... (ср. примечание на с. 69). В полной записи

$$K_{34,12} \equiv K_{\gamma\delta, \alpha\beta}(X_3, X_4; X_1, X_2)$$

и перейдя к интегрированию по $X_3 - X_4$, $X_4 - X_2$, $X_1 - X_2$, X_2 . Отметим, кстати, что формулу обратного фурье-преобразования можно записать как

$$K_{34,12} = \int K_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_3 + P_4 - P_1) \times \\ \times \exp \left\{ -i \left[P_3(X_3 - X_2) + P_4(X_4 - X_2) - P_1(X_1 - X_2) \right] \right\} \frac{d^4 P_1 d^4 P_3 d^4 P_4}{(2\pi)^{12}}. \quad (15.5)$$

Определенную таким образом функцию $K_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2)$ мы и будем называть двухчастичной функцией Грина в импульсном представлении; ее аргументы связаны равенством

$$P_1 + P_2 = P_3 + P_4.$$

В нулевом приближении имеем для нее (в соответствии с (15.3))

$$K_{\gamma\delta, \alpha\beta}^{(0)}(P_3, P_4; P_1, P_2) = \\ = (2\pi)^4 [\delta^{(4)}(P_1 - P_3) G_{\gamma\alpha}^{(0)}(P_1) G_{\delta\beta}^{(0)}(P_2) - \delta^{(4)}(P_1 - P_4) G_{\gamma\beta}^{(0)}(P_2) G_{\delta\alpha}^{(0)}(P_1)], \quad (15.6)$$

т. е. K сводится к сумме двух произведений одночастичных гриновских функций.

В следующих приближениях теории возмущений появляются члены, сводящиеся к введению поправок к этим одночастичным функциям. Наряду с ними, однако, возникают также и члены, не укладывающиеся в произведения G -функций. Именно эта часть двухчастичной функции Грина представляет самостоятельный интерес. Для ее выделения представим K в виде

$$K_{\alpha_3\alpha_4, \alpha_1\alpha_2}(P_3, P_4; P_1, P_2) = (2\pi)^4 [\delta^{(4)}(P_1 - P_3) G_{\alpha_3\alpha_1}(P_1) G_{\alpha_4\alpha_2}(P_2) - \\ - \delta^{(4)}(P_1 - P_4) G_{\alpha_3\alpha_2}(P_2) G_{\alpha_4\alpha_1}(P_1)] + \\ + G_{\alpha_3\beta_3}(P_3) G_{\alpha_4\beta_4}(P_4) i\Gamma_{\beta_3\beta_4, \beta_1\beta_2}(P_3, P_4; P_1, P_2) G_{\beta_1\alpha_1}(P_1) G_{\beta_2\alpha_2}(P_2). \quad (15.7)$$

Определенную таким образом функцию Γ называют *вершинной функцией*.

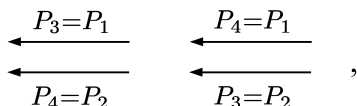
Согласно определению (15.1), двухчастичная функция Грина в пространственно-временном представлении антисимметрична по отношению к перестановкам аргументов (вместе со спинowymi индексами) первой и второй пары: 1 и 2 или 3 и 4. Отсюда

следует аналогичное свойство симметрии для функции Грина и вершинной функции в импульсном представлении:

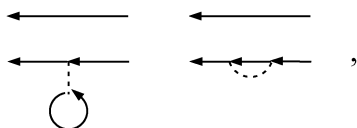
$$\Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2) = -\Gamma_{\delta\gamma,\alpha\beta}(P_4, P_3; P_1, P_2) = -\Gamma_{\gamma\delta,\beta\alpha}(P_3, P_4; P_2, P_1). \quad (15.8)$$

Смысл выделения четырех G -множителей в определении Γ (последний член в (15.7)) становится ясным, если проследить за характером диаграмм, возникающих при раскрытии выражения (15.2) для двухчастичной функции Грина. Следующие ниже рассуждения снова предполагают парное взаимодействие между частицами.

В нулевом приближении функции K сопоставляются диаграммы



отвечающие двум членам в (15.6). В первом порядке теории возмущений появляются диаграммы типов ¹⁾



представляющие собой поправки к каждому из отдельных множителей в (15.6). Кроме них, однако, появляются также диаграммы, не разбивающиеся на две отдельные части:

$$i\Gamma^{(1)} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2}. \quad (15.9)$$

Четыре стрелки $P_1, \dots, P_4$ отвечают четырем G -множителям в последнем члене в (15.7), а «внутренняя» часть диаграмм определяет (в первом порядке) вершинную функцию — кружок в левой части диаграммного равенства (15.9). Раскрыв эти диаграммы в аналитическом виде, получим

$$\Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}^{(1)}(P_3, P_4; P_1, P_2) = -\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}U(P_1 - P_3) + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}U(P_1 - P_4).$$

¹⁾ Как и в случае одночастичной функции Грина, множитель $\langle \hat{S} \rangle^{-1}$ в определении (15.2) приводит к исчезновению диаграмм, содержащих отсоединенные замкнутые петли сплошных линий.

Диаграммы более высоких порядков содержат поправки трех категорий: 1) дальнейшие поправки к двум не соединенным между собой сплошным линиям, 2) поправки собственно-энергетического типа к концевым линиям на диаграммах (15.9), 3) поправки, образующие фигуру, заменяющую собой штриховую линию на диаграммах (15.9); сумма всех возможных таких фигур и дает точную вершинную функцию $i\Gamma$. В графическом представлении двухчастичной функции Грина суммой скелетных диаграмм

$$\begin{array}{c} \overleftarrow{P_3=P_1} \\ \overleftarrow{P_4=P_2} \end{array} + \begin{array}{c} \overleftarrow{P_4=P_1} \\ \overleftarrow{P_3=P_2} \end{array} + \begin{array}{c} P_3 \quad P_1 \\ \diagup \quad \diagdown \\ \circ i\Gamma \\ \diagdown \quad \diagup \\ P_4 \quad P_2 \end{array} \quad (15.10)$$

жирные линии изображают точные G -функции, а кружок условно обозначает вершинную функцию.

Вычисление вершинной функции в различных порядках теории возмущений должно производиться по сформулированным в § 13 правилам диаграммной техники, причем должны рассматриваться диаграммы с четырьмя внешними концами (а не с двумя, как при вычислении G). Правило 3), определяющее общий знак диаграммы, должно быть дополнено следующим указанием: если непрерывными последовательностями сплошных линий связаны концы 1 с 4 и 2 с 3 (вместо 1 с 3 и 2 с 4), то знак диаграммы меняется на обратный.

Изобразим, для примера, все диаграммы, определяющие вершинную функцию во втором порядке теории возмущений:

$$\begin{array}{c} P_3 \quad P_1 \\ \diagup \quad \diagdown \\ \circ i\Gamma^{(2)} \\ \diagdown \quad \diagup \\ P_4 \quad P_2 \end{array} = \begin{array}{c} 3 \quad 1 \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ 4 \quad 2 \end{array} + \begin{array}{c} 3 \quad 1 \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ 4 \quad 2 \end{array} + \begin{array}{c} 3 \quad 1 \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ 4 \quad 2 \end{array} + \begin{array}{c} 3 \quad 1 \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ 4 \quad 2 \end{array} + \begin{array}{c} 3 \quad 1 \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ 4 \quad 2 \end{array} + (3 \leftrightarrow 4). \quad (15.11)$$

Собственно-энергетическая и вершинная функции (Σ и Γ) не независимы; они связаны друг с другом определенным интегральным уравнением (так называемым *уравнением Дайсона*)¹⁾.

Для его вывода воспользуемся уравнением (9.5), справедливым (как было отмечено там же) и при учете взаимодействия частиц. Разница по сравнению с выводом в § 9 состоит, однако, в том, что теперь ψ -оператор удовлетворяет уравнению (7.8). Опустив в последнем член с внешним полем и подставив из него производную $\partial\hat{\Psi}/\partial t_1$ в (9.5), получим

$$\begin{aligned} & \left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\Delta_1}{2m} + \mu \right) G_{\alpha\beta}(X_1 - X_2) - \delta_{\alpha\beta} \delta^{(4)}(X_1 - X_2) = \\ & = i \int \left\langle T \hat{\Psi}_\gamma^+(X_3) U(X_1 - X_3) \hat{\Psi}_\gamma(X_3) d^4 X_3 \cdot \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \right\rangle = \\ & = -i \int K_{\gamma\alpha, \gamma\beta}(X_3, X_1; X_3, X_2) U_{13} d^4 X_3. \quad (15.12) \end{aligned}$$

Это равенство решает, в принципе, поставленный вопрос, так как K выражается через Γ согласно (15.7). Остается лишь перейти к импульсному представлению. Для этого умножим равенство (15.12) на $\exp[iP(X_1 - X_2)]$ и проинтегрируем по $d^4(X_1 - X_2)$, представив $K_{31, 32}$ в виде (15.5), а U_{13} в виде (13.9). Тогда интегрирование по 4-координатам дает δ -функции, которые устраняются интегрированием по 4-импульсам. В результате получим

$$\begin{aligned} & [G^{(0)-1}(P)G(P) - 1]\delta_{\alpha\beta} = \\ & = -i \int K_{\gamma\alpha, \gamma\beta}(P_3, P_4; P_3 + P_4 - P, P) U(P - P_4) \frac{d^4 P_3 d^4 P_4}{(2\pi)^8} \quad (15.13) \end{aligned}$$

с $G^{(0)}(P)$ из (9.7).

Теперь осталось выразить K через Γ . Подставив (15.7) в (15.13), получим окончательно уравнение Дайсона в виде

$$\begin{aligned} & \delta_{\alpha\beta} [G^{(0)-1}(P) - G^{-1}(P)] = \delta_{\alpha\beta} \Sigma(P) = \\ & = U(0)n(\mu)\delta_{\alpha\beta} + i\delta_{\alpha\beta} \int U(P - P_1) G(P_1) \frac{d^4 P_1}{(2\pi)^4} + \\ & + \int \Gamma_{\gamma\alpha, \gamma\beta}(P_3, P_4; P_3 + P_4 - P, P) G(P_3) G(P_4) G(P_3 + P_4 - P) \times \\ & \times U(P - P_4) \frac{d^4 P_3 d^4 P_4}{(2\pi)^8}. \quad (15.14) \end{aligned}$$

¹⁾ Оно аналогично уравнению Дайсона в квантовой электродинамике (см. IV, § 107).

Здесь $n(\mu)$ — точная плотность системы как функция ее химического потенциала; этот множитель возникает от интегрирования G -функции по формуле (7.24) (при этом учитывается, что данная G -функция возникла от свертки, в которой $\hat{\Psi}^+$ стоит слева от $\hat{\Psi}$). Отметим, что первый член в правой части уравнения (15.14) есть Σ_a (14.11).

§ 16. Связь вершинной функции с амплитудой рассеяния квазичастиц

Математический аппарат, развитый в предыдущих параграфах, дает возможность строго обосновать и более глубоко понять смысл основных соотношений теории ферми-жидкости Ландау, которые были введены в гл. 1 до некоторой степени интуитивным образом. Этому посвящены § 16 – 20¹⁾.

Существует тесная связь между вершинной функцией и амплитудой взаимного рассеяния квазичастиц. Для лучшего уяснения этой связи рассмотрим ее сначала в рамках чисто квантовомеханической задачи о рассеянии двух частиц в вакууме.

В квантовой механике «четырёххвостики» — диаграммы с четырьмя внешними концами (двумя входящими и двумя выходящими) — отвечают процессу столкновения двух частиц; при этом в аналитическом выражении диаграммы ее внешним концам сопоставляются амплитуды волновых функций (плоских волн) свободных частиц (см. IV, § 106). Проследим, каким образом такие диаграммы различных порядков действительно дают последовательные члены обычного нерелятивистского борновского разложения амплитуды рассеяния.

Прежде всего в случае вакуума большое число диаграмм вообще обращается в нуль. Это проще всего понять в координатном представлении, заметив, что в вакууме равны нулю все свертки вида $\langle \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} \rangle$, в которых оператор уничтожения стоит справа и действует на вакуумное состояние первым, остаются только свертки вида $\langle \hat{\Psi} \hat{\Psi}^+ \rangle$. Поэтому обращаются в нуль все диаграммы с замкнутыми петлями сплошных линий — они всегда содержат свертку вида $\langle \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} \rangle$. По той же причине равны нулю все поправки к гриновской функции, т. е. к внутренним сплошным

¹⁾ Содержание § 16–18 принадлежит Л. Д. Ландау (1958), а содержание § 19, 20 — Л. Д. Ландау и Л. П. Питаевскому (1959).

уравнению Шредингера для двух частиц без учета их тождественности, записанному в импульсном представлении (уравнение (130.9) (см. III)). Соответственно, вершинная функция Γ выразится через амплитуду рассеяния f двух частиц формулой

$$\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2) = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} \frac{4\pi}{m} f. \quad (16.3)$$

Прибавление же диаграмм с переставленными концами 3 и 4 приводит к антисимметризации амплитуды, как это и должно быть для фермионов. В первом приближении теории возмущений остаются лишь первая диаграмма (16.1) и диаграмма с переставленными концами, в которые $G^{(\text{бак})}$ вообще не входит. Для амплитуды рассеяния тогда получится обычная формула первого борновского приближения. Последующие диаграммы после проведения интегрирования по промежуточным частотам, дают известные выражения для поправок к амплитуде в следующих борновских приближениях.

В ферми-жидкости взаимодействие сталкивающихся частиц с частицами среды приводит к их эффективной замене квазичастицами. Все связанные с этим взаимодействием поправки к внутренним линиям диаграммы автоматически учитываются определением функции $\hat{\Gamma}$. Дополнительного учета требуют, однако, поправки к внешним линиям. В квантовой теории поля показывается, что уже в силу общих требований унитарности матрицы рассеяния эти поправки приводят к появлению в амплитуде рассеяния по множителю $\sqrt{Z}$ на каждый свободный конец, где Z — перенормировочная постоянная функция Грина (см. IV, § 110); для диаграмм с четырьмя концами это означает умножение на Z^2 . Хотя изложенный там вывод справедлив и для квазичастиц в ферми-жидкости, поясним здесь происхождение этого множителя также и с помощью более простых (хотя и не строгих) рассуждений.

Дело в том, что гриновская функция жидкости вблизи своего полюса (первый член в (10.2)) отличается от гриновской функции идеального газа только множителем Z . Если ввести вместо $\hat{\Psi}$ и $\hat{\Psi}^+$ операторы $\hat{\Psi}_{\text{кв}} = \hat{\Psi}/\sqrt{Z}$, $\hat{\Psi}_{\text{кв}}^+ = \hat{\Psi}^+/\sqrt{Z}$, то составленная из них гриновская функция $G_{\text{кв}} = G/Z$ будет выглядеть вблизи полюса в точности как для идеального газа. В этом смысле эти операторы можно рассматривать как ψ -операторы идеального газа квазичастиц. Определенная по ним двухчастичная функция Грина будет $K_{\text{кв}} = K/Z^2$, и, следовательно (согласно определению (15.7)), вершинная часть $\Gamma_{\text{кв}} = \Gamma Z^2$, что и требовалось.

В применении к квазичастицам представляет интерес не столько сечение рассеяния, сколько число столкновений (в 1 с в 1 см³ жидкости). Для столкновений с заданным изменением импульсов и проекций спинов частиц ($\mathbf{p}_1\alpha, \mathbf{p}_2\beta \rightarrow \mathbf{p}_3\gamma, \mathbf{p}_4\delta$) такое число дается формулой

$$dW = 2\pi \left| Z^2 \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2) \right|^2 \delta(\varepsilon_3 + \varepsilon_4 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2) \times \\ \times n_{\mathbf{p}_1} n_{\mathbf{p}_2} (1 - n_{\mathbf{p}_3}) (1 - n_{\mathbf{p}_4}) \frac{d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 p_3}{(2\pi)^9}, \quad (16.4)$$

причем $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4$, а $n_{\mathbf{p}}$ — функция распределения квазичастиц. Множители $n_{\mathbf{p}_1}$ и $n_{\mathbf{p}_2}$ выражают собой просто тот факт, что число столкновений квазичастиц с заданными начальными импульсами и (проекциями спинов) пропорционально числам таких квазичастиц в единице объема. Множители же $(1 - n_{\mathbf{p}_3})$ и $(1 - n_{\mathbf{p}_4})$ связаны с тем, что, согласно принципу Паули, столкновение может произойти, только если конечные состояния свободны.

§ 17. Вершинная функция при малых передачах импульса

Важную роль в теории ферми-жидкости играет вершинная функция при близких значениях пар переменных P_1, P_3 и P_2, P_4 (мы увидим, в частности, что она тесно связана с функцией взаимодействия квазичастиц). Имея в виду связь

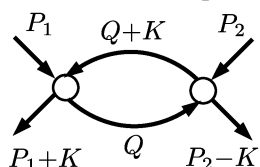
$$P_1 + P_2 = P_3 + P_4,$$

положим $P_3 = P_1 + K$, $P_4 = P_2 - K$ и введем упрощенное обозначение

$$\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_1 + K, P_2 - K; P_1, P_2) = \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(K; P_1, P_2); \quad (17.1)$$

мы будем рассматривать эту функцию при малых значениях K . В терминах процессов рассеяния квазичастиц это значит, что рассматриваются столкновения с малой передачей 4-импульса, близкие к «рассеянию вперед».

При $K = 0$ функция Γ имеет, как мы увидим, особенность; нас будет интересовать именно та часть функции, в которой заключена эта особенность. Происхождение последней легко понять из рассмотрения скелетной диаграммы



$$(17.2)$$

закрывающей в себя ту совокупность диаграмм двухчастичной функции Грина, которые могут быть рассечены между парами концов P_1, P_3 и P_2, P_4 на две части, соединенные между собой двумя сплошными линиями¹⁾. Двум соединительным жирным линиям отвечают точные одночастичные гриновские функции $G(Q)$ и $G(Q + K)$, причем по 4-импульсу Q в диаграмме производится интегрирование. При $K \rightarrow 0$ аргументы этих двух функций сближаются, а потому сближаются и их полюсы. Сближающиеся полюсы могут «зажать» между собой путь интегрирования (см. ниже), что и является источником возникновения особенности в функции Γ .

Для вычисления точной функции Γ надо просуммировать весь ряд теории возмущений. Поскольку наша цель состоит в выделении части, имеющей особенность при $K = 0$, надо прежде всего отделить вклад от всех диаграмм, которые не могут быть рассечены по парам сплошных линий с близкими (отличающимися на K) значениями 4-импульса. Эту часть функции Γ , не имеющую особенности при $K = 0$, обозначим посредством $\tilde{\Gamma}$; в ней можно положить $K = 0$, так что $\tilde{\Gamma}$ будет функцией лишь переменных P_1, P_2 : $\tilde{\Gamma}_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_1, P_2)$. Что же касается «опасных» диаграмм, то их можно классифицировать по числу содержащихся в них пар линий с близкими аргументами. Таким образом, полная вершинная часть Γ изобразится следующим бесконечным «лестничным» рядом диаграмм:

$$\begin{array}{c} P_1 \quad P_2 \\ \diagdown \quad \diagup \\ \circ \\ \diagup \quad \diagdown \end{array} = \begin{array}{c} \diagdown \quad \diagup \\ \text{штрихованный} \\ \diagup \quad \diagdown \end{array} + \begin{array}{c} \diagdown \quad \diagup \\ \text{штрихованный} \quad \text{штрихованный} \\ \diagup \quad \diagdown \end{array} + \begin{array}{c} \diagdown \quad \diagup \\ \text{штрихованный} \quad \text{штрихованный} \quad \text{штрихованный} \\ \diagup \quad \diagdown \end{array} + \dots \quad (17.3)$$

$P_1+K \quad P_2-K$

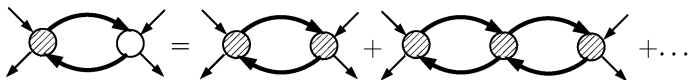
Здесь светловому кружку отвечает искомое $i\Gamma$, а заштрихованные кружки изображают $\tilde{i\Gamma}$. Внешние линии на этих диаграммах не входят в определение Γ и служат лишь для указания числа и значений входящих и выходящих 4-импульсов.

Все внутренние линии на диаграммах (17.3) — жирные, т. е. им соответствуют точные G -функции. Подчеркнем в этой связи, что возможность представления Γ в виде этих скелетных диаграмм (а тем самым и все дальнейшие следствия из них) отнюдь не предполагает парности взаимодействия между частицами, поскольку штриховые линии здесь в явном виде отсутствуют; от характера взаимодействия в действительности зависит лишь

¹⁾ Так, во втором порядке теории возмущений (по парному взаимодействию) в (17.2) входят диаграммы (15.11а, б, в) и диаграмма (15.11д) с перекрестными концами 3 и 4.

(не интересующая нас здесь) внутренняя структура блоков, изображенных кружками¹⁾.

Задача о суммировании ряда (17.3) сводится к решению интегрального уравнения, для получения которого «умножим» весь ряд еще на одно $\tilde{\Gamma}$, т. е. заменим его рядом



Сравнение с исходным рядом (17.3) приводит к равенству

$$\begin{array}{c} P_1 \quad Q+K \quad P_2 \\ \swarrow \quad \uparrow \quad \swarrow \quad \uparrow \\ \text{Bubble} \\ \searrow \quad \downarrow \quad \searrow \quad \downarrow \\ P_1+K \quad Q \quad P_2-K \end{array} = \begin{array}{c} P_1 \quad P_2 \\ \swarrow \quad \uparrow \\ \text{Bubble} \\ \searrow \quad \downarrow \\ P_1+K \quad P_2-K \end{array} - \begin{array}{c} P_1 \quad P_2 \\ \swarrow \quad \uparrow \\ \text{Bubble} \\ \searrow \quad \downarrow \\ P_1+K \quad P_2-K \end{array}. \quad (17.4)$$

Это диаграммное равенство, будучи записано в аналитическом виде, и дает искомое интегральное уравнение

$$\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(K; P_1, P_2) = \tilde{\Gamma}_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_1, P_2) - i \int \tilde{\Gamma}_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}(P_1, Q) G(Q+K) G(Q) \Gamma_{\kappa\delta, \zeta\beta}(K; Q, P_2) \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4}. \quad (17.5)$$

Согласно сказанному выше, в функциях $\tilde{\Gamma}$ положено $K = 0$; использованы введенные выше сокращенные обозначения Γ и $\tilde{\Gamma}$, а также положено $G_{\alpha\beta} = G\delta_{\alpha\beta}$.

Для исследования этого уравнения рассмотрим прежде всего стоящее в его ядре произведение $G(Q+K)G(Q)$. Как уже было отмечено, при малых K полюсы обоих множителей близки друг к другу. Вблизи этих полюсов G -функции представляются полюсными членами (10.2). Обозначив компоненты 4 векторов K и Q , согласно

$$K = (\omega, \mathbf{k}), \quad Q = (q_0, \mathbf{q}), \quad (17.6)$$

пишем в этой области

$$\begin{aligned} G(Q)G(Q+K) &\approx \\ &\approx Z^2 [q_0 - v_F(q - p_F) + i\delta_1]^{-1} [q_0 + \omega - v_F(|\mathbf{q} + \mathbf{k}| - p_F) + i\delta_2]^{-1}, \end{aligned} \quad (17.7)$$

¹⁾ Предполагается лишь такое общее свойство, как сохранение числа частиц. Последнее проявляется в постоянстве разности числа линий, проходящих направо и налево в каждом сечении диаграммы (равной нулю для сечений показанного в (17.3) типа).

где δ_1, δ_2 — бесконечно малые добавки, знак которых (вблизи полюсов) определяется согласно

$$\begin{aligned}\operatorname{sign} \delta_1 &= \operatorname{sign} (q - p_F), \\ \operatorname{sign} \delta_2 &= \operatorname{sign} (|\mathbf{q} + \mathbf{k}| - p_F).\end{aligned}\quad (17.8)$$

Знаки δ_1 и δ_2 определяют расположение полюсов — в верхней или нижней полуплоскостях комплексной переменной q_0 . Особенности в ядре интегрального уравнения (а с ним и в его решении) возникает в результате зажатия контура интегрирования dq_0 (вещественная ось) между полюсами, для чего последние должны находиться по разные стороны этого контура, т. е. в разных полуплоскостях.

Предположим сначала, что $\mathbf{qk} > 0$, т. е. $\cos \theta > 0$, где θ — угол между $\mathbf{q}$ и $\mathbf{k}$. Тогда $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| > q$, и δ_1 и δ_2 имеют различные знаки ($\delta_1 < 0$, $\delta_2 > 0$), если $q < p_F$, $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| > p_F$, что ввиду малости k эквивалентно условиям

$$p_F - k \cos \theta < q < p_F. \quad (17.9)$$

При дальнейшем интегрировании по dq_0 в (17.5) путь интегрирования можно замкнуть бесконечно удаленной полуокружностью (все равно — сверху или снизу), и тогда интеграл определится вычетом подынтегрального выражения в соответствующем полюсе. При этом ввиду узости интервала (17.9) (при малом k) в множителях Γ и $\tilde{\Gamma}$ под знаком интеграла можно будет положить $k = 0$ и соответственно для положения полюсов (при малых k, ω): $q_0 \approx 0$.

Другими словами, в смысле своей роли в ядре интегрального уравнения (17.5) произведение полюсных множителей (17.7) эквивалентно δ -функциям

$$A \delta(q_0) \delta(q - p_F)$$

с коэффициентом A , определенным как интеграл

$$A = \int \frac{Z^2 dq_0 dq}{[q_0 - v_F(q - p_F) + i\delta_1][q_0 + \omega - v_F(|\mathbf{q} + \mathbf{k}| - p_F) + i\delta_2]}.$$

Когда q лежит вне интервала (17.9), оба полюса лежат в одной полуплоскости комплексного q_0 , и, замкнув путь интегрирования по dq_0 через другую полуплоскость, убедимся, что интеграл обращается в нуль. В области же (17.9), замкнув путь через одну из полуплоскостей и вычисляя интеграл по вычету в расположенном в этой полуплоскости полюсе, найдем

$$A = \int \frac{2\pi i Z^2 dq}{\omega - v_F(|\mathbf{q} + \mathbf{k}| - q) + i0}$$

(учтено, что в области (17.9) $\delta_1 < 0$, $\delta_2 > 0$). Поскольку в силу (17.9) $q \approx p_F \gg k$, то можно положить $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| - q \approx k \cos \theta$, после чего (с учетом пределов (17.9))

$$A = \frac{2\pi i Z^2 k \cos \theta}{\omega - k v_F \cos \theta}.$$

Легко показать тем же способом, что такое же выражение для A (но с другим знаком у $i0$) получается и при $\cos \theta < 0$ (когда интегрирование должно производиться по области $q > p_F$, $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| < p_F$). Таким образом, в ядре уравнения (17.5) имеем

$$G(Q)G(Q + K) = \frac{2\pi i Z^2 \mathbf{l}k \delta(q_0) \delta(q - p_F)}{\omega - v_F \mathbf{l}k + i0 \cdot \text{sign } \omega} + \varphi(Q), \quad (17.10)$$

где написано $\mathbf{l}k$ вместо $k \cos \theta$ ($\mathbf{l} = \mathbf{q}/q$), а функция φ не содержит (при малых K) δ -функционной части, и потому в ней можно положить $K = 0$.

Подставив (17.10) в (17.5), получим основное интегральное уравнение в виде

$$\begin{aligned} \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(K; P_1, P_2) &= \tilde{\Gamma}_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_1, P_2) - \\ &- i \int \tilde{\Gamma}_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}(P_1, Q) \varphi(Q) \Gamma_{\kappa\delta, \zeta\beta}(K; Q, P_2) \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4} + \\ &+ \frac{Z^2 p_F^2}{(2\pi)^3} \int \tilde{\Gamma}_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}(P_1, Q_F) \Gamma_{\kappa\delta, \zeta\beta}(K; Q_F, P_2) \frac{\mathbf{l}k d\omega_l}{\omega - v_F \mathbf{l}k}. \end{aligned} \quad (17.11)$$

В последнем члене подставлено $d^4 Q = q^2 dq d\omega_l dq_0$ (где $d\omega_l$ —элемент телесного угла в направлении $\mathbf{l}$) и интегрированием по $dq dq_0$ устранены δ -функции. В этом члене в функциях Γ и $\tilde{\Gamma}$ аргумент Q берется на ферми-поверхности: $Q_F = (0, p_F \mathbf{l})$.

Обратим внимание на специфический характер множителя $\mathbf{l}k/(\omega - v_F \mathbf{l}k)$ в ядре уравнения (17.11): его предел при $\mathbf{k} \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$, зависит от предела, к которому стремится при этом отношение ω/k . Таким же характером будет обладать, следовательно, и решение уравнения: предел функции $\Gamma(K; P_1, P_2)$ при $K \rightarrow 0$, зависит от способа стремления к нулю ω и $\mathbf{k}$.

Обозначим через $\Gamma^\omega(P_1, P_2)$ предел

$$\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}^\omega(P_1, P_2) = \lim_{K \rightarrow 0} \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(K; P_1, P_2) \text{ при } k/\omega \rightarrow 0 \quad (17.12)$$

(мы увидим в § 18, что именно с этой величиной связана функция взаимодействия квазичастиц). При таком способе перехода к пределу ядро последнего интегрального члена в (17.11) обращается

в нуль, так что Γ^ω удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}^\omega(P_1, P_2) = \\ = \tilde{\Gamma}_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_1, P_2) - i \int \tilde{\Gamma}_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}(P_1, Q) \varphi(Q) \Gamma_{\kappa\delta, \zeta\beta}^\omega(Q, P_2) \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4}. \end{aligned} \quad (17.13)$$

Отметим, что ввиду (15.8)

$$\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}^\omega(P_1, P_2) = \Gamma_{\delta\gamma, \beta\alpha}^\omega(P_2, P_1). \quad (17.14)$$

Из двух уравнений (17.11) и (17.13) можно исключить $\tilde{\Gamma}$. Результат исключения:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(K; P_1, P_2) = \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_1, P_2) + \\ + \frac{Z^2 p_F^2}{(2\pi)^3} \int \Gamma_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}^\omega(P_1, Q_F) \Gamma_{\kappa\delta, \zeta\beta}(K; Q_F, P_2) \frac{\mathbf{k} d\omega_l}{\omega - v_F \mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (17.15)$$

Действительно, если формально записать (17.13) в виде $\tilde{\Gamma} = \hat{L}\Gamma^\omega$, то (17.11) запишется как

$$\hat{L}\Gamma = \tilde{\Gamma} + \frac{Z^2 p_F^2}{(2\pi)^3} \int \tilde{\Gamma} \Gamma \frac{\mathbf{k}}{\omega - v_F \mathbf{k}} d\omega_l.$$

Подставив сюда $\tilde{\Gamma} = \hat{L}\Gamma^\omega$ и применив к обеим сторонам равенства оператор $\hat{L}^{-1}$, получим (17.15).

Введем теперь функцию Γ^k согласно

$$\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}^k(P_1, P_2) = \lim_{K \rightarrow 0} \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(K; P_1, P_2) \text{ при } \omega/k \rightarrow 0. \quad (17.16)$$

Именно эта функция, умноженная на Z^2 , представляет собой амплитуду рассеяния вперед (т. е. перехода $P_1, P_2 \rightarrow P_1, P_2$), отвечающую реальным физическим процессам, происходящим с квазичастицами на ферми-поверхности: столкновения, оставляющие квазичастицы на этой поверхности, сопровождаются изменением импульса без изменения энергии, и потому переход к пределу нулевой передачи импульса ($\mathbf{k} \rightarrow 0$) должен производиться при строго равной нулю передаче энергии ($\omega = 0$). Введенная же выше функция Γ^ω отвечает нефизическому предельному случаю «рассеяния» с малой передачей энергии при строго равной нулю передаче импульса ($\mathbf{k} = 0$).

Положив в (17.15) $\omega = 0$, перейдя к пределу $\mathbf{k} \rightarrow 0$ и умножив обе стороны равенства на Z^2 , получим

$$Z^2 \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}^k(P_1, P_2) = Z^2 \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}^\omega(P_1, P_2) - \frac{p_F^2}{v_F(2\pi)^3} \int Z^2 \Gamma_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}^\omega(P_1, Q_F) \cdot Z^2 \Gamma_{\kappa\delta, \zeta\beta}^k(Q_F, P_2) d\mathbf{Q}_F. \quad (17.17)$$

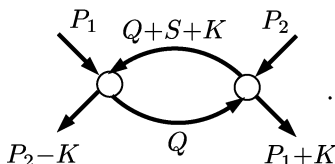
Таким образом, существует общее соотношение, связывающее обе предельные формы амплитуды рассеяния вперед.

Свойства антисимметрии (15.8) для Γ дают некоторую информацию о поведении Γ^k и Γ^ω при $P_1 \rightarrow P_2$. Положив в этом равенстве $P_1 = P_2$ и $\alpha = \beta$, получим

$$\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\alpha}(P_1 + K, P_1 - K; P_1, P_1) = 0 \quad (17.18)$$

(суммирования по α здесь нет!)¹⁾. Переход к Γ^ω или Γ^k в этом равенстве надо производить с осторожностью, так как в Γ^ω , Γ^k сначала положено $K = 0$, а в (17.18) — сначала $P_1 = P_2$.

Пусть одновременно малы K и $P_1 - P_2 \equiv S = (s_0, \mathbf{s})$. Тогда помимо диаграмм (17.2) будут опасными также и диаграммы



При $K, S \rightarrow 0$ функция $\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\alpha}$ будет зависеть, следовательно, от двух «особых» аргументов:

$$x = \frac{\omega}{k}, \quad y = \frac{s_0 + \omega}{|\mathbf{s} + \mathbf{k}|},$$

и (17.18) означает обращение этой функции в нуль при $x = y$. Будем рассматривать значения Γ на ферми-поверхности; тогда $\omega = s_0 = 0$, так что и $y = 0$. Поэтому в таком пределе равенство (17.18) имеет место, только если и $x = 0$. Другими словами, на ферми-поверхности оно справедливо для Γ^k :

$$\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\alpha}^k(P_1, P_2) = 0 \quad (17.19)$$

(N. D. Mermin, 1967).

¹⁾ При учете лишь обменного взаимодействия между спинами квазичастиц из всех $\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\alpha}$ отличны от нуля лишь $\Gamma_{\alpha\alpha, \alpha\alpha}$. Это утверждение выражает собой неизменность вектора спина при рассеянии. Его можно проверить также и непосредственно по выражению вида (2.4).

§ 18. Связь вершинной функции с функцией взаимодействия квазичастиц

Подобно тому как в образовании матричного элемента (7.9), определяющего одночастичную функцию Грина, участвуют промежуточные состояния с числами частиц $N \pm 1$, так и в образовании двухчастичной функции Грина (матричный элемент (15.1)) участвуют промежуточные состояния с N , $N \pm 1$, $N \pm 2$ частицами¹⁾.

Ввиду наличия промежуточных состояний с $N \pm 1$ частицей двухчастичная функция Грина имеет полюсы, совпадающие с полюсами функции G , т. е. с энергией квазичастицы. Соответствующие множители, однако, выделены в (15.7) в явном виде. Поэтому определяемая этой формулой вершинная функция Γ имеет лишь полюсы, соответствующие состояниям с N и $N \pm 2$ частицами. Момент импульса этих состояний отличается от момента основного состояния на 0 или 1, так что отвечающие этим полюсам элементарные возбуждения имеют целый спин (0 или 1) и потому подчиняются статистике Бозе. Другими словами, полюсы вершинной функции определяют бозевские ветви энергетического спектра ферми-жидкости.

Полюсы, возникающие от промежуточных состояний без изменения числа частиц, отвечают элементарным возбуждениям, представляющим кванты нулевого звука. В диаграммной технике промежуточным состояниям отвечают различные сечения диаграмм, разделяющие их на две части между теми или иными из ее внешних концов. В данном случае промежуточным состояниям без изменения числа частиц отвечают сечения диаграмм (17.3) по одной из пар сплошных линий, соединяющих соседние блоки $\tilde{\Gamma}$; неизменность числа частиц в этих состояниях выражается одинаковостью числа линий, пересекающих сечение в ту и другую стороны. Перенос 4-импульса через такое сечение есть $(Q+K) - Q = K$; соответственно этому, элементарным возбуждениям без изменения числа частиц отвечают полюсы вершинной функции $\Gamma(K; P_1, P_2)$ по переменной K .

Мы видели выше (при выводе (17.10)), что из двух импульсов $\mathbf{q}$ и $\mathbf{q}+\mathbf{k}$ (входящих в 4-векторы Q и $Q+K$) один должен быть больше, а другой меньше предельного импульса p_F . С другой стороны, при возбуждении из основного состояния вне ферми-сферы могут быть только «частицы», а внутри нее — только

¹⁾ Состояния с N частицами возникают при такой, например, последовательности операторов в T -произведении, как $\hat{\Psi}_3 \hat{\Psi}_1^+ \hat{\Psi}_4 \hat{\Psi}_2^+$. Состояния же с $N+2$ частицами отвечают таким последовательностям, как $\hat{\Psi}_3 \hat{\Psi}_4 \hat{\Psi}_1^+ \hat{\Psi}_2^+$.

«дырки». В этом смысле можно сказать, что нулевые возбуждения в ферми-жидкости можно рассматривать как связанные состояния частицы и дырки¹⁾.

Элементарные же возбуждения, отвечающие промежуточным состояниям с $N \pm 2$ частицами (им соответствуют полюсы функции $\Gamma(K; P_1, P_2)$ по переменной $P_1 + P_2$), можно было бы рассматривать как связанные состояния двух частиц или двух дырок. Наличие таких состояний, однако, привело бы (как будет показано в гл. V) к сверхтекучести ферми-жидкости, что, в свою очередь, требует существенного изменения всего математического аппарата диаграммной техники.

Таким образом, для определения бозевской ветви энергетического спектра несверхтекучей ферми-жидкости надо исследовать полюсы вершинной функции $\Gamma(K; P_1, P_2)$ по переменной $K = (\omega, \mathbf{k})$. При каждом значении $\mathbf{k}$ полюсу отвечает определенная энергия $\omega = \omega(\mathbf{k})$, чем и определяется закон дисперсии этих возбуждений. Для слабо возбужденных состояний ω и $\mathbf{k}$ малы, так что можно использовать уравнения, полученные для функции $\Gamma(K; P_1, P_2)$ в области малых значений K .

Вблизи полюса функции Γ левая сторона и интеграл в правой стороне уравнения (17.15) сколь угодно велики; член же $\Gamma^\omega(P_1, P_2)$ остается конечным и потому может быть опущен. Далее замечаем, что переменная P_2 , а также индексы β и δ не затрагиваются операциями, производимыми в уравнении (17.15) над функцией Γ , т. е. играют в нем роль несущественных параметров. Наконец, мы будем рассматривать функцию Γ на поверхности ферми-сферы, т. е. положим $P_1 = (0, p_F \mathbf{n})$, где $\mathbf{n}$ — переменный единичный вектор. Имея все это в виду, делаем вывод, что определение возбуждений в ферми-жидкости сводится к задаче о собственных значениях интегрального уравнения

$$\chi_{\gamma\alpha}(\mathbf{n}) = \frac{Z^2 p_F^2}{(2\pi)^3} \int \Gamma_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}^\omega(\mathbf{n}, \mathbf{l}) \chi_{\kappa\zeta}(\mathbf{l}) \frac{\mathbf{l}\mathbf{k} d\mathbf{l}}{\omega - v_F \mathbf{l}\mathbf{k}}, \quad (18.1)$$

где $\chi_{\gamma\alpha}(\mathbf{n})$ — вспомогательная функция.

Преобразуем это уравнение, введя вместо χ новую функцию

$$\nu_{\gamma\alpha}(\mathbf{n}) = \frac{\mathbf{n}\mathbf{k}}{\omega - v_F \mathbf{n}\mathbf{k}} \chi_{\gamma\alpha}(\mathbf{n}). \quad (18.2)$$

¹⁾ В такой постановке задача формально имеет много общего с задачей об определении уровней связанных состояний электрона и позитрона в квантовой электродинамике (см. IV, § 125). В частности, уравнение (17.4), (17.5) аналогично уравнению Бете – Солпитера (см. IV, (125.10), (125.11)).

Тогда уравнение (18.1) примет вид

$$(\omega - v_F \mathbf{n} \mathbf{k}) \nu_{\gamma\alpha}(\mathbf{n}) = \mathbf{k} \mathbf{n} \frac{p_F^2 Z^2}{(2\pi)^3} \int \Gamma_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}^\omega(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \nu_{\kappa\zeta}(\mathbf{n}') d\mathbf{o}' \quad (18.3)$$

(обозначение $\mathbf{l}$ заменено на $\mathbf{n}'$).

Это уравнение по форме в точности совпадает с кинетическим уравнением (4.10) для колебаний ферми-жидкости. Сравнение обоих уравнений приводит к следующему соответствию между функцией взаимодействия квазичастиц и функцией Γ^ω

$$f_{\gamma\delta, \alpha\beta}(p_F \mathbf{n}, p_F \mathbf{n}') = Z^2 \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}^\omega(\mathbf{n}, \mathbf{n}'). \quad (18.4)$$

Тем самым выясняется связь между функцией f и свойствами рассеяния квазичастиц¹⁾.

Равенство (18.4) связывает f с амплитудой нефизического процесса рассеяния. Воспользуемся теперь формулой (17.17) и получим с ее помощью явное соотношение между f и «физической» амплитудой рассеяния вперед для квазичастиц на ферми-поверхности, которую обозначим как

$$A_{\gamma\delta, \alpha\beta}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) = Z^2 \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}^k(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2). \quad (18.5)$$

Соотношение (17.17) на ферми-поверхности принимает вид

$$\begin{aligned} A_{\gamma\delta, \alpha\beta}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) = \\ = f_{\gamma\delta, \alpha\beta}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) - \frac{p_F^2}{(2\pi)^2 v_F} \int f_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}') A_{\kappa\delta, \zeta\beta}(\mathbf{n}', \mathbf{n}_2) \frac{d\mathbf{o}'}{4\pi}. \end{aligned} \quad (18.6)$$

Спиновая зависимость функций A и f может быть выражена с помощью матриц Паули $\boldsymbol{\sigma}$. В общем случае эти функции могут содержать любые скалярные комбинации четырех векторов $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_2$, $\boldsymbol{\sigma}_1$, $\boldsymbol{\sigma}_2$. Но если взаимодействие между частицами является обменным, то допустимыми скалярными произведениями являются лишь $\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2$ и $\boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_2$. Тогда функции A и f можно представить (как это было уже сделано для f в (2.4)) в виде

$$\begin{aligned} \frac{p_F^2}{\pi^2 v_F} f_{\gamma\delta, \alpha\beta}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) &= F(\vartheta) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + G(\vartheta) \boldsymbol{\sigma}_{\gamma\alpha} \boldsymbol{\sigma}_{\delta\beta}, \\ \frac{p_F^2}{\pi^2 v_F} A_{\gamma\delta, \alpha\beta}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) &= B(\vartheta) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + G(\vartheta) \boldsymbol{\sigma}_{\gamma\alpha} \boldsymbol{\sigma}_{\delta\beta}, \end{aligned} \quad (18.7)$$

¹⁾ Изложенный общий вывод принадлежит Л. Д. Ландау (1958). Для слабо неидеального ферми-газа вывод кинетического уравнения путем суммирования конкретных диаграмм типа (17.3) был ранее произведен А. Б. Мигдалом и В. М. Галицким (1958). Заметим, что в случае газа в G -функциях (в нулевом приближении) отсутствуют неполосные члены, и потому вопрос об их исключении не возникает.

где коэффициенты F, G, B, C — функции только от угла ϑ между $\mathbf{n}_1$ и $\mathbf{n}_2$. Эти функции разлагаем по полиномам Лежандра

$$B(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) B_l P_l(\cos \vartheta), \dots \quad (18.8)$$

Подставив (18.7), (18.8) в (18.6) и вычислив интеграл, используя при этом теорему сложения для полиномов Лежандра, получим

$$B_l = F_l(1 - B_l), \quad C_l = C_l(1 - C_l). \quad (18.9)$$

Этими формулами устанавливается простая алгебраическая связь между коэффициентами разложений f и A .

Условия устойчивости (2.19), (2.20) приводят к аналогичным неравенствам для коэффициентов B_l, C_l :

$$B_l < 1, \quad C_l < 1. \quad (18.10)$$

Кроме того, эти коэффициенты удовлетворяют соотношению, являющемуся следствием формулы (17.19): $B(0) + C(0) = 0$ или

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(B_l + C_l) = 0. \quad (18.11)$$

Равенства (18.9) и (18.11) вместе с условиями (18.10) достаточны для доказательства интересного утверждения: во всякой устойчивой ферми-жидкости существует по крайней мере одна ветвь (обычная или спиновая) аксиально-симметричного нулевого звука¹⁾.

§ 19. Тожества для производных от функции Грина

В математическом аппарате функций Грина существенную роль играют некоторые тождественные соотношения между производными от этих функций и амплитудой рассеяния квазичастиц. Вывод этих соотношений однотипен: вычисляется изменение гриновской функции под влиянием некоторого фиктивного «внешнего поля», результат воздействия которого на систему известен заранее.

Поэтому прежде всего вычислим изменение δG гриновской функции под влиянием «внешнего поля» произвольного вида. Такому полю соответствует в гамильтониане член

$$\delta \hat{V}^{(1)} = \int \hat{\Psi}_{\alpha}^{+}(t, \mathbf{r}) \delta \hat{U} \hat{\Psi}_{\alpha}(t, \mathbf{r}) d^3x, \quad (19.1)$$

¹⁾ См. *N. D. Mermin* // *Phys. Rev.* 1967. V. 159, P. 161.

Шредингера» (7.8), то $\hat{\Psi}'$ удовлетворяет тому же уравнению с заменой

$$\Delta \rightarrow (\nabla - i\nabla\chi)^2, \quad \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} - i\frac{\partial\chi}{\partial t}.$$

При бесконечно малом $\chi = \delta\chi$ такое изменение уравнения эквивалентно добавлению к гамильтониану «внешнего поля»

$$\delta\hat{U} = -\frac{\partial\delta\chi}{\partial t} + \frac{i}{2m}(\Delta\delta\chi + 2(\nabla\delta\chi)\nabla).$$

В частности, если

$$\delta\chi(X) = \text{Re}(\chi_0 e^{-iKX}), \quad K = (\omega, \mathbf{k}),$$

(ввиду линейности последующих операций знак Re можно опустить), то

$$\delta U(P_2, P_1) = i(2\pi)^4 \chi_0 \delta^{(4)}(P_2 - P_1 - K) \left[\omega - \frac{1}{2m} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2) \right]. \quad (19.6)$$

С другой стороны, функция Грина, построенная по ψ -операторам:

$$\hat{\Psi}'_\alpha = \hat{\Psi}_\alpha(1 + i\delta\chi), \quad \hat{\Psi}'_\alpha{}^+ = \hat{\Psi}_\alpha{}^+(1 - i\delta\chi)$$

отличается от функции, построенной по операторам $\hat{\Psi}$, $\hat{\Psi}^+$ на

$$\delta G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = iG_{\alpha\beta}(X_1 - X_2)[\delta\chi(X_1) - \delta\chi(X_2)]$$

или, в компонентах Фурье:

$$\begin{aligned} \delta G_{\alpha\beta}(P_2, P_1) &= \int \delta G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) e^{i(P_2 X_1 - P_1 X_2)} d^4 X_1 d^4 X_2 = \\ &= i[G_{\alpha\beta}(P_1) - G_{\alpha\beta}(P_2)]\delta\chi(P_2 - P_1), \end{aligned} \quad (19.7)$$

где

$$\delta\chi(P) = \int \delta\chi(X) e^{iPX} d^4 X = (2\pi)^4 \chi_0 \delta^{(4)}(P - K).$$

Таким образом, одно и то же изменение $\delta G_{\alpha\beta}$ выражено в двух видах: (19.7) и (19.4), куда надо подставить δU из (19.6). Приравняв оба эти выражения друг другу, получим (после замены $G_{\alpha\beta} = G\delta_{\alpha\beta}$ и некоторых переобозначений переменных)

$$\begin{aligned} \delta_{\alpha\beta}[G(P + K) - G(P)] &= G(P + K)G(P) \left\{ \left[-\omega + \frac{\mathbf{k}(2\mathbf{p} + \mathbf{k})}{2m} \right] \delta_{\alpha\beta} + \right. \\ &\left. + i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}(K; P, Q) G(Q) G(Q - K) \left[\omega - \frac{\mathbf{k}(2\mathbf{q} - \mathbf{k})}{2m} \right] \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4} \right\}. \end{aligned}$$

Искомые тождества получаются путем перехода в этом равенстве к пределу $\omega, \mathbf{k} \rightarrow 0$; при этом

$$G(P + K) - G(P) \rightarrow \omega \frac{\partial G}{\partial p_0} + \mathbf{k} \frac{\partial G}{\partial \mathbf{p}} \quad (19.8)$$

(где $P = (p_0, \mathbf{p})$). Произведя этот переход при условии $k/\omega \rightarrow 0$, получим первое тождество

$$\delta_{\alpha\beta} \frac{\partial G(P)}{\partial p_0} = -\{G^2(P)\}_\omega \left[\delta_{\alpha\beta} - i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}^\omega(P, Q) \{G^2(Q)\}_\omega \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4} \right]. \quad (19.9)$$

Здесь введено обозначение

$$\{G^2(P)\}_\omega = \lim_{\omega, \mathbf{k} \rightarrow 0} G(P)G(P + K) \text{ при } k/\omega \rightarrow 0. \quad (19.10)$$

Аналогичным образом, произведя предельный переход при условии $\omega/k \rightarrow 0$, получим еще одно тождество

$$\delta_{\alpha\beta} \frac{\partial G}{\partial \mathbf{p}} = \{G^2(P)\}_k \left[\frac{\mathbf{p}}{m} \delta_{\alpha\beta} - i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}^k(P, Q) \frac{\mathbf{q}}{m} \{G^2(Q)\}_k \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4} \right] \quad (19.11)$$

с аналогичным обозначением $\{G^2(P)\}_k$.

Далее, рассмотрим изменение функции Грина при наложении на систему постоянного поля

$$\delta \hat{U} = \delta U(\mathbf{r}) = U_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (19.12)$$

При $\mathbf{k} \rightarrow 0$ это поле медленно меняется в пространстве, так что его влияние на систему может рассматриваться макроскопически. Согласно термодинамическому условию равновесия во внешнем поле должно быть $\mu + \delta U = \text{const}$ (см. V, § 25); при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ это означает, что химический потенциал μ изменяется на малую величину $-U_0$. Соответствующее изменение функции Грина:

$$\delta G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = -U_0 \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial G(X_1 - X_2)}{\partial \mu},$$

а его фурье-компонента (определенная, как в (19.7)):

$$\delta G_{\alpha\beta}(P_2, P_1) = -(2\pi)^4 \delta^{(4)}(P_2 - P_1) U_0 \frac{\partial G(P_1)}{\partial \mu}.$$

С другой стороны, это же изменение функции Грина можно вычислить по формуле (19.4), положив в ней на этот раз

$$\delta U(P_2, P_1) = (2\pi)^4 U_0 \delta^{(4)}(P_2 - P_1 - K) \quad (K = 0, \mathbf{k}).$$

Переход к пределу $\mathbf{k} \rightarrow 0$ в данном случае (постоянное поле, $\omega \equiv 0$) отвечает случаю $\omega/k \rightarrow 0$. В результате получаем тождество

$$\delta_{\alpha\beta} \frac{\partial G(P)}{\partial \mu} = -\{G^2(P)\}_k \left[\delta_{\alpha\beta} - i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}^k(P, Q) \{G^2(Q)\}_k \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4} \right]. \quad (19.13)$$

Наконец, последнее тождество возникает как следствие галилеевской инвариантности системы. Для его вывода рассмотрим жидкость в системе координат, движущейся с медленно меняющейся со временем малой скоростью $\delta \mathbf{w}(t) = \delta \mathbf{w} e^{-i\omega t}$. Переход к такой системе эквивалентен наложению внешнего поля, оператор которого¹⁾

$$\delta \hat{U} = -\delta \mathbf{w} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{i}{m} \delta \mathbf{w} \cdot \nabla \quad (19.14)$$

или, в импульсном представлении

$$\delta U(P_2, P_1) = -\mathbf{p}_1 \delta \mathbf{w} (2\pi)^4 \delta^{(4)}(P_2 - P_1 - K), \quad K = (\omega, 0).$$

Это выражение надо подставить в (19.4), после чего производим предельный переход $\omega \rightarrow 0$.

С другой стороны, при $\omega \rightarrow 0$ речь идет о преобразовании Галилея от одной инерциальной системы отсчета к другой, движущейся с постоянной скоростью $\delta \mathbf{w}$. Если в жидкости имеется элементарное возбуждение с энергией $\varepsilon(\mathbf{p})$, то в системе отсчета, движущейся относительно жидкости со скоростью $\delta \mathbf{w}$, энергия этого возбуждения будет $\varepsilon - \mathbf{p} \delta \mathbf{w}$ ²⁾. Поэтому в новой системе отсчета частота p_0 должна входить в функцию $G(P)$ в комбинации $p_0 + \mathbf{p} \delta \mathbf{w}$, так чтобы полюс функции сдвинулся на $-\mathbf{p} \delta \mathbf{w}$. Таким образом,

$$\delta G = \mathbf{p} \delta \mathbf{w} \frac{\partial G}{\partial p_0},$$

и мы приходим к тождеству

$$\delta_{\alpha\beta} \mathbf{p} \frac{\partial G(P)}{\partial p_0} = -\{G^2(P)\}_\omega \left\{ \delta_{\alpha\beta} \mathbf{p} - i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}^\omega(P, Q) \mathbf{q} \{G^2(Q)\}_\omega \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4} \right\}. \quad (19.15)$$

¹⁾ В классической функции Лагранжа свободной частицы $L = mv^2/2$ переход к движущейся системе координат совершается заменой $\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v} + \delta \mathbf{w}$ и приводит к появлению малой (при малом $\delta \mathbf{w}$) добавки $\delta L = m\mathbf{v} \delta \mathbf{w}$. Соответственно (см. I, (40.7)) добавка к функции Гамильтона $\delta H = -\mathbf{p} \delta \mathbf{w}$, а в квантовой механике ей отвечает оператор (19.14).

²⁾ См. более подробные рассуждения ниже, в § 23.

Нам придется ниже применять полученные тождества, в частности, при значениях свободной переменной $P = (p_0, \mathbf{p})$ на ферми-поверхности: $P_F = (0, \mathbf{p}_F)$. Перенеся множитель $G^2(P)$ из правых сторон тождеств в левые, заменим там производные от $G(P)$ производными от $G^{-1}(P)$; при этом способ перехода к пределу $K \rightarrow 0$ в $G(P)G(P+K)$ несуществен.

С другой стороны, вблизи ферми-поверхности функция Грина определяется своим полюсным членом, так что

$$G^{-1}(P) = \frac{1}{Z} [p_0 - v_F(p - p_F)].$$

Отсюда, на самой этой поверхности,

$$\frac{\partial G^{-1}}{\partial p_0} = \frac{1}{Z}, \quad \frac{\partial G^{-1}}{\partial \mu} = \frac{v_F}{Z} \frac{dp_F}{d\mu}.$$

В результате, например, тождества (19.9) и (19.13) принимают на ферми-поверхности вид

$$i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}^\omega(P_F, Q) \{G^2(Q)\}_\omega \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4} = \left(1 - \frac{1}{Z}\right) \delta_{\alpha\beta}, \quad (19.16)$$

$$i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}^k(P_F, Q) \{G^2(Q)\}_k \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4} = \left(1 - \frac{v_F}{Z} \frac{dp_F}{d\mu}\right) \delta_{\alpha\beta}. \quad (19.17)$$

§ 20. Вывод связи между предельным импульсом и плотностью

Полученные в предыдущих параграфах соотношения позволяют дать последовательное доказательство основного положения теории ферми-жидкости Ландау: утверждения о том, что связь между предельным импульсом p_F и плотностью жидкости N/V дается той же формулой (1.1), что и для идеального газа.

Идея доказательства состоит в независимом вычислении изменений N и p_F при бесконечно малом изменении химического потенциала μ и затем их сравнении.

Согласно (7.24), полное число частиц (в заданном объеме V) как функция химического потенциала дается интегралом

$$N = -2iV \lim_{t \rightarrow -0} \int G(P) e^{-ip_0 t} \frac{d^4 P}{(2\pi)^4}, \quad P = (p_0, \mathbf{p}). \quad (20.1)$$

Отсюда производная

$$\frac{1}{V} \frac{dN}{d\mu} = -2i \int \frac{\partial G(P)}{\partial \mu} \frac{d^4 P}{(2\pi)^4}. \quad (20.2)$$

Ввиду сходимости этого интеграла при больших p_0 ($\partial G/\partial\mu \propto 1/p_0^2$ при $|p_0| \rightarrow \infty$) писать множитель $e^{-ip_0 t}$ в подынтегральном выражении уже не надо. После подстановки сюда $\partial G/\partial\mu$ из тождества (19.13) (просуммированного по $\alpha = \beta$) находим

$$\frac{1}{V} \frac{dN}{d\mu} = 2i \int \{G^2(P)\}_k \frac{d^4 P}{(2\pi)^4} + \int \{G^2(P)\}_k \Gamma^k(P, Q) \{G^2(Q)\}_k \frac{d^4 P d^4 Q}{(2\pi)^8},$$

где для краткости $\Gamma = \Gamma_{\alpha\gamma, \alpha\gamma}$. Цель дальнейшего вычисления состоит в том, чтобы выразить правую часть этого равенства через интеграл только по ферми-поверхности.

Прежде всего подставим вместо Γ^k во втором интеграле выражение из (17.17) (заменив в нем обозначение Q_F на S_F):

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \frac{dN}{d\mu} &= 2i \int \{G^2(P)\}_k \frac{d^4 P}{(2\pi)^4} + \int \{G^2(P)\}_k \Gamma^\omega(P, Q) \{G^2(Q)\}_k \frac{d^4 P d^4 Q}{(2\pi)^8} - \\ &- \frac{p_F^2 Z^2}{v_F (2\pi)^3} \int \{G^2(P)\}_k \Gamma_{\alpha\zeta, \alpha\kappa}^\omega(P, S_F) \Gamma_{\kappa\gamma, \zeta\gamma}^k(S_F, Q) \{G^2(Q)\}_k \frac{d^4 P d^4 Q do_s}{(2\pi)^8}. \end{aligned} \quad (20.3)$$

Преобразуем сначала последний член. В его подынтегральном выражении от Q зависят только последние два множителя; интеграл от них по $d^4 Q$ определяется (на ферми-поверхности, $S = S_F$) формулой (19.17), так что этот член принимает вид

$$i \frac{p_F^2 Z^2}{v_F (2\pi)^3} \int \{G^2(P)\}_k \Gamma^\omega(P, S_F) \frac{d^4 P do_s}{(2\pi)^4} \left(1 - \frac{v_F}{Z} \frac{dp_F}{d\mu}\right).$$

Далее, вспомним, что при интегрировании по $d^4 P$ предельные значения $G(P)G(P+K)$ надо понимать в смысле (17.10); поэтому $\{G^2(P)\}_\omega = \varphi(P)$, а

$$\{G^2(P)\}_k = \{G^2(P)\}_\omega - \frac{2\pi i Z^2}{v_F} \delta(p_0) \delta(p - p_F). \quad (20.4)$$

После этой замены получим

$$i \frac{p_F^2 Z^2}{v_F (2\pi)^3} \left(1 - \frac{v_F}{Z} \frac{dp_F}{d\mu}\right) \left\{ \int \{G^2(P)\}_\omega \Gamma^\omega(P, S_F) \frac{d^4 P do_s}{(2\pi)^4} - 8\pi i \overline{F} \right\},$$

где, согласно (18.4), введена функция взаимодействия квазичастиц и использовано выражение $f_{\alpha\zeta, \alpha\kappa}$ через функцию $F(\vartheta)$, согласно (2.6), (2.7); черта над F означает интегрирование по $do/4\pi$. Оставшийся интеграл по $d^4 P$ дается формулой (19.16), после чего интегрирование по do_s дает еще множитель 4π . В результате третий член в (20.3) оказывается равным

$$- \frac{p_F^2 Z^2}{v_F \pi^2} \left(\frac{v_F}{Z} \frac{dp_F}{d\mu} - 1 \right) \left\{ 1 - \frac{1}{Z} + \overline{F} \right\}. \quad (20.5)$$

Аналогичным образом преобразуется второй член в (20.3): величины $\{G^2(P)\}_k$ и $\{G^2(Q)\}_k$ выражаются через $\{G^2(P)\}_\omega$ и $\{G^2(Q)\}_\omega$ согласно (20.4), после чего используются тождества (19.9) и (19.16). В результате этот член оказывается равным

$$-2i \int \frac{\partial G}{\partial p_0} \frac{d^4 P}{(2\pi)^4} - 2i \int \{G^2(P)\}_\omega \frac{d^4 P}{(2\pi)^4} + \frac{p_F^2 Z^2}{v_F \pi^2} \left\{ 2 \left(\frac{1}{Z} - 1 \right) - \overline{F} \right\}. \quad (20.6)$$

Первый интеграл обращается в нуль при интегрировании по dp_0 , поскольку $G \rightarrow 0$ при $p_0 \rightarrow \pm\infty$.

Наконец, первый член в (20.3) после подстановки в него (20.4) даст

$$2i \int \{G^2(P)\}_\omega \frac{d^4 P}{(2\pi)^4} + \frac{p_F^2 Z^2}{v_F \pi^2}. \quad (20.7)$$

Сложив теперь все вклады (20.5)–(20.7), найдем

$$\frac{1}{V} \frac{dN}{d\mu} = \frac{p_F^2}{\pi^2} \frac{dp_F}{d\mu} + \frac{p_F^2 Z}{\pi^2 v_F} \left\{ 1 - \frac{dp_F}{d\mu} v_F (1 + \overline{F}) \right\}. \quad (20.8)$$

С другой стороны, с помощью формулы (2.14), в которой следует положить

$$\delta n' = \frac{\delta n'}{\delta p_F} \delta p_F = \delta(p - p_F) \delta p_F$$

находим

$$\frac{d\mu}{dp_F} = v_F (1 + \overline{F}). \quad (20.9)$$

Подчеркнем, что при выводе (2.14) еще не использовалась конкретная зависимость p_F от N/V , и поэтому мы имеем право применить здесь это соотношение с целью нахождения указанной зависимости (равенство (20.9) можно, конечно, получить и с помощью тех же соотношений для вершинных функций, которые были использованы при выводе (20.8))¹⁾.

С учетом этого равенства мы видим, что фигурная скобка в (20.8) обращается в нуль и, таким образом,

$$\frac{d}{d\mu} \frac{N}{V} = \frac{p_F^2}{\pi^2} \frac{dp_F}{d\mu} = \frac{d}{d\mu} \left[\frac{8\pi p_F^3}{3(2\pi)^3} \right]. \quad (20.10)$$

При $N/V \rightarrow 0$ мы имеем дело с газом, так что в этом пределе зависимость p_F от N/V во всяком случае должна совпадать с

¹⁾ Формула же (2.11) для эффективной массы может быть выведена с помощью соотношения (17.17) и тождеств (19.11) и (19.15).

газовой. Этим условием устанавливается постоянная при интегрировании (20.10), и мы приходим, наконец, к искомому соотношению (1.1):

$$\frac{N}{V} = \frac{8\pi p_F^3}{3(2\pi)^3}.$$

§ 21. Гриновская функция почти идеального ферми-газа

Для иллюстрации способа применения диаграммной техники в этом параграфе мы применим ее к вычислению гриновской функции почти идеального ферми-газа в рамках той же модели, которая была рассмотрена в § 6 с помощью обычной теории возмущений (*В. М. Галицкий*, 1958). Напомним, что речь идет о газе с отталкиванием между частицами, причем описанный в § 6 прием позволяет применять к этому взаимодействию теорию возмущений до тех пор, пока в окончательный результат вычисления входит только амплитуда рассеяния.

Как было показано в § 14, нахождение функции Грина сводится к вычислению собственн-энергетической функции $\Sigma_{\alpha\beta}(P)$. В первом и втором приближениях теории возмущений она дается совокупностью диаграмм (14.9) и (14.10). Изобразим их здесь следующим образом:

$$(21.1)$$

Диаграммы (21.1а,б) охватывают собой диаграммы первого порядка (14.10а) и (14.9а) и диаграммы второго порядка (14.10б,в) и (14.9б,в); последние отличаются от первых лишь поправками к внутренней сплошной линии; эти линии изображены в (21.1а,б) жирными и им должны сопоставляться, следовательно, не гриновские функции идеального газа $G^{(0)}$, а функции G , исправленные до членов первого порядка. Наконец, (21.1в,г) — это диаграммы второго порядка (14.10г,д). Все диаграммы деформированы так, что становится ясным характер их структуры;

это — первые члены «лестничного» ряда четырехконцевых диаграмм, в которых по паре из внешних линий «закорочены» друг с другом двумя различными способами.

Начнем с вычисления диаграммы (21.1а). Ее аналитическое выражение

$$[-i\Sigma(P)]_a = \int U(Q)G(P-Q) \frac{d^4Q}{(2\pi)^4}, \quad (21.2)$$

$$Q = (q_0, \mathbf{q}), \quad P = (\omega, \mathbf{p})$$

(общий множитель $\delta_{\alpha\beta}$ опущен). Произведем сначала интегрирование по dq_0 . Поскольку, однако, множитель $U(Q) \equiv U(\mathbf{q})$ от q_0 не зависит, а $G \propto 1/q_0$ при $|q_0| \rightarrow \infty$, то необходимо предварительно уточнить способ интегрирования. Для этого надо вернуться к происхождению диаграммы (21.1а) и заметить, что сплошная линия в ней соответствует свертке пары ψ -операторов внутри одного и того же оператора $\hat{V}$. Это значит, что $\hat{\Psi}$ и $\hat{\Psi}^+$ берутся в одинаковый момент времени, и при свертывании $\hat{\Psi}^+$ стоит слева от $\hat{\Psi}$. Другими словами, в координатном представлении возникающая G -функция берется при $t = t_1 - t_2 \rightarrow -0$. В импульсном же представлении это означает добавление в подынтегральном выражении в (21.2) множителя $\exp(-iq_0 t)$ с переходом к пределу $t \rightarrow -0$. Используя теперь формулу (7.23), получим

$$[-i\Sigma]_a = i \int U(\mathbf{q})N(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \frac{d^3q}{(2\pi)^3}, \quad (21.3)$$

где $N(\mathbf{p})$ — функция распределения частиц.

Фурье-компонента $U(\mathbf{q})$ существенно зависит от величины $\mathbf{q}$ лишь при $q \gtrsim 1/r_0$, где r_0 — радиус действия поля $U(r)$; эти значения заведомо велики (для разреженного газа) по сравнению с p_F . Если ограничиться значениями $|p - p_F| \ll 1/r_0$, то при указанных значениях $\mathbf{q}$ будет $N(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \approx 0$. Поэтому $U(\mathbf{q})$ в (21.3) можно заменить на $U(0)$ и вынести из-под знака интеграла¹⁾. Оставшийся интеграл равен половине (заданное значение проекции спина!) плотности газа $n(\mu)$, так что $[\Sigma]_a = -n(\mu)U(0)/2$.

Диаграмма же (21.1 б) с замкнутой на себя сплошной линией дает $[\Sigma]_b = n(\mu)U(0)$. Таким образом, вклад в Σ от обеих диаграмм есть

$$[\Sigma]_{a,b} = \frac{1}{2}n(\mu)U(0) = \frac{2\pi}{m}n(\mu)a, \quad (21.4)$$

где a — длина рассеяния, определенная согласно (6.2).

¹⁾ Допускаемая таким образом погрешность имеет, как легко видеть, относительный порядок величины $\sim (p_F r_0)^2$ и потому не отражается даже на членах следующего по $p_F r_0$ порядка.

Выражение (21.4) содержит в себе, в частности, весь эффект первого порядка. В этом приближении $n(\mu)$ надо понимать как плотность идеального газа $n^{(0)}(\mu)$, так что

$$\Sigma^{(1)} \equiv [\Sigma]_{a,6}^{(1)} = \frac{2\pi}{m} n^{(0)}(\mu) a. \quad (21.5)$$

Для дальнейшего вычисления введем, в качестве промежуточного обозначения, функцию F , определенную лестничными диаграммами:

$$\begin{array}{c} P_3\gamma \\ P_4\delta \end{array} \leftarrow \textcircled{iF} \leftarrow \begin{array}{c} P_1\alpha \\ P_2\beta \end{array} = \begin{array}{c} \longleftrightarrow \\ \longleftrightarrow \end{array} + \begin{array}{c} \longleftrightarrow \\ \longleftrightarrow \end{array} \quad (21.6)$$

(как всегда, $P_1 + P_2 = P_3 + P_4$). В аналитическом виде

$$iF_{\gamma\delta,\alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2) = i\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}(F^{(1)} + F^{(2)}), \quad (21.7)$$

где

$$iF^{(1)} = -iU(P_3 - P_1), \quad (21.8)$$

$$iF^{(2)} = \int G^{(0)}(P') U(P_1 - P') G^{(0)}(P_1 + P_2 - P') U(P' - P_3) \frac{d^4 P'}{(2\pi)^4}. \quad (21.9)$$

Раскрыв обе диаграммы (21.16,2) и выразив их через $F^{(2)}$, получим

$$[-i\Sigma(P)]_{\sigma, \tau} = -\int G^{(0)}(Q)F^{(2)}(P, Q; Q, P) \frac{d^4Q}{(2\pi)^4} + 2\int G^{(0)}(Q)F^{(2)}(P, Q; P, Q) \frac{d^4Q}{(2\pi)^4} \quad (21.10)$$

(такие же интегралы с $F^{(1)}$ вместо $F^{(2)}$ дают (21.5)). Разница знаков перед двумя интегралами связана с наличием замкнутой петли в диаграмме (21.1 *з*); δ -множители в первой диаграмме дают $\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\gamma\beta} = \delta_{\alpha\beta}$, а во второй: $\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\gamma} = 2\delta_{\alpha\beta}$.

Перейдем к вычислению $F^{(2)}$. Поскольку $U(Q)$ не зависит от q_0 , то интегрирование по dp'_0 сводится к интегралу

$$\int_{-\infty}^{\infty} G^{(0)}(P') G^{(0)}(P_1 + P_2 - P') \frac{dp'_0}{2\pi}.$$

Подставив сюда $G^{(0)}$ из (9.9) (и учитывая сходимость интеграла при $|p'_0| \rightarrow \infty$), замыкаем путь интегрирования бесконечно удаленной полуокружностью в одной из полуплоскостей комплексного p'_0 ; интеграл отличен от нуля, лишь если полюсы двух

функций $G^{(0)}$ лежат в различных полуплоскостях, т. е.

$$\text{sign}(p' - p_F) = \text{sign}(|\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'| - p_F). \quad (21.11)$$

В результате получим

$$F^{(2)}(P_3, P_4; P_1, P_2) = - \int \frac{U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}')U(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_3) \text{sign}(p' - p_F)}{\omega_1 + \omega_2 + 2\mu - (1/2m)[\mathbf{p}'^2 + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}')^2] + i0 \cdot \text{sign}(p' - p_F)} \frac{d^3 p^9}{(2\pi)^3} \quad (21.12)$$

(где $\omega_1 \equiv p_{10}$, $\omega_2 \equiv p_{20}$). При этом, чтобы автоматически учесть требование (21.11), в числителе подынтегрального выражения следует заменить

$$\text{sign}(p' - p_F) \rightarrow 1 - \theta(\mathbf{p}') - \theta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'),$$

где $\theta(\mathbf{p})$ — ступенчатая функция (1.10).

Мы видели в § 16, что ряд лестничных диаграмм определяет (в вакууме) амплитуду взаимного рассеяния двух частиц. Поэтому выражение (21.12) содержит в себе поправку к членам первого порядка в амплитуде рассеяния. Эту поправку можно учесть, заменив в $F^{(1)}$ (21.8)

$$U(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_1) \rightarrow -\frac{4\pi}{m} \text{Re } f(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_1)$$

(где f — точная до второго порядка амплитуда рассеяния в вакууме)¹⁾ и одновременно вычтя из выражения $F^{(2)}$ (21.12) вещественную часть его значения в вакууме, т. е. при $p_F = 0$, $\mu = 0$ и значениях $\omega_1 = p_1^2/2m$, $\omega_2 = p_2^2/2m$, отвечающих энергиям двух реальных сталкивающихся частиц («физические» внешние концы диаграмм). После этого можно уже будет заменить $\text{Re } f$ значением при нулевой энергии, т. е. длиной рассеяния a^2).

¹⁾ Не смешивать f в этом параграфе с функцией взаимодействия квази-частиц!

²⁾ Эта замена не могла быть произведена в (21.12), так как привела бы к расходимости интеграла при больших $\mathbf{p}'$. После произведенного же вычитания интеграл сходится (при $p' \sim p_F$) уже и с такой заменой, что и позволяет произвести ее. Вычитание лишь вещественной части интеграла (и соответственно замена U через $\text{Re } f$) произведено с целью избежать затруднения, связанного с мнимой частью амплитуды рассеяния. Дело в том, что при малых импульсах $\text{Re } f$ разлагается по четным, а $\text{Im } f$ — по нечетным степеням импульса (см. III, § 132). Поэтому учет импульсной зависимости f привел бы к поправкам относительного порядка $(q_F a)^2$, т. е. пренебрежимым. Замена же $U \rightarrow -4\pi f/m$ потребовала бы учета мнимой части f , приводящей к поправкам относительного порядка величины $p_F a$.

Таким образом, будем иметь

$$F^{(2)}(P_3, P_4; P_1, P_2) = - \left(\frac{4\pi a}{m} \right)^2 \int \left\{ \frac{1 - \theta(\mathbf{p}') - \theta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}')}{\omega_1 + \omega_2 + 2\mu - (1/2m)[p'^2 + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}')^2] + i0 \cdot \text{sign}(p' - p_F)} - \right. \\ \left. - P \frac{2m}{p_1^2 + p_2^2 - p'^2 - (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}')^2} \right\} \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3}. \quad (21.13)$$

Знак P во втором члене означает, что интеграл берется в смысле главного значения; это — результат отделения вещественной части интеграла с помощью правила (8.11).

Поскольку выражение (21.13) симметрично по P_1 и P_2 , оба интеграла в (21.10) совпадают, так что

$$[-i\Sigma(P)]_{\epsilon, z} = \int G^{(0)}(Q) F^{(2)}(P, Q; P, Q) \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4}.$$

При подстановке сюда первого члена из (21.13) интеграл по dq_0 отличен от нуля, если

$$\text{sign}(p' - p_F) = -\text{sign}(q - p_F), \quad (21.14)$$

так что оба полюса подынтегрального выражения снова находятся в разных полуплоскостях q_0 . При подстановке же второго члена из (21.13) от q_0 будет зависеть только множитель $G_0(Q)$, интегрирование по dq_0 осуществляется формулой (7.23) и дает $N^{(0)}(\mathbf{q})$ — функцию распределения частиц в идеальном газе, т. е. ступенчатую функцию $\theta(\mathbf{q})$. В результате получим (сбрав вклады от всех диаграмм (21.1a, z))

$$\Sigma(\omega, \mathbf{p}) = \frac{2\pi}{m} n(\mu) a + \Sigma^{(2)}(\omega, \mathbf{p}), \quad (21.15)$$

где

$$\Sigma^{(2)}(\omega, \mathbf{p}) = \left(\frac{4\pi a}{m} \right)^2 \int \left\{ \frac{[1 - \theta(\mathbf{p}') - \theta(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}')] [\theta(\mathbf{q}) - \theta(\mathbf{p}')] }{\omega + \mu + (1/2m)[q^2 - p'^2 - (\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}')^2] + i0 \cdot \text{sign}(p' - p_F)} - \right. \\ \left. - P \frac{2m\theta(\mathbf{q})}{p^2 + q^2 - p'^2 + (\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}')^2} \right\} \frac{d^3 q d^3 p'}{(2\pi)^6} \quad (21.16)$$

(множитель $\theta(\mathbf{q}) - \theta(\mathbf{p}')$ в числителе первого члена под знаком интеграла заменяет собой $-\text{sign}(q - p_F)$ при условии (21.14)).

Заметим прежде всего, что Σ имеет мнимую часть. Она выделяется из (21.16) с помощью правила (8.11) и дается

выражением

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \Sigma(\omega, \mathbf{p}) = & - \left(\frac{4\pi a}{m} \right)^2 \pi \int \{ \theta(\mathbf{q}) [1 - \theta(\mathbf{p}')] [1 - \theta(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}')] - \\ & - [1 - \theta(\mathbf{q})] \theta(\mathbf{p}') \theta(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}') \} \times \\ & \times \delta \left[\omega + \mu + \frac{1}{2m} (q^2 - p'^2 - (\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}')^2) \right] \frac{d^3 q d^3 p'}{(2\pi)^6} \quad (21.17) \end{aligned}$$

(выражение в фигурных скобках преобразовано с учетом того, что $\theta^2(\mathbf{p}) \equiv \theta(\mathbf{p})$).

Спектр энергий квазичастиц вычисляется, согласно (14.13), как

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} + \frac{2\pi}{m} n(\mu) a + \Sigma^{(2)} \left(\frac{p^2}{2m} - \mu, \mathbf{p} \right) \quad (21.18)$$

(в $\Sigma^{(2)}$ можно, с требуемой точностью, положить $\varepsilon \approx p^2/2m$). Комплексность Σ означает наличие затухания у возбуждений ($\operatorname{Im} \varepsilon \neq 0$).

Появление этого затухания выражает неустойчивость квазичастиц, связанную с возможностью реального процесса их распада. Квазичастица может отдать часть своей энергии, за счет которой рождается пара квазичастиц (частица и дырка). Рассмотрим, например, первый член в фигурных скобках под интегралом в (21.17). По свойствам ступенчатой функции этот член отличен от нуля, если

$$p' > p_F, \quad |\mathbf{q} + \mathbf{p} - \mathbf{p}'| > p_F, \quad q < p_F.$$

Эти неравенства отвечают процессу, в котором квазичастица с начальным импульсом $\mathbf{p}$ ($p > p_F$) переходит в состояние $\mathbf{p}'$ ($p > p' > p_F$), причем импульс $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$ передается частице внутри ферми-сферы (импульс $q < p_F$), возбуждаемой до состояния с импульсом $\mathbf{q} + \mathbf{p} - \mathbf{p}'$ вне ферми-сферы; такой переход эквивалентен появлению двух новых элементарных возбуждений — с импульсами $-\mathbf{q}$ (дырка) и $\mathbf{q} + \mathbf{p} - \mathbf{p}'$. Закон сохранения энергии в этом процессе выражается δ -функцией в (21.17), в которой $\omega + \mu$ играет роль начальной энергии квазичастицы $\varepsilon(\mathbf{p})$:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}') + [\varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{p} - \mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{q})]$$

(здесь достаточно положить, в первом приближении, $\varepsilon(\mathbf{p}) = p^2/2m$). В соответствии с указанным смыслом, определенная этим равенством энергия $\varepsilon(\mathbf{p})$ действительно отвечает квазичастице вне ферми-сферы ($\varepsilon > \mu$).

Аналогичным образом, второй член в фигурных скобках в (21.17) возникает от процессов, в которых пара рождается дыркой. Этот член дает затухание элементарных возбуждений с $\varepsilon < \mu$. На языке диаграммной техники возможность рождения пары квазичастиц выражается возможностью рассея

диаграмму G -функции на две части путем пересечения ее по трем сплошным линиям, из которых две направлены в одну, а третья — в другую сторону. На диаграммах (21.16,2) таковы сечения, проходящие между двумя штриховыми линиями.

Случай слабо неидеального газа специфичен (по сравнению с общим случаем произвольной ферми-жидкости) в том отношении, что спектр квазичастиц в нем имеет смысл во всей области значений импульсов, а не только вблизи ферми-поверхности: затухание квазичастиц ($\text{Im } \varepsilon$) оказывается относительно малым уже благодаря малости «параметра газовой» ap_F . Мы приведем здесь, однако, окончательный результат вычислений лишь для двух предельных случаев.

Вблизи ферми-поверхности ($|p - p_F| \ll p_F$) получается

$$\text{Re } \varepsilon = \mu + (p - p_F)p_F/m^*$$

с μ из (6.14) и m^* из (6.17). Для затухания же квазичастиц получается

$$\text{Im } \varepsilon = -\frac{1}{\pi m} (p_F a)^2 (p - p_F)^2 \text{sign } (p - p_F). \quad (21.19)$$

Пропорциональность этого выражения квадрату $(p - p_F)^2$ имеет ясное происхождение: один множитель $p - p_F$ возникает как ширина той области импульсного пространства (узкий шаровой слой), в которую попадает импульс квазичастицы после рождения ею пары, а еще один такой множитель — как ширина слоя, в котором рождается пара. Отметим, кстати, что эти соображения относятся и к любой ферми-жидкости, так что вблизи ферми-поверхности всегда $\text{Im } \varepsilon \propto (p - p_F)^2$ ¹⁾.

При больших импульсах $p \gg p_F$ (но все же $pa \ll 1$) имеем

$$\varepsilon = \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{2p_F^2}{3\pi m} p_F a \right) - i \frac{p_F p}{3\pi m} (p_F a)^2. \quad (21.20)$$

В обоих случаях отношение $\text{Im } \varepsilon / \text{Re } \varepsilon$ мало. Максимальное значение этого отношения достигается при $p \sim p_F$, но и здесь оно $\sim (p_F a)^2 \ll 1$.

Наконец, приведем значение перенормировочной постоянной функции Грина слабо неидеального газа. Она вычисляется как

$$\frac{1}{Z} = 1 - \left. \frac{\partial \Sigma(\omega, \mathbf{p})}{\partial \omega} \right|_{\omega=0, p=p_F}$$

и равна

$$Z = 1 - \frac{8 \ln 2}{\pi^2} (p_F a)^2. \quad (21.21)$$

¹⁾ При отличных от нуля температурах усреднение этой величины по тепловому распределению приводит к пропорциональности затухания квадрату T^2 , о чем уже говорилось в § 1.

СВЕРХТЕКУЧЕСТЬ

§ 22. Элементарные возбуждения в квантовой бозе-жидкости

Обратимся теперь к изучению квантовых жидкостей с энергетическим спектром совершенно иного типа, который можно назвать *бозевским*¹⁾.

Этот спектр характеризуется тем, что элементарные возбуждения (отсутствующие в основном состоянии жидкости) могут появляться и исчезать поодиночке. Но момент импульса всякой квантовомеханической системы (в данном случае — жидкости) может испытывать изменения лишь на целое число. Поэтому возникающие поодиночке элементарные возбуждения должны обладать целочисленным моментом и, следовательно, подчиняться статистике Бозе. Спектром такого типа должна во всяком случае обладать всякая квантовая жидкость, состоящая из частиц с целым спином (таков жидкий изотоп ^4He).

Напомним для сравнения, что в ферми-жидкости, при описании ее в терминах спектра элементарных возбуждений, отсутствующих в основном состоянии (см. конец § 1), эти возбуждения могут появляться или исчезать лишь парами. Именно с этим связана возможность элементарным возбуждениям в этом типе спектра иметь полуцелый спин.

В квантовой бозе-жидкости элементарные возбуждения с малыми импульсами p (длина волны велика по сравнению с межатомными расстояниями) соответствуют обычным гидродинамическим звуковым волнам, т. е. представляют собой фононы. Это значит, что энергия таких квазичастиц является линейной функцией их импульса:

$$\varepsilon = up, \quad (22.1)$$

где u — скорость звука в жидкости. Последняя дается обычной формулой $u^2 = \partial P / \partial \rho$, причем нет необходимости уточнять,

¹⁾ Теория таких квантовых жидкостей была создана Л. Д. Ландау в 1940–1941 гг., вслед за открытием П. Л. Капицей сверхтекучести жидкого гелия. Этими открытиями было положено начало всему развитию современной физики квантовых жидкостей.

берется ли производная при постоянной температуре T или энтропии S , поскольку при $T \rightarrow 0$ также и $S \rightarrow 0^1$).

Число элементарных возбуждений в бозе-жидкости стремится к нулю при $T \rightarrow 0$, и при низких температурах, когда их плотность достаточно мала, квазичастицы можно считать не взаимодействующими друг с другом, т. е. образующими идеальный бозе-газ. Поэтому статистически равновесное распределение элементарных возбуждений в бозе-жидкости дается формулой распределения Бозе (с равным нулю химическим потенциалом — ср. примечание на с. 18)

$$n(\mathbf{p}) = [e^{\varepsilon(p)/T} - 1]^{-1}. \quad (22.2)$$

С помощью этого распределения, и зная зависимость $\varepsilon(p)$ при малых p , можно вычислить термодинамические величины жидкости для таких близких к абсолютному нулю температур, при которых практически все имеющиеся в жидкости элементарные возбуждения обладают малыми энергиями, т. е. являются фононами. Соответствующие формулы можно написать сразу, воспользовавшись выражениями для термодинамических величин твердого тела при низких температурах (см. V, § 64). Разница заключается лишь в том, что вместо трех возможных направлений поляризации звуковых волн в твердом теле (одно продольное и два поперечных) в жидкости существует лишь одно (продольное); поэтому все выражения для термодинамических величин следует разделить на 3. Так, для свободной энергии жидкости имеем

$$F = F_0 - V \frac{\pi^2 T^4}{90(\hbar u)^3}, \quad (22.3)$$

где F_0 — свободная энергия при абсолютном нуле. Энергия жидкости равна

$$E = E_0 + V \frac{\pi^2 T^4}{30(\hbar u)^3}, \quad (22.4)$$

а теплоемкость

$$C = V \frac{2\pi^2 T^3}{15(\hbar u)^3}, \quad (22.5)$$

она пропорциональна кубу температуры.

Фононный закон дисперсии (22.1) справедлив лишь постольку, поскольку длина волны квазичастицы $\hbar/p$ велика по сравнению с межатомными расстояниями. По мере увеличения импульса

¹⁾ Понятие о фононах было введено в V, § 71, 72 для элементарных возбуждений в твердых телах. Подчеркнем, что импульс элементарного возбуждения в микроскопически однородной системе — жидкости — есть истинный импульс, а не квазиимпульс, как в периодическом поле кристаллической решетки твердого тела.

кривая $\varepsilon = \varepsilon(p)$, конечно, отклоняется от линейной зависимости; дальнейший ее ход зависит от конкретного закона взаимодействия жидкости и не может быть поэтому определен в общем виде.

В жидком гелии закон дисперсии элементарных возбуждений имеет форму, изображенную на рис. 2: после начального линейного возрастания функция $\varepsilon(p)$ достигает максимума, затем убывает и при определенном значении импульса p_0 проходит через минимум¹⁾. В тепловом равновесии большинство элементарных возбуждений в жидкости имеет энергии в областях вблизи минимумов функции $\varepsilon(p)$, т. е. в области малых ε (область вблизи $\varepsilon=0$), и в области значения $\varepsilon(p_0)$. Поэтому именно эти области особенно существенны. Вблизи точки $p=p_0$ функция $\varepsilon(p)$ может быть разложена по степеням $p-p_0$. Линейный член в разложении отсутствует, и с точностью до членов второго порядка имеем

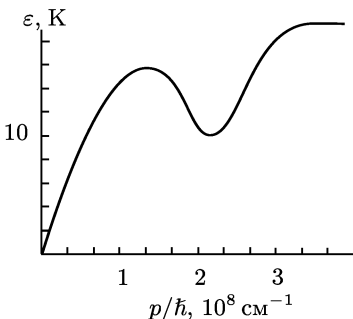


Рис. 2.

$$\varepsilon = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2m^*}, \quad (22.6)$$

где $\Delta = \varepsilon(p_0)$ и m^* — постоянные. Квазичастицы этого типа называют *ротонами*. Подчеркнем, однако, что оба типа квазичастиц — фононы и ротонны — отвечают лишь разным участкам одной и той же кривой, между которыми имеется непрерывный переход.

Эмпирические значения параметров энергетического спектра жидкого гелия (экстраполированные к нулевому давлению при плотности $\rho = 0,145 \text{ г/см}^3$) таковы²⁾:

$$\begin{aligned} u &= 2,4 \cdot 10^4 \text{ см/с}, & \Delta &= 8,6 \text{ К}, \\ p_0/\hbar &= 1,9 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}, & m^* &= 0,14 m(^4\text{He}). \end{aligned} \quad (22.7)$$

¹⁾ Эта форма спектра была впервые предложена Л. Д. Ландау (1947) на основании анализа экспериментальных данных о термодинамических величинах жидкого гелия; в дальнейшем она была подтверждена экспериментально опытами по рассеянию нейтронов.

Качественная теория спектра такого типа дана Фейнманом (R. P. Feynman, 1954); см. ниже примечание на с. 471.

²⁾ Укажем также значение химического потенциала жидкого гелия при $T = 0$: $\mu = -7,16 \text{ К}$.

Поскольку энергия ротона всегда содержит величину Δ , большую по сравнению с T — при температурах достаточно низких для того, чтобы можно было говорить о «ротонном газе», — то последний можно описывать вместо распределения Бозе распределением Больцмана. Соответственно этому, для вычисления ротонной части термодинамических величин жидкого гелия исходим из формулы для свободной энергии больцмановского газа

$$F = -NT \ln \frac{eV}{N} \int e^{-\varepsilon/T} d\tau, \quad d\tau = \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

(см. V, § 41). При этом под N в этой формуле надо понимать число ротонов в жидкости. Но это число само определяется условием термодинамического равновесия, т. е. условием минимальности свободной энергии. Приравняв $\partial F/\partial N$ нулю, найдем для числа ротонов

$$N_p = V \int e^{-\varepsilon/T} d\tau \quad (22.8)$$

(что соответствует, естественно, больцмановскому распределению с равным нулю химическим потенциалом). Соответствующее значение свободной энергии

$$F_p = -VT \int e^{-\varepsilon/T} d\tau.$$

В эти формулы надо подставить (22.6). Поскольку $p_0^2 \gg m^*T$, то при интегрировании по dp можно вынести множитель p^2 из-под знака интеграла, заменив его с достаточной точностью на p_0^2 . При интегрировании экспоненциального выражения можно распространить область интегрирования от $-\infty$ до ∞ . В результате получим

$$N_p = \frac{2(m^*T)^{1/2} p_0^2 V}{(2\pi)^{3/2} \hbar^3} e^{-\Delta/T}, \quad F_p = -TN_p. \quad (22.9)$$

Отсюда вклад ротонов в энтропию и теплоемкость:

$$S_p = N_p \left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta}{T} \right), \quad C_p = N_p \left(\frac{3}{4} + \frac{\Delta}{T} + \frac{\Delta^2}{T^2} \right). \quad (22.10)$$

Мы видим, что температурная зависимость ротонной части термодинамических величин в основном экспоненциальна. Поэтому при достаточно низких температурах (для жидкого гелия — ниже примерно чем 0,8) ротонная часть меньше фононной, а при более высоких температурах положение меняется, и ротонный вклад превосходит фононный.

§ 23. Сверхтекучесть

Квантовая жидкость с энергетическим спектром описанного типа обладает замечательным свойством так называемой *сверхтекучести* — свойством протекать по узким капиллярам или щелям, не обнаруживая вязкости. Начнем с рассмотрения жидкости при абсолютном нуле, когда она находится в своем нормальном, невозбужденном состоянии.

Рассмотрим жидкость, текущую по капилляру с постоянной скоростью $\mathbf{v}$. Наличие вязкости проявилось бы в том, что благодаря трению о стенки трубки и трению внутри самой жидкости происходила бы диссипация кинетической энергии жидкости и постепенное замедление потока.

Нам будет удобнее рассматривать течение в системе координат, движущейся вместе с жидкостью. В этой системе гелий покоится, а стенки капилляра движутся со скоростью $-\mathbf{v}$. При наличии вязкости покоящийся гелий тоже должен был бы начать двигаться. Физически очевидно, что увлечение жидкости стенками трубки не может привести с самого начала к движению жидкости как целого. Появление движения должно начаться с постепенного возбуждения внутренних движений, т. е. с появления в жидкости элементарных возбуждений.

Предположим, что в жидкости появляется одно элементарное возбуждение с импульсом $\mathbf{p}$ и энергией $\varepsilon(p)$. Тогда энергия E_0 жидкости (в системе координат, в которой она первоначально покоилась) сделается равной энергии этого возбуждения ε , а ее импульс $\mathbf{P}_0$ — импульсу $\mathbf{p}$. Перейдем теперь обратно к системе координат, в которой покоится капилляр. Согласно известным из механики формулам преобразования энергии и импульса, имеем для энергии E и импульса P жидкости в этой системе

$$\begin{aligned} E &= E_0 + \mathbf{P}_0 \mathbf{v} + \frac{Mv^2}{2}, \\ \mathbf{P} &= \mathbf{P}_0 + M\mathbf{v}, \end{aligned} \quad (23.1)$$

где M — масса жидкости. Подставив ε , $\mathbf{p}$ вместо E_0 , $\mathbf{P}_0$, напомним

$$E = \varepsilon + \mathbf{p} \mathbf{v} + \frac{Mv^2}{2}. \quad (23.2)$$

Член $Mv^2/2$ представляет собой первоначальную кинетическую энергию текущей жидкости; выражение же $\varepsilon + \mathbf{p} \mathbf{v}$ есть изменение энергии благодаря появлению возбуждения. Это изменение должно быть отрицательным, поскольку энергия движущейся жидкости должна уменьшаться

$$\varepsilon + \mathbf{p} \mathbf{v} < 0.$$

При заданном значении p величина, стоящая в левой стороне неравенства, имеет наименьшее значение при антипараллельных $\mathbf{p}$ и $\mathbf{v}$; поэтому во всяком случае должно быть $\varepsilon - p\mathbf{v} < 0$, т. е.

$$v > \frac{\varepsilon}{p}. \quad (23.3)$$

Это неравенство должно выполняться хотя бы для некоторых значений импульса p элементарного возбуждения. Поэтому окончательное условие возможности появления возбуждений в движущейся по капилляру жидкости мы получим, найдя минимум величины ε/p . Геометрически отношение ε/p есть тангенс угла наклона прямой, проведенной из начала координат (в плоскости $p\varepsilon$) в некоторую точку кривой $\varepsilon = \varepsilon(p)$. Его минимальное значение определится, очевидно, точкой, в которой проведенная из начала координат прямая касательна к кривой. Если это минимальное значение отлично от нуля, то при не слишком больших скоростях течения в жидкости не смогут появиться возбуждения. Это значит, что ее течение не будет замедляться, т. е. жидкость обнаружит явление сверхтекучести.

Полученное условие наличия сверхтекучести по существу сводится к требованию, чтобы кривая $\varepsilon = \varepsilon(p)$ не касалась оси абсцисс в самом начале координат (отвлекаясь от маловероятной возможности касания ею этой оси в дальнейшем своем ходе). Поэтому к сверхтекучести приведет по существу всякий спектр, в котором достаточно малые возбуждения являются фононами.

Рассмотрим теперь ту же жидкость при температуре, отличной от абсолютного нуля (хотя и близкую к нему). В этом случае жидкость не находится в основном состоянии — она содержит возбуждения. Приведенные выше рассуждения сами по себе остаются в силе, поскольку в них не было использовано непосредственно то обстоятельство, что жидкость находилась первоначально в основном состоянии. Движение жидкости относительно стенок трубки при выполнении указанного условия по-прежнему не сможет привести к появлению в ней новых элементарных возбуждений. Необходимо, однако, выяснить, каким образом будет проявляться наличие возбуждений, уже существующих в жидкости.

Представим себе для этого, что «газ квазичастиц» движется как целое относительно жидкости поступательно со скоростью $\mathbf{v}$. Функция распределения для движущегося как целое газа получается из функции распределения $n(\varepsilon)$ неподвижного газа путем замены энергии ε частицы величиной $\varepsilon - \mathbf{p}\mathbf{v}$, где $\mathbf{p}$ — импульс частицы. Для обычного газа это обстоятельство является непосредственным следствием принципа относительности Галилея и доказывается просто путем перехода от одной системы координат

к другой. В данном же случае такие соображения непосредственно не применимы, так как газ квазичастиц движется не в пустоте, а «сквозь жидкость». Тем не менее утверждение остается в силе, как это вытекает из следующих рассуждений.

Пусть газ возбуждений движется относительно жидкости со скоростью $\mathbf{v}$. Рассмотрим систему координат, в которой газ как целое покоится, а жидкость соответственно движется со скоростью $-\mathbf{v}$ (система K). Согласно формуле преобразования (23.1), энергия E жидкости в системе K связана с энергией E_0 в системе, в которой жидкость покоится (система K_0), соотношением

$$E = E_0 - \mathbf{P}_0 \mathbf{v} + \frac{Mv^2}{2}.$$

Пусть в жидкости появляется элементарное возбуждение с энергией $\varepsilon(p)$ (в системе K_0). Тогда дополнительная энергия жидкости в системе K будет $\varepsilon - \mathbf{p}\mathbf{v}$, чем и доказывается сделанное утверждение¹).

Таким образом, полный импульс газа квазичастиц (отнесенный к единице объема) будет

$$\mathbf{P} = \int \mathbf{p} n(\varepsilon - \mathbf{p}\mathbf{v}) d\tau.$$

Предположим, что скорость $\mathbf{v}$ мала, и разложим подынтегральное выражение по степеням $\mathbf{p}\mathbf{v}$. Член нулевого порядка исчезает (при интегрировании по направлениям вектора $\mathbf{p}$), и остается

$$\mathbf{P} = - \int \mathbf{p}(\mathbf{p}\mathbf{v}) \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\tau,$$

или, после усреднения по направлениям $\mathbf{p}$,

$$\mathbf{P} = \frac{\mathbf{v}}{3} \int \left(-\frac{dn}{d\varepsilon} \right) p^2 d\tau. \quad (23.4)$$

Прежде всего мы видим, что движение газа квазичастиц сопровождается переносом некоторой массы: эффективная масса единицы объема газа определяется коэффициентом пропорциональности между импульсом $\mathbf{P}$ и скоростью $\mathbf{v}$ в (23.4). С другой стороны, при течении жидкости, скажем, по капилляру ничто не

¹) Для квазичастиц в бозе-жидкости $n(\varepsilon)$ — распределение (22.2). Обратим внимание на то, что условие сверхтекучести ($v < \varepsilon/p$) как раз совпадает с условием, обеспечивающим положительность и конечность выражения $n(\varepsilon - \mathbf{p}\mathbf{v})$ для всех энергий.

мешает квазичастицам сталкиваться со стенками трубки и обмениваться с ними импульсом. В результате газ возбуждений будет остановлен, как это произошло бы со всяким обычным газом, протекающим по капилляру.

Таким образом, мы приходим к следующему основному результату. При отличных от нуля температурах часть массы жидкости будет вести себя как нормальная вязкая жидкость, «цепляющаяся» при движении о стенки сосуда; остальная же часть массы будет вести себя как не обладающая вязкостью сверхтекучая жидкость. При этом весьма существенно, что между обеими этими движущимися «друг через друга» частями массы жидкости нет трения, т. е. не происходит передачи импульса от одной из них к другой. Действительно, само наличие такого взаимного движения одной части массы жидкости относительно другой мы получили при рассмотрении статистического равновесия в равномерно движущемся газе возбуждений. Но если какое-либо относительное движение может иметь место в состоянии теплового равновесия, то это значит, что оно не сопровождается трением.

Подчеркнем, что рассмотрение жидкости как «смеси» нормальной и сверхтекучей ее «частей» является не более, чем способом выражения, удобным для описания явлений, происходящих в квантовой жидкости; оно отнюдь не означает возможности реального разделения жидкости на две части. Как и всякое описание квантовых явлений в классических терминах, оно не является вполне адекватным. В действительности надо говорить, что в квантовой бозе-жидкости могут существовать одновременно два движения, каждое из которых связано со своей эффективной массой (так что сумма этих масс равна полной истинной массе жидкости). Одно из этих движений «нормально», т. е. обладает теми же свойствами, что и движение обычной вязкой жидкости; другое же — «сверхтекучее». Оба эти движения происходят без передачи импульса от одного к другому.

Таким образом, в гидродинамическом смысле плотность бозе-жидкости может быть представлена в виде суммы $\rho = \rho_n + \rho_s$ нормальной и сверхтекучей частей, каждая из которых связана со своей гидродинамической скоростью — $\mathbf{v}_n$ и $\mathbf{v}_s$. Важным свойством сверхтекучего движения является его потенциальность:

$$\text{rot } \mathbf{v}_s = 0. \quad (23.5)$$

Это свойство является макроскопическим выражением того факта, что элементарные возбуждения с большой длиной волны (т. е. с малыми импульсами) являются звуковыми квантами — фононами. Поэтому макроскопическая гидродинамика сверхтекучего движения не должна допускать никаких других колебаний,

кроме звуковых¹⁾, что и обеспечивается условием (23.5) (мы еще вернемся к его обоснованию в § 26)²⁾.

При $T = 0$ нормальная часть плотности $\rho_n = 0$; жидкость может совершать только сверхтекучее движение. При отличных же от нуля температурах ρ_n дается формулой (23.4):

$$\rho_n = \frac{1}{3} \int \left(-\frac{dn}{d\varepsilon} \right) p^2 d\tau. \quad (23.6)$$

Для вычисления фононного вклада в ρ_n полагаем в (23.6) $\varepsilon = up$:

$$(\rho_n)_\Phi = -\frac{1}{3u} \int_0^\infty \frac{dn}{dp} p^2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}$$

и после интегрирования по частям находим

$$(\rho_n)_\Phi = \frac{4}{3u} \int_0^\infty \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{4}{3u^2} \int \varepsilon n d\tau.$$

Оставшийся здесь интеграл не что иное, как энергия единицы объема фононного газа; взяв эту величину из (22.4), получим окончательно

$$(\rho_n)_\Phi = \frac{4E_\Phi}{3u^2 V} = \frac{2\pi^2 T^4}{45\hbar^3 u^5}. \quad (23.7)$$

Для вычисления же ротонного вклада в ρ_n замечаем, что поскольку ротонны можно описывать распределением Больцмана, то для них $dn/d\varepsilon = -n/T$, и из (23.6) имеем

$$(\rho_n)_\text{р} = \frac{1}{3T} \int p^2 n d\tau = \frac{\overline{p^2}}{3T} \frac{N_\text{р}}{V}.$$

Положив, с достаточной точностью, $\overline{p^2} = p_0^2$ и взяв $N_\text{р}$ из (22.9), получим

$$(\rho_n)_\text{р} = \frac{p_0^2 N_\text{р}}{3TV} = \frac{2(m^*)^{1/2} p_0^4}{3(2\pi)^{3/2} T^{1/2} \hbar^3} e^{-\Delta/T}. \quad (23.8)$$

При самых низких температурах фононный вклад в ρ_n велик по сравнению с ротонным. Они сравниваются примерно при 0,6 К,

¹⁾ Подразумевается, что жидкость не ограничена. При наличии свободной поверхности возможны также поверхностные капиллярные волны (что приводит к определенной температурной зависимости поверхностного натяжения — см. задачу 1).

²⁾ Подробное изложение гидродинамики сверхтекучей жидкости дается в т. VI).

а при больших температурах ротонный вклад становится преобладающим.

По мере повышения температуры все большая часть массы жидкости становится нормальной. В точке, в которой достигается равенство $\rho_n = \rho$, полностью исчезает свойство сверхтекучести. Это — так называемая λ -точка жидкости, представляющая собой точку фазового перехода второго рода¹⁾. Что касается количественных формул (23.7), (23.8), то они, конечно, неприменимы вблизи λ -точки, где концентрация квазичастиц становится большой, так как даже самое понятие о них в значительной степени теряет смысл.

Остановимся еще на вопросе о поведении атомов растворенных в жидком гелии посторонних веществ; концентрация примеси предполагается настолько малой, что ее атомы можно считать невзаимодействующими друг с другом (Л. Д. Ландау, И. Я. Пomerанчук, 1948).

Наличие постороннего атома в жидкости приводит к появлению новой ветви энергетического спектра, соответствующей движению этого атома через жидкость; разумеется, ввиду сильного взаимодействия атома примеси с атомами жидкости, это движение является в действительности коллективным эффектом, в котором принимают участие также и атомы жидкости. Этому движению можно приписать некоторый результирующий сохраняющийся импульс $\mathbf{p}$. Таким образом, в жидкости появляются квазичастицы нового типа (в числе, равном числу атомов примеси), энергия которых $\varepsilon_{\text{пр}}(p)$ является определенной функцией импульса. В тепловом равновесии энергии этих квазичастиц будут сосредоточены вблизи наименьшего из минимумов функции $\varepsilon_{\text{пр}}(p)$. Фактически речь идет о примеси изотопа ^3He , и эмпирические данные показывают, что такой минимум лежит при $p = 0$; вблизи него энергия квазичастицы имеет вид

$$\varepsilon_{\text{пр}}(p) = \frac{p^2}{2m_{\text{пр}}^*} \quad (23.9)$$

с эффективной массой $m_{\text{пр}}^* = 2,8$ масс атома ^3He .

Примесные квазичастицы взаимодействуют с фононами и ротонами, сталкиваясь с ними, и, таким образом, входят в состав нормальной части жидкости. Ввиду малой концентрации этих квазичастиц их тепловое распределение — больцмановское, и их

¹⁾ Жидкий гелий при температурах ниже этой точки называют гелием II. λ -точки образуют линию на фазовой диаграмме в плоскости PT . Эта линия пересекает линию равновесия жидкости с паром при температуре 2,19 К.

вклад в ρ_n (определенный согласно (23.6)) дается формулой

$$(\rho_n)_{\text{пр}} = \frac{N_{\text{пр}}}{V} \frac{\bar{p}^2}{3T} = \frac{N_{\text{пр}}}{V} m_{\text{пр}}^*, \quad (23.10)$$

где $N_{\text{пр}}/V$ — число атомов примеси в единице объема.

Задачи

1. Найти предельный закон температурной зависимости коэффициента поверхностного натяжения α жидкого гелия вблизи абсолютного нуля (*K. R. Atkins*, 1953).

Решение. Коэффициент α есть свободная энергия единицы площади поверхности жидкости (см. V, (154.6)). Эта величина вычисляется по формуле V, (64.1), в которой частоты ω_α относятся теперь к поверхностным колебаниям. В двумерном случае переход от суммирования к интегрированию (по волновым векторам колебаний) осуществляется введением множителя $d^2k/(2\pi)^2$ или $2\pi k dk/(2\pi)^2$. После интегрирования по частям найдем

$$\alpha = \alpha_0 + T \int \ln(1 - e^{-\hbar\omega/T}) \frac{k dk}{2\pi} = \alpha_0 - \frac{\hbar}{4\pi} \int \frac{k^2 d\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1}$$

(α — поверхностное натяжение при $T = 0$). При достаточно низких температурах существенны лишь колебания с малыми частотами, т. е. с большими длинами волн. Такие колебания представляют собой гидродинамические капиллярные волны, для которых $\omega^2 = \alpha k^3/\rho \approx \alpha_0 k^3/\rho$ (ρ — плотность жидкости). Поэтому

$$\alpha = \alpha_0 - \frac{\hbar}{4\pi} \left(\frac{\rho}{\alpha_0} \right)^{2/3} \int_0^\infty \frac{\omega^{4/3} d\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1}$$

(быстрая сходимость интеграла позволяет заменить верхний предел бесконечностью). Вычисление интеграла (см. примечание в V, § 58) приводит к результату

$$\alpha = \alpha_0 - \frac{T^{7/3} \rho^{2/3}}{4\pi \hbar^{4/3} \alpha_0^{2/3}} \Gamma\left(\frac{7}{3}\right) \zeta\left(\frac{7}{3}\right) = \alpha_0 - 0,13 \frac{T^{7/3} \rho^{2/3}}{\hbar^{4/3} \alpha_0^{2/3}}.$$

Этот результат относится к жидкому ^4He при температурах настолько низких, что всю массу жидкости можно считать сверхтекучей¹⁾.

2. Найти закон дисперсии $\varepsilon_{\text{пр}}(\mathbf{p})$ для примесных частиц в движущейся сверхтекучей жидкости, если этот закон $\varepsilon_{\text{пр}}^{(0)}(p)$ известен в неподвижной жидкости (*J. Bardeen, G. Baym, D. Pines*, 1967).

Решение. После добавления к неподвижной жидкости (при $T = 0$) атома примеси (с массой m) с импульсом $\mathbf{p}_0$ ее энергия и импульс (в системе координат, в которой жидкость первоначально покоилась) есть $E_0 = \varepsilon_{\text{пр}}^{(0)}(p_0)$,

¹⁾ В ферми-жидкости (жидкий ^3He) капиллярные волны рассмотренного типа (как и объемные волны обычного звука) не существуют ввиду неограниченного возрастания вязкости при $T \rightarrow 0$.

$\mathbf{P} = \mathbf{p}_0$. В системе же координат, в которой жидкость движется со скоростью $\mathbf{v}$, имеем, согласно (23.1),

$$E = \varepsilon_{\text{пр}}^{(0)}(p_0) + \mathbf{p}_0 \mathbf{v} + \frac{1}{2} (M + m) v^2, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p}_0 + (M + m) \mathbf{v}.$$

Отсюда видно, что изменения энергии и импульса движущейся жидкости при добавлении к ней атома примеси равны

$$\varepsilon_{\text{пр}} = \varepsilon_{\text{пр}}^{(0)}(p_0) + \mathbf{p}_0 \mathbf{v} + \frac{m v^2}{2}, \quad \mathbf{p} = \mathbf{p}_0 + m \mathbf{v}.$$

Выразив $\varepsilon_{\text{пр}}$ через $\mathbf{p}$, находим

$$\varepsilon_{\text{пр}}(\mathbf{p}) = \varepsilon_{\text{пр}}^{(0)}(\mathbf{p} - m \mathbf{v}) + \mathbf{p} \mathbf{v} - \frac{m v^2}{2}.$$

При малых значениях v , с точностью до членов первого порядка, для спектра $\varepsilon_{\text{пр}}^{(0)}(p)$ вида (23.9) имеем

$$\varepsilon_{\text{пр}}(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m_{\text{пр}}^*} + \mathbf{v} \mathbf{p} \left(1 - \frac{m}{m_{\text{пр}}^*} \right).$$

§ 24. Фононы в жидкости

При переходе от классической картины звуковых волн к квантовому представлению о фононах гидродинамические величины (плотность, скорость жидкости и т. п.) заменяются операторами, выражающимися через операторы $\hat{c}_{\mathbf{k}}$, $\hat{c}_{\mathbf{k}}^+$ уничтожения и рождения фононов. Выведем формулы, дающие эти выражения.

Напомним, что в классическом описании звуковой волны плотность жидкости испытывает малые колебания с частотами и волновыми векторами, связанными друг с другом соотношением $\omega = uk$. Величиной того же порядка малости, что и переменная часть плотности $\rho' = \rho - \rho_0$ (ρ_0 — равновесное значение плотности), является скорость жидкости $\mathbf{v}$. Движение жидкости в волне потенциально, т. е. может быть описано скалярным потенциалом скорости φ , определяющим скорость согласно

$$\mathbf{v} = \nabla \varphi. \quad (24.1)$$

Скорость и плотность связаны друг с другом уравнением непрерывности $\partial \rho' / \partial t = -\text{div}(\rho \mathbf{v}) \approx -\rho_0 \text{div} \mathbf{v}$, или

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} = -\rho_0 \Delta \varphi. \quad (24.2)$$

Энергия жидкости в звуковой волне дается интегралом

$$E = \int \left(\frac{\rho_0 \mathbf{v}^2}{2} + \frac{u^2 \rho'^2}{2\rho_0} \right) d^3 x. \quad (24.3)$$

Первый член в подынтегральном выражении есть плотность кинетической, а второй — внутренней энергии жидкости; оба квадратичны по малым величинам $\mathbf{v}$ и ρ' .

Дальнейшую процедуру квантования можно было бы провести полностью аналогично тому, как это было сделано для фононов в твердых кристаллах (см. V, § 72). Мы, однако, изберем здесь несколько иной путь, демонстрирующий некоторые поучительные методические моменты. Рассмотрим сначала операторы плотности и скорости жидкости, выраженные через микроскопические переменные — координаты частиц.

В классической теории плотности ρ и плотность потока массы жидкости $\mathbf{j}$ могут быть представлены суммами

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_a m_a \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}), \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sum_a \mathbf{p}_a \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}),$$

взятыми по всем частицам ($\mathbf{r}_a$ и $\mathbf{p}_a$ — радиус-векторы и импульсы частиц); интегралы от этих функций по какому-либо объему дают полную массу и полный импульс жидкости в этом объеме. При переходе к квантовой теории эти функции заменяются соответствующими операторами. Оператор плотности имеет тот же вид

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_a m_a \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}), \quad (24.4)$$

а оператор плотности потока

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_a \{ \hat{\mathbf{p}}_a \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}}_a \}, \quad (24.5)$$

где $\hat{\mathbf{p}}_a = -i\hbar \nabla_a$ — оператор импульса частицы¹).

Найдем правило коммутации между операторами $\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})$ и $\hat{\rho}(\mathbf{r}')$, взятыми в точках $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$; при этом можно, для краткости, рассматривать всего по одному члену в суммах (24.4), (24.5), поскольку операторы, соответствующие разным частицам, коммутативны. При раскрытии коммутатора операторы вида $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) \nabla_1 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}')$ преобразуются следующим образом:

$$\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) \nabla_1 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) (\nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) + \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}') \nabla_1,$$

где в первом члене $(\nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'))$ означает просто градиент δ -функции; ввиду наличия множителя $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r})$ в этом члене можно писать в нем $(\nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'))$ вместо $(\nabla_1 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'))$. В результате

¹) Пусть для простоты, система состоит всего из одной частицы. Усреднение оператора $\hat{\rho}(\mathbf{r}) = m \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r})$ по состоянию с волновой функцией $\psi(\mathbf{r}_1)$ дает $\int \psi^*(\mathbf{r}_1) \hat{\rho} \psi(\mathbf{r}_1) d^3 x_1 = m |\psi(\mathbf{r})|^2$, как и должно быть. Аналогичным образом, усреднение оператора $\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})$ дает правильное выражение плотности потока

$$(\hbar/2i) \{ \psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) \nabla \psi^*(\mathbf{r}) \}.$$

получим

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\hat{\rho}(\mathbf{r}') - \hat{\rho}(\mathbf{r}')\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = -i\hbar\hat{\rho}(\nabla\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')). \quad (24.6)$$

Введем теперь вместо $\hat{\mathbf{j}}$ оператор скорости жидкости $\hat{\mathbf{v}}$, согласно определению,

$$\hat{\mathbf{j}} = \frac{1}{2}(\hat{\rho}\hat{\mathbf{v}} + \hat{\mathbf{v}}\hat{\rho}).$$

Правило коммутации операторов $\hat{\rho}$ и $\hat{\mathbf{v}}$ определяется требованием, чтобы для коммутатора $\hat{\rho}$ и $\hat{\mathbf{j}}$ получалось выражение (24.6). Легко проверить, что для этого надо положить

$$\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r})\hat{\rho}(\mathbf{r}') - \hat{\rho}(\mathbf{r}')\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) = -i\hbar(\nabla\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')).$$

(при этом надо учесть очевидную коммутативность операторов $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ и $\hat{\rho}(\mathbf{r}')$). Наконец, положив $\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) = \nabla\hat{\varphi}(\mathbf{r})$, получаем правило коммутации между операторами плотности и потенциала скорости

$$\hat{\varphi}(\mathbf{r})\hat{\rho}'(\mathbf{r}') - \hat{\rho}'(\mathbf{r}')\hat{\varphi}(\mathbf{r}) = -i\hbar\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (24.7)$$

(вместо $\hat{\rho}$ можно, конечно, писать здесь оператор $\hat{\rho}' = \hat{\rho} - p_0$ переменной части плотности). Правило (24.7) аналогично правилу коммутации между координатой и импульсом частицы; в этом смысле величины $\hat{\rho}'$ и $\hat{\varphi}$ играют в данном случае роль канонически сопряженных обобщенных «координат» и «импульсов».

Используя выражения (24.4), (24.5) для установления правила (24.7), напомним теперь операторы $\hat{\varphi}$ и $\hat{\rho}'$ в представлении вторичного квантования (т. е. выразим их через операторы уничтожения и рождения фононов), потребовав при этом, чтобы они удовлетворяли правилу (24.7). Для этого пишем

$$\hat{\varphi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} (A_{\mathbf{k}}\hat{c}_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + A_{\mathbf{k}}^*\hat{c}_{\mathbf{k}}^+e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}})$$

с пока не определенными коэффициентами $A_{\mathbf{k}}$; суммирование производится по всем значениям волнового вектора, пробегаемым для жидкости в большом, но конечном объеме V ¹⁾. Операторы $\hat{c}_{\mathbf{k}}$, $\hat{c}_{\mathbf{k}}^+$ удовлетворяют бозевским правилам коммутации

$$\hat{c}_{\mathbf{k}}\hat{c}_{\mathbf{k}'}^+ - \hat{c}_{\mathbf{k}'}^+\hat{c}_{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (24.8)$$

¹⁾ В отличие от ψ -операторов частиц, оператор вещественной величины φ эрмитов и содержит одновременно операторы рождения и уничтожения фононов. Напомним, что это свойство (как и такое же свойство операторов поля в квантовой электродинамике) связано с несохранением числа «частиц» в фононном поле.

Напомним для дальнейших ссылок, что отличные от нуля матричные элементы этих операторов

$$\langle n_{\mathbf{k}} - 1 | \hat{c}_{\mathbf{k}} | n_{\mathbf{k}} \rangle = \langle n_{\mathbf{k}} | \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ | n_{\mathbf{k}} - 1 \rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}}}, \quad (24.9)$$

где $n_{\mathbf{k}}$ — числа заполнения фоновых состояний.

В дальнейшем нам понадобится, однако, не предингеровский оператор $\hat{\varphi}(\mathbf{r})$, а гейзенберговский $\hat{\varphi}(t, \mathbf{r})$. Он получается из $\hat{\varphi}(\mathbf{r})$ просто путем введения множителей $\exp(\pm i\omega t)$ с частотами $\omega = uk$ в каждый член суммы

$$\hat{\varphi}(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} (A_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{kr} - kut)} + A_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i(\mathbf{kr} - kut)})$$

(ср. сказанное по этому поводу для ψ -операторов в начале § 9). Оператор же плотности $\hat{\rho}'(t, \mathbf{r})$ должен быть связан с оператором $\hat{\varphi}(t, \mathbf{r})$ соотношением (24.2) и поэтому дается такой же суммой с множителями $iA_{\mathbf{k}}\rho_0 k/u$ вместо $A_{\mathbf{k}}$. После этого множители $A_{\mathbf{k}}$ надо определить так, чтобы выполнялось правило коммутации (24.7). В результате получаются следующие окончательные выражения:

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}(t, \mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar u}{2V\rho_0 k} \right)^{1/2} (\hat{c}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{kr} - ukt)} + \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i(\mathbf{kr} - ukt)}), \\ \hat{\rho}'(t, \mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} i \left(\frac{\rho_0 \hbar k}{2Vu} \right)^{1/2} (\hat{c}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{kr} - ukt)} - \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i(\mathbf{kr} - ukt)}). \end{aligned} \quad (24.10)$$

Действительно, подставив эти выражения в левую часть правила (24.7), с учетом (24.8) получим требуемую δ -функцию

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} (\hat{c}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ - \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} &= \\ &= -\frac{i\hbar}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \rightarrow -\frac{i\hbar}{V} \int e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} = -i\hbar \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned}$$

Легко убедиться также, что гамильтониан жидкости, получающийся подстановкой $\hat{\mathbf{v}} = \nabla \hat{\varphi}$ и $\hat{\rho}'$ вместо $\mathbf{v}$ и ρ' в интеграл (24.3), имеет, как и следовало, вид

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} u\hbar k \left(\hat{c}_{\mathbf{k}}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right);$$

его собственные значения равны $\sum u\hbar k (n_{\mathbf{k}} + 1/2)$ в соответствии с представлением о фонах с энергиями $\varepsilon = u\hbar k$.

Выражение (24.3) для энергии жидкости в звуковой волне представляет собой первые (после нулевого) члены разложения

точного выражения

$$E = \int \left[\frac{\rho \mathbf{v}^2}{2} + \rho e(\rho) \right] d^3x$$

(где $e(\rho)$ — внутренняя энергия единицы массы жидкости). Роль точного гамильтониана жидкости играет этот интеграл, в котором $\mathbf{v}$ и ρ заменены операторами $\hat{\mathbf{v}} = \nabla \hat{\varphi}$ и $\hat{\rho} = \rho_0 + \hat{\rho}'$ с $\hat{\varphi}$ и $\hat{\rho}'$ из (24.10)

$$\hat{H} = \int \left[\frac{\hat{\mathbf{v}} \hat{\rho} \hat{\mathbf{v}}}{2} + \hat{\rho} e(\hat{\rho}) \right] d^3x \quad (24.11)$$

(оператор кинетической энергии написан в симметризованном виде $\hat{\mathbf{v}} \hat{\rho} \hat{\mathbf{v}}/2$, чтобы быть эрмитовым). При этом существенно, что именно ρ и φ являются канонически сопряженными «обобщенными координатами и импульсами», через которые должен быть выражен гамильтониан. Это видно из того, что правило коммутации (24.7), которому удовлетворяют операторы (24.10), является точным — в его выводе малость колебаний нигде не использовалась.

Члены более высоких (третьей и т. д.) степеней в разложении этого гамильтониана выражают собой ангармоничность звуковых колебаний, а в терминах фононной картины — описывают взаимодействие фононов. Эти члены имеют матричные элементы для переходов с одновременным изменением нескольких чисел заполнения фононов и тем самым играют роль возмущения, вызывающего различные процессы рассеяния и распада фононов. При этом матричные элементы самих операторов $\hat{c}_{\mathbf{k}}$ и $\hat{c}_{\mathbf{k}}^+$ имеют, разумеется, прежний вид (24.9), поскольку (как это всегда делается в теории возмущений) используется представление, в котором диагонален невозмущенный гамильтониан. Приведем здесь выражения членов третьего и четвертого порядков

$$\hat{H}^{(3)} = \int \left[\frac{\hat{\mathbf{v}} \hat{\rho}' \hat{\mathbf{v}}}{2} + \left(\frac{d}{d\rho_0} \frac{u^2}{\rho_0} \right) \frac{\hat{\rho}'^3}{6} \right] d^3x, \quad (24.12)$$

$$\hat{H}^{(4)} = \frac{1}{24} \left(\frac{d^2}{d\rho_0^2} \frac{u^2}{\rho_0} \right) \int \hat{\rho}'^4 d^3x. \quad (24.13)$$

§ 25. Вырожденный почти идеальный бозе-газ

Основные свойства энергетического спектра бозевского типа ясно видны на модели слабо неидеального бозе-газа при близких к нулю температурах. Эта модель будет рассмотрена в этом параграфе аналогично тому, как это было сделано в §6 для

ферми-газа¹⁾. Все сказанное в § 6 в связи с общей характеристикой моделей вырожденного почти идеального газа относится и к настоящему случаю. В частности, условие слабой неидеальности (газовый параметр $a(N/V)^{1/3} \ll 1$; a — длина рассеяния) может быть по-прежнему сформулировано в виде условия (6.1) малости импульсов частиц: $pa/\hbar \ll 1^2)$.

Гамильтониан системы парно взаимодействующих бозонов (которые мы будем предполагать бесспиновыми) имеет вид, отличающийся от (6.6) лишь отсутствием спиновых индексов:

$$\hat{H} = \sum \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \sum \langle \mathbf{p}'_1 \mathbf{p}'_2 | U | \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \rangle \hat{a}_{\mathbf{p}'_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}'_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_1} \quad (25.1)$$

(суммирование по всем импульсам, фигурирующим в индексах). Операторы же уничтожения и рождения частиц удовлетворяют теперь правилам коммутации

$$\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ - \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} = 1.$$

Как и в § 6, снова заменяем, в соответствии с предположением о малости импульсов, все матричные элементы в (25.1) их значением при нулевых импульсах; тогда

$$\hat{H} = \sum \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{U_0}{2V} \sum \hat{a}_{\mathbf{p}'_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}'_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_1}. \quad (25.2)$$

Исходным пунктом применения теории возмущений к этому гамильтониану является следующее замечание. В основном состоянии идеального бозе-газа все частицы находятся в *конденсате* — состоянии нулевой энергии; числа заполнения $N_{\mathbf{p}=0} \equiv \equiv N_0 = N$, $N_{\mathbf{p}} = 0$ при $\mathbf{p} \neq 0$ (см. V, § 62). В почти идеальном же газе в основном и в слабо возбужденных состояниях числа $N_{\mathbf{p}}$ отличны от нуля, но очень малы по сравнению с макроскопически большим числом N_0 . Тот факт, что величина $\hat{a}_0^+ \hat{a}_0 = N_0 \approx N$ весьма велика по сравнению с единицей, означает, что выражение

$$\hat{a}_0 \hat{a}_0^+ - \hat{a}_0^+ \hat{a}_0 = 1$$

¹⁾ Излагаемый ниже метод принадлежит *Н. Н. Боголюбову* (1947). Применение им этого метода к бозе-газу явилось первым примером последовательного микроскопического вывода энергетического спектра «квантовых жидкостей». В течение длительного времени эти результаты имели главным образом теоретическое значение. В 1995 г., однако, конденсация Бозе-Эйнштейна была получена несколькими группами экспериментаторов в поляризованных парах щелочных металлов, удерживаемых в «магнитных ловушках». Эти объекты описываются рассматриваемой теорией.

²⁾ Мы увидим ниже, что в вырожденном бозе-газе основная масса частиц (вне «конденсата») обладает импульсами $p \sim \hbar \sqrt{aN/V}$, для которых указанное неравенство действительно справедливо.

мало по сравнению с самими $\hat{a}_0, \hat{a}_0^+$, и потому можно рассматривать последние как обычные (равные $\sqrt{N_0}$) числа, пренебрегая их некоммутативностью.

Применение теории возмущений означает теперь формально разложение четверной суммы в (25.2) по степеням малых величин $\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}}^+$ ($\mathbf{p} \neq 0$). Нулевой член разложения равен

$$\hat{a}_0^+ \hat{a}_0^+ \hat{a}_0 \hat{a}_0 = a_0^4. \quad (25.3)$$

Члены первого порядка отсутствуют (ввиду невозможности соблюдения в них закона сохранения импульса). Члены второго порядка

$$a_0^2 \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+ + 4\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}). \quad (25.4)$$

Ограничиваясь точностью до величин второго порядка, можно заменить в (25.4) $a_0^2 = N_0$ на полное число частиц N . В члене же (25.3) следует учесть более точное соотношение

$$a_0^2 + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} = N.$$

В результате сумма членов (25.3), (25.4) становится равной

$$N^2 + N \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+ + 2\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}),$$

и после подстановки в (25.2) получаем следующее выражение для гамильтониана:

$$\hat{H} = \frac{N^2}{2V} U_0 + \sum_{\mathbf{p}} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{N}{2V} U_0 \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+ + 2\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}). \quad (25.5)$$

Первый член этого выражения определяет, в первом приближении, энергию E_0 основного состояния газа, а его производная по N — соответственно химический потенциал μ при $T = 0$:

$$E_0 = \frac{N^2}{2V} U_0, \quad \mu = \frac{N}{V} U_0. \quad (25.6)$$

Остальные же члены в (25.5) определяют поправку к E_0 и спектр слабо возбужденных состояний газа.

Входящий в (25.5) интеграл U_0 должен еще быть выражен через реальную физическую величину — длину рассеяния a . В членах второго порядка это может быть сделано прямо по формуле (6.2): $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$. В первом же члене нужна более

точная формула (6.5), учитывающая второе борновское приближение в амплитуде рассеяния. При этом речь идет о столкновении двух частиц конденсата, соответственно чему в сумме в (6.5) надо положить $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$, $\mathbf{p}'_1 = -\mathbf{p}'_2 \equiv \mathbf{p}$, так что будет

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \left(1 + \frac{4\pi\hbar^2 a}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{1}{p^2} \right).$$

Подставив это в (25.5), получим для гамильтониана

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{2\pi\hbar^2 a}{m} \frac{N^2}{V} \left(1 + \frac{4\pi\hbar^2 a}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{1}{p^2} \right) + \\ & + \frac{2\pi\hbar^2 a}{m} \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+ + 2\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}) + \sum_{\mathbf{p}} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (25.7)$$

Для определения уровней энергии надо привести гамильтониан к диагональному виду, что осуществляется надлежащим линейным преобразованием операторов $\hat{a}_{\mathbf{p}}$, $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+$. Введем новые операторы $\hat{b}_{\mathbf{p}}$, $\hat{b}_{\mathbf{p}}^+$, согласно определению,

$$\hat{a}_{\mathbf{p}} = u_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}} \hat{b}_{-\mathbf{p}}^+, \quad \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ = u_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}}^+ + v_{\mathbf{p}} \hat{b}_{-\mathbf{p}},$$

причем потребуем, чтобы они удовлетворяли таким же соотношениям коммутации

$$\hat{b}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}'} - \hat{b}_{\mathbf{p}'} \hat{b}_{\mathbf{p}} = 0, \quad \hat{b}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}'}^+ - \hat{b}_{\mathbf{p}'}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}} = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'},$$

каким удовлетворяют операторы $\hat{a}_{\mathbf{p}}$, $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+$. Легко видеть, что для этого должны быть $u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2 = 1$. Учтем это, написав линейное преобразование в виде

$$\hat{a}_{\mathbf{p}} = \frac{\hat{b}_{\mathbf{p}} + L_{\mathbf{p}} \hat{b}_{-\mathbf{p}}^+}{\sqrt{1 - L_{\mathbf{p}}^2}}, \quad \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ = \frac{\hat{b}_{\mathbf{p}}^+ + L_{\mathbf{p}} \hat{b}_{-\mathbf{p}}}{\sqrt{1 - L_{\mathbf{p}}^2}}. \quad (25.8)$$

Величину $L_{\mathbf{p}}$ надо определить таким образом, чтобы в гамильтониане выпали недиагональные члены $(\hat{b}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{-\mathbf{p}}, \hat{b}_{\mathbf{p}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{p}}^+)$. Простое вычисление дает

$$L_{\mathbf{p}} = \frac{1}{mu^2} \left\{ \varepsilon(p) - \frac{p^2}{2m} - mu^2 \right\}, \quad (25.9)$$

где введены обозначения;

$$\varepsilon(p) = \left[u^2 p^2 + \left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (25.10)$$

$$u = \left(\frac{4\pi\hbar^2 a N}{m^2 V} \right)^{1/2}. \quad (25.11)$$

При этом гамильтониан принимает вид

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \varepsilon(p) \hat{b}_{\mathbf{p}}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}}, \quad (25.12)$$

где

$$E_0 = \frac{N}{2} m u^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \left\{ \varepsilon(p) - \frac{p^2}{2m} - m u^2 + \frac{m^3 u^4}{p^2} \right\}. \quad (25.13)$$

Вид гамильтониана (25.12) и бозевские соотношения коммутации для операторов $\hat{b}_{\mathbf{p}}$, $\hat{b}_{\mathbf{p}}^+$ позволяют сделать вывод, что $\hat{b}_{\mathbf{p}}^+$ и $\hat{b}_{\mathbf{p}}$ представляют собой операторы рождения и уничтожения квазичастиц с энергией $\varepsilon(p)$, подчиняющихся статистике Бозе. Собственные значения диагонального оператора $\hat{b}_{\mathbf{p}}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}}$ представляют собой числа $n_{\mathbf{p}}$ квазичастиц с импульсом $\mathbf{p}$, а формула (25.10) определяет зависимость их энергии от импульса (числа заполнения квазичастиц снова обозначены посредством $n_{\mathbf{p}}$, в отличие от чисел заполнения $N_{\mathbf{p}}$ истинных частиц газа). Тем самым полностью определен энергетический спектр слабо возбужденных состояний рассматриваемого газа.

Величина же E_0 есть энергия основного состояния газа. Заменяв суммирование по дискретным значениям $\mathbf{p}$ (в объеме V) интегрированием по $V d^3 p / (2\pi\hbar)^3$ и произведя вычисления, получим следующее выражение:

$$E_0 = \frac{2\pi\hbar^2 a N^2}{mV} \left[1 + \frac{128}{15} \sqrt{\frac{a^3 N}{\pi V}} \right] \quad (25.14)$$

(*T. D. Lee, C. N. Yang, 1957*). Для химического потенциала газа (при $T = 0$) соответственно имеем

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N} = \frac{4\pi\hbar^2 a N}{mV} \left[1 + \frac{32}{3} \sqrt{\frac{a^3 N}{\pi V}} \right]. \quad (25.15)$$

Эти формулы представляют собой два первых члена разложений по степеням $(a^3 N/V)^{1/2}$. Но уже следующий член не мог бы быть вычислен изложенным способом. Он должен содержать объем как V^{-2} , а величина этого порядка зависит уже не только от двойных, но и от тройных столкновений.

При больших значениях импульса ($p \gg m u$) энергия квазичастиц (25.10) стремится к $p^2/2m$, т. е. к кинетической энергии отдельной частицы газа.

При малых же импульсах ($p \ll m u$) имеем $\varepsilon \approx u p$. Легко видеть, что коэффициент u совпадает со скоростью звука в газе,

так что это выражение отвечает фононам в соответствии с общими утверждениями § 22. При $T = 0$ свободная энергия совпадает с энергией E_0 , и взяв главный член в разложении последней, находим давление

$$P = -\frac{\partial E}{\partial V} = \frac{2\pi\hbar^2 a N^2}{mV^2}$$

Скорость же звука получается как $u = \sqrt{\partial P / \partial \rho}$ (где $\rho = mN/V$ — плотность газа) и совпадает с (25.11).

Отметим, что в рассматриваемой модели бозе-газа длина рассеяния a непременно должна быть положительной величиной (отталкивательное взаимодействие между частицами). Это видно формально уже из того, что в полученных формулах для энергии при $a < 0$ появились бы мнимые члены. Термодинамический же смысл условия $a > 0$ заключается в том, что оно необходимо для соблюдения в данной модели бозе-газа неравенства $(\partial P / \partial V)_T < 0$.

Статистическое распределение элементарных возбуждений (средние значения $\bar{n}_{\mathbf{p}}$ их чисел заполнения) при отличной от нуля температуре дается просто формулой распределения Бозе (22.2). Распределение же $\bar{N}_{\mathbf{p}}$ истинных частиц газа по импульсам можно вычислить усреднением оператора $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}$. Используя (25.8) и учитывая, что произведения $\hat{b}_{-\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}}$ и $\hat{b}_{\mathbf{p}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{p}}$ не имеют диагональных матричных элементов, получим

$$\bar{N}_{\mathbf{p}} = \frac{\bar{n}_{\mathbf{p}} + L_{\mathbf{p}}^2(\bar{n}_{\mathbf{p}} + 1)}{1 - L_{\mathbf{p}}^2}. \quad (25.16)$$

Это выражение справедливо, разумеется, лишь при $\mathbf{p} \neq 0$. Число же частиц с нулевым импульсом

$$\bar{N}_0 = N - \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \bar{N}_{\mathbf{p}} = N - \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int \bar{N}_{\mathbf{p}} d^3 p. \quad (25.17)$$

В частности, при абсолютном нуле все $n_{\mathbf{p}} = 0$, и с помощью (25.9) получим из (25.16) функцию распределения в виде ¹⁾

$$N_{\mathbf{p}} = \frac{m^2 u^4}{2\varepsilon(p)\{\varepsilon(p) + p^2/2m + mu^2\}} \quad (25.18)$$

(при $T = 0$ средние значения $N_{\mathbf{p}}$ совпадают с точными значениями;

¹⁾ Отметим, что максимум числа частиц с заданной величиной импульса ($\sim p^2 N_{\mathbf{p}}$) лежит при $p/\hbar \sim \sqrt{aN/V}$, где происходит переход от одного предельного выражения $\varepsilon(p)$ к другому. Это обстоятельство было уже упомянуто в примечании на с. 129.

поэтому черту над буквой опускаем). Неидеальность бозе-газа приводит, естественно, к появлению частиц с отличным от нуля импульсом и при абсолютном нуле; интегрирование в (25.17) с N_p из (25.18) производится элементарно и дает

$$N_0 = N \left[1 - \frac{8}{3} \sqrt{\frac{Na^3}{\pi V}} \right]. \quad (25.19)$$

Наконец, сделаем еще следующее замечание по поводу полученного здесь спектра. При малых p производная $d^2\varepsilon/dp^2 > 0$, т. е. кривая $\varepsilon(p)$ загибается вверх от начальной касательной $\varepsilon=up$. В таком случае (см. ниже § 34) возникает неустойчивость спектра, связанная с возможностью самопроизвольного распада квазичастиц (фононов). Соответствующая ширина уровней, однако, мала (пропорциональна p^5 при малых p) и не затрагивает выражений, получающихся в рассмотренных приближениях.

§ 26. Волновая функция конденсата

Как уже упоминалось в § 23, появление или исчезновение сверхтекучести в жидком гелии происходит путем фазового перехода второго рода. Такой переход всегда связан с каким-либо качественным изменением свойств тела. В случае λ -точки жидкого гелия это изменение может быть описано макроскопическим образом, как появление или исчезновение сверхтекучей компоненты жидкости.

С более глубокой, микроскопической точки зрения речь идет об определенных свойствах распределения частиц (истинных!) жидкости по импульсам. Именно в сверхтекучей жидкости, в отличие от несверхтекучей, конечная доля частиц (т. е. макроскопически большое их число) имеет строго равный нулю импульс; эти частицы образуют *бозе-эйнштейновский конденсат* (или просто конденсат) в импульсном пространстве. Напомним, что в идеальном бозе-газе при $T = 0$ все его частицы переходят в конденсат (см. V, § 62), а в почти идеальном газе — почти все частицы. В общем же случае бозе-жидкости с сильным взаимодействием между частицами доля числа частиц, находящихся при $T = 0$ в конденсате, отнюдь не близка к единице.

Покажем, каким образом свойство бозе-эйнштейновской конденсации формулируется в терминах ψ -операторов.

Для идеального бозе-газа — системы невзаимодействующих бозонов — гейзенберговский ψ -оператор записывается в явном

виде как¹⁾

$$\hat{\Psi}(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r} - \frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t \right\}. \quad (26.1)$$

Как было объяснено в § 25, можно пренебречь некоммутативностью операторов $\hat{a}_0$ и $\hat{a}_0^+$, т. е. рассматривать их как классические величины. Другими словами, обычным числом оказывается часть ψ -оператора (26.1), которую обозначим через Ξ :

$$\hat{\Xi} = \frac{\hat{a}_0}{\sqrt{V}}. \quad (26.2)$$

Для формулировки этого свойства ψ -операторов в общем случае произвольной бозе-жидкости заметим, что поскольку в конденсате все равно находится макроскопически большое число частиц, то изменение этого числа на 1 по существу не меняет состояния системы; можно сказать, что в результате добавления (или отнятия) одной частицы в конденсат из некоторого состояния системы N частиц получается «то же самое» состояние системы $N \pm 1$ частиц²⁾. В частности, основное состояние остается основным. Обозначив через $\hat{\Xi}$, $\hat{\Xi}^+$ ту часть ψ -операторов, которая меняет на 1 число частиц в конденсате, имеем, таким образом, по определению,

$$\hat{\Xi}|m, N+1\rangle = \Xi|m, N\rangle, \quad \hat{\Xi}^+|m, N\rangle = \Xi^*|m, N+1\rangle,$$

где символы $|m, N\rangle$ и $|m, N+1\rangle$ обозначают два «одинаковых» состояния, отличающихся только числом частиц в системе, а Ξ — некоторое комплексное число. Эти утверждения справедливы строго в пределе $N \rightarrow \infty$. Поэтому определение величины Ξ следует записать в виде

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle m, N | \hat{\Xi} | m, N+1 \rangle &= \Xi, \\ \lim_{N \rightarrow \infty} \langle m, N+1 | \hat{\Xi}^+ | m, N \rangle &= \Xi^*; \end{aligned} \quad (26.3)$$

переход к пределу совершается при заданном конечном значении плотности жидкости N/V .

Если представить ψ -операторы в виде

$$\hat{\Psi} = \hat{\Xi} + \hat{\Psi}', \quad \hat{\Psi}^+ = \hat{\Xi}^+ + \hat{\Psi}'^+, \quad (26.4)$$

¹⁾ Ср. (9.3). Мы предполагаем частицы газа бесспиновыми, поэтому спиновый индекс отсутствует. В (26.1) учтено также, что для идеального бозе-газа при $T = 0$ химический потенциал $\mu = 0$, и поэтому член $-\mu t/\hbar$ в показателях опущен.

²⁾ Добавление или удаление частицы надо представлять себе как совершаемое бесконечно медленно. Этим исключается возбуждение системы переменным полем.

то остальная («надконденсатная») их часть переводит состояние $|m, N\rangle$ в ортогональные ему состояния, т. е. матричные элементы¹⁾

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle m, N | \hat{\Psi}' | m, N + 1 \rangle = 0, \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \langle m, N + 1 | \hat{\Psi}'^+ | m, N \rangle = 0. \quad (26.5)$$

В пределе $N \rightarrow \infty$ разница между состояниями $|m, N\rangle$ и $|m, N + 1\rangle$ исчезает вовсе, и в этом смысле величина Ξ становится средним значением оператора $\hat{\Psi}$ по этому состоянию. Подчеркнем, что характерным для системы с конденсатом является именно конечность этого предела.

Равенствами (26.3) исчерпываются «операторные» свойства $\hat{\Xi}$, $\hat{\Xi}^+$, и их можно считать коммутативными с $\hat{\Psi}'$, $\hat{\Psi}'^+$. В частности, операторы $\hat{\Xi}$, $\hat{\Xi}^+$ будут заменяться на Ξ , Ξ^* (т. е. вести себя как классические величины) при любых усреднениях по основному состоянию. Подчеркнем снова, что такое приближение связано (звиду макроскопичности числа частиц в конденсате) с пренебрежением лишь величинами относительного порядка малости $1/N^2$.

Если временная зависимость волновых функций определяет-ся по гамильтониану $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$, то величина Ξ не зависит от времени. Действительно, матричный элемент $\langle m, N | \Xi | m, N + 1 \rangle$ пропорционален

$$\exp \left\{ -\frac{it}{\hbar} [E(N + 1) - E(N) - (N + 1)\mu + N\mu] \right\}.$$

Но показатель этой экспоненты обращается в нуль, поскольку (с точностью до величины $\sim 1/N$) $E(N + 1) - E(N) = \mu$.

В однородной неподвижной жидкости Ξ не зависит также и от координат и (при надлежащем выборе фазы этой комплексной величины) равно просто

$$\Xi = \sqrt{n_0}, \quad (26.6)$$

где n_0 —число конденсатных частиц в единице объема жидкости. Действительно, $\hat{\Xi}^+\hat{\Xi}$ есть оператор плотности числа частиц в конденсате, а среднее значение этого оператора есть как раз n_0 .

¹⁾ Во избежание недоразумений напомним лишний раз, что эти равенства относятся лишь к переходам между «одинаковыми» состояниями!

²⁾ С этой точностью, в частности, следует считать совпадающими матричные элементы операторов $\hat{\Psi}'$ для переходов между различными состояниями, отличающимися на одинаковое (малое) число частиц в системе.

Существование конденсата приводит к качественному отличию в свойствах матрицы плотности частиц бозе-жидкости по сравнению с матрицей плотности в обычной жидкости. В произвольном состоянии однородной бозе-жидкости матрица плотности определяется выражением

$$N\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle m, N | \hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_1) | m, N \rangle, \quad (26.7)$$

причем эта функция зависит лишь от разности $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ (ср.(7.13)). Подставив сюда ψ -операторы в виде (26.4) и учитывая свойства (26.3) и (26.5), получим

$$N\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = n_0 + N\rho'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (26.8)$$

«Надконденсатная» матрица плотности ρ' стремится к нулю при $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$; матрица же плотности ρ стремится при этом к конечному пределу n_0/N . Этим выражается существование в сверхтекучей жидкости «дальнего порядка», отсутствующего в обычных жидкостях, где всегда $\rho \rightarrow 0$ при $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$. Это есть то свойство симметрии, которое отличает сверхтекучую фазу жидкости от несверхтекучей (В. Л. Гинзбург, Л. Д. Ландау, 1950; О. Penrose, 1950).

Фурье-компонента матрицы плотности определяет распределение частиц жидкости по импульсам согласно формуле

$$N(\mathbf{p}) = N \int \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} d^3x \quad (26.9)$$

(ср. (7.20)). Подставив сюда ρ в виде (26.8), получим

$$N(\mathbf{p}) = (2\pi)^3 n_0 \delta(\mathbf{p}) + N \int \rho'(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} d^3x. \quad (26.10)$$

Член с δ -функцией соответствует конечной вероятности частице иметь строго равный нулю импульс.

Если в жидкости происходит сверхтекучее движение, или если она находится в неоднородных и нестационарных внешних условиях (существенно меняющихся, однако, лишь на расстояниях, больших по сравнению с межатомными), то бозе-эйнштейновская конденсация по-прежнему имеет место, но уже нельзя утверждать, что она будет происходить в состоянии с $\mathbf{p} = 0$. Величина Ξ , по-прежнему определяемая согласно (26.3), будет теперь функцией координат и времени, имеющей смысл волновой функции частицы в конденсатном состоянии. Она нормирована условием $|\Xi|^2 = n_0$ и потому может быть представлена в виде

$$\Xi(t, \mathbf{r}) = \sqrt{n_0(t, \mathbf{r})} e^{i\Phi(t, \mathbf{r})}. \quad (26.11)$$

Благодаря тому, что в конденсатном состоянии находится макроскопически большое число частиц, волновая функция этого состояния становится классической макроскопической величиной¹⁾. Таким образом, в сверхтекучей жидкости появляется новая характеристика макроскопических состояний, в том числе термодинамически равновесных.

Плотность потока, вычисленная по волновой функции (26.11), есть

$$\mathbf{j}_{\text{конд}} = \frac{i\hbar}{2m}(\Xi\nabla\Xi^* - \Xi^*\nabla\Xi) = \frac{\hbar}{m}n_0\nabla\Phi,$$

где m — масса частицы жидкости. По своему смыслу, это есть плотность макроскопического потока конденсатных частиц, и ее можно представить в виде $n_0\mathbf{v}_s$, где $\mathbf{v}_s$ — макроскопическая скорость этого движения. Из сравнения обоих выражений находим, что

$$\mathbf{v}_s = \frac{\hbar}{m}\nabla\Phi. \quad (26.12)$$

Поскольку это движение может иметь место в термодинамически равновесном состоянии (характеризуемом величиной Ξ), то оно бесдиссипативно, так что (26.12) определяет скорость сверхтекучего движения. Мы снова приходим, таким образом, к уже упомянутому в § 23 свойству сверхтекучего движения — его потенциальности. При этом потенциал скорости φ оказывается совпадающим (с точностью до постоянного множителя) с фазой конденсатной волновой функции

$$\varphi = \frac{\hbar}{m}\Phi. \quad (26.13)$$

Во избежание недоразумений подчеркнем, однако, что, хотя скорость конденсата и совпадает со скоростью сверхтекучей компоненты жидкости (и хотя конденсат и сверхтекучая компонента одновременно появляются в λ -точке), плотность конденсата $m n_0$ и плотность сверхтекучей компоненты ρ_s отнюдь не совпадают друг с другом. Не говоря уже о том, что отождествление этих двух величин никак не могло бы быть обосновано, его неправильность видна и из того, что при абсолютном нуле вся масса жидкости является сверхтекучей, между тем как отнюдь не все ее частицы находятся в конденсате²⁾.

¹⁾ Аналогично тому, как становится классической величиной напряженность поля электромагнитных волн при больших числах заполнения фотонов в каждом состоянии (см. IV, § 5).

²⁾ Фактически плотность конденсата в жидком гелии составляет, по видимому, лишь малую долю от полной плотности жидкости.

§ 27. Температурная зависимость плотности конденсата

Плотность числа частиц в конденсате максимальна при $T=0$, а при повышении температуры она падает. Предельный закон температурной зависимости этой плотности при $T \rightarrow 0$ может быть найден путем рассмотрения флуктуаций макроскопической величины — конденсатной волновой функции Ξ (*R. A. Ferrell, N. Menyhard, H. Schmidt, F. Schwabl, P. Szepefalussy*, 1968).

Напомним прежде всего, что Ξ есть классическая величина, которой в квантовомеханическом формализме отвечает оператор $\hat{\Psi}$. Поэтому для вычисления флуктуаций следовало бы, в принципе, пользоваться этим оператором. С другой стороны, вблизи абсолютного нуля основную роль в спектре флуктуаций макроскопической величины играют длинноволновые колебания. Эти колебания в жидкости представляют собой звуковые волны, описываемые макроскопическими уравнениями гидродинамики, и тем самым возникает возможность построить оператор, отвечающий величине Ξ , путем ее независимого квантования.

В данном случае для величины $\Xi = \sqrt{n_0} \exp(i\Phi)$ в длинноволновом пределе наиболее сильно флуктуирует фаза Φ , непосредственно связанная с потенциалом сверхтекучей скорости формулой (26.13). Напомним, что обе величины φ и Φ неоднозначны — к ним можно прибавить любую константу. Однозначная же величина $\sqrt{n_0}$ может выражаться поэтому лишь через производные от Φ , а потому компоненты Фурье ее флуктуаций будут содержать лишние степени волнового вектора $\mathbf{k}$, т. е. будут малы при малых $\mathbf{k}$.

Связь фазы Φ с потенциалом φ позволяет прямо связать ее с величинами, характеризующими распределение фононов в жидкости. Для этого рассматриваем φ , а тем самым и Φ как вторично-квантовый оператор, выразив его, согласно (24.10), через операторы рождения и уничтожения фононов:

$$\hat{\Phi} = \sum_{\mathbf{p}} \left(\frac{m u}{2 V n p} \right)^{1/2} (\hat{c}_{\mathbf{p}} e^{i \mathbf{p} \mathbf{r} / \hbar} + \hat{c}_{\mathbf{p}}^{\dagger} e^{-i \mathbf{p} \mathbf{r} / \hbar}) \quad (27.1)$$

(невозмущенную плотность жидкости записываем в виде $\rho = n m$, где n — плотность числа частиц, индекс 0 опускаем). Согласно сказанному выше, это означает, что оператор макроскопической величины Ξ , т. е. длинноволновая часть оператора $\hat{\Psi}$, может быть представлена в виде

$$\hat{\Psi} = \sqrt{n_0} \exp(i \hat{\Phi}), \quad (27.2)$$

где n_0 — плотность частиц конденсата.

Прежде всего воспользуемся этой формулой для вычисления распределения «надконденсатных» частиц бозе-жидкости по импульсам (при малых значениях последних). В одночастичной матрице плотности $\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ при больших расстояниях $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ можно воспользоваться длинноволновым выражением ψ -оператора (27.2):

$$N\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_2)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) \rangle \approx n_0 \langle e^{-i\hat{\Phi}^+(\mathbf{r}_2)} e^{i\hat{\Phi}(\mathbf{r}_1)} \rangle, \quad (27.3)$$

где среднее берется по состоянию жидкости при данной температуре. Ввиду малости флуктуаций следует разложить это выражение по степеням $\hat{\Phi}$, сохраняя лишь первые не исчезающие (квадратичные) члены. Учитывая, что $\hat{\Phi}^+ = \hat{\Phi}$, получим

$$N\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = n_0 - n_0 \langle \hat{\Phi}^2(\mathbf{r}) \rangle + n_0 \langle \hat{\Phi}(\mathbf{r}_2)\hat{\Phi}(\mathbf{r}_1) \rangle. \quad (27.4)$$

Третий член стремится к нулю при $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| \rightarrow \infty$ и дает искомую надконденсатную часть матрицы плотности (второй же член в однородной жидкости вообще не зависит от $\mathbf{r}$ и дает поправку к плотности конденсата, которая будет вычислена ниже иным способом). Используя (27.1), приводим надконденсатную часть к виду

$$\begin{aligned} N\rho'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{n_0 m u}{2Vn} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{p} \{ \langle \hat{c}_{\mathbf{p}}^+ \hat{c}_{\mathbf{p}} \rangle e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\hbar} + \langle \hat{c}_{\mathbf{p}} \hat{c}_{\mathbf{p}}^+ \rangle e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\hbar} \} = \\ &= \frac{n_0 m u}{Vn} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{p} \left(n_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \right) e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\hbar}, \end{aligned}$$

где

$$n_{\mathbf{p}} = [e^{pu/T} - 1]^{-1}.$$

Переходя от суммирования к интегрированию, имеем

$$N\rho'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{n_0 m u}{n} \int \frac{n_{\mathbf{p}} + 1/2}{p} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (27.5)$$

Это выражение, разумеется, справедливо только для вклада от малых p ($\hbar/p$ велико по сравнению с межатомными расстояниями). Подынтегральное выражение в (27.5) прямо определяет распределение частиц по импульсам

$$N(\mathbf{p}) = \frac{n_0 m u}{np} \left(n_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \right). \quad (27.6)$$

При $T = 0$ эта формула дает

$$N(\mathbf{p}) = \frac{n_0 m u}{2np} \quad (27.7)$$

(*J. Gavoret, Ph. Nozières*, 1964), а при $T \neq 0$, $up \ll T$;

$$N(\mathbf{p}) = \frac{n_0 m T}{n p^2} \quad (27.8)$$

(*P. C. Hohenberg, P. C. Martin*, 1965).

Теперь можно определить температурную зависимость плотности конденсата. По определению, имеем

$$n_0(T) = n - \int N(\mathbf{p}) \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (27.9)$$

Если прямо подставить в эту формулу (27.6), интеграл разойдется из-за нулевых колебаний. Это обстоятельство связано с неприменимостью (27.6) при больших p и означает лишь невозможность вычислить таким способом значение конденсатной плотности при $T = 0$, которое надо считать здесь заданной величиной. Для определения же искомой температурной зависимости надо вычесть из $n_0(T)$ ее значение при $T = 0$, после чего интеграл уже будет сходиться. В результате получим

$$\begin{aligned} \frac{n_0(T) - n_0(0)}{n_0(0)} &= -\frac{m\mu}{n} \int \frac{n_{\mathbf{p}}}{p} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= -\frac{mT^2}{2\pi^2 n \mu \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x dx}{e^x - 1} = -\frac{mT^2}{12 n \mu \hbar^3}. \end{aligned} \quad (27.10)$$

При вычислении мы пренебрегли температурной зависимостью полной плотности жидкости; это пренебрежение законно, поскольку тепловое расширение жидкости (связанное с возбуждением фононов) пропорционально более высокой степени температуры $-T^4$ (см. V, § 67)¹).

§ 28. Поведение сверхтекучей плотности вблизи λ -точки

Как уже упоминалось в § 23, с повышением температуры доля сверхтекучей плотности ρ_s/ρ бозе-жидкости убывает, обращаясь в нуль в точке фазового перехода второго рода — так называемой λ -точки жидкости. Температура T_λ этой точки является функцией давления P ; уравнение $T = T_\lambda(P)$ определяет линию λ -точек на фазовой диаграмме в плоскости P T .

¹) Полученные формулы, справедливые для любой бозе-жидкости, находятся, конечно, в согласии с полученными в § 25 формулами для слабо неидеального бозе-газа. При сравнении надо учесть, что для такого газа $n_0 \approx n$, а условие малости p имеет вид $p \ll m\mu \sim \hbar(an)^{1/2}$.

В общей теории фазовых переходов второго рода изменение состояния тела описывается поведением параметра порядка, характеризующего его свойства симметрии. Для λ -перехода бозе-жидкости роль такого параметра играет волновая функция конденсата Ξ , описывающая, как было объяснено в § 26, «дальний порядок» в жидкости. Комплексность Ξ означает, что параметр порядка имеет две компоненты, причем эффективный гамильтониан системы (см. V, § 147) зависит только от $|\Xi|^2$, т. е. инвариантен относительно преобразования $\Xi \rightarrow e^{i\alpha} \Xi$ с любым вещественным α .

Эмпирические данные о λ -переходе в жидком гелии свидетельствуют, по-видимому, о том, что для него отсутствует область применимости теории фазовых переходов Ландау: критерий (146.15) (см. V) не выполняется нигде в окрестности λ -точки (т. е. нигде в области $|T - T_\lambda| \ll T_\lambda$). Поэтому для описания свойств этого перехода надо пользоваться флуктуационной теорией фазовых переходов второго рода, дающей возможность связать друг с другом температурные зависимости различных величин.

Температурная зависимость параметра порядка (а тем самым и плотности конденсата n_0) при $T \rightarrow T_\lambda$ дается критическим индексом β (см. V, § 148):

$$|\Xi| = \sqrt{n_0} \propto (T_\lambda - T)^\beta. \quad (28.1)$$

Более интересен, однако, вопрос о поведении сверхтекучей плотности ρ_s . Для ее вычисления рассмотрим жидкость, в которой фаза Φ конденсатной волновой функции медленно меняется в пространстве. Это значит, что в жидкости имеет место макроскопическое сверхтекучее движение со скоростью (26.12) и соответственно с кинетической энергией (на единицу объема жидкости)

$$\frac{\rho_s v_s^2}{2} = \rho_s \frac{\hbar^2}{2m^2} (\nabla \Phi)^2. \quad (28.2)$$

Это выражение можно применить и к длинноволновым флуктуациям параметра порядка. Согласно гипотезе масштабной инвариантности, единственным параметром длины, определяющим флуктуационную картину в окрестности точки перехода, является корреляционный радиус флуктуаций r_c . Им же определяется, следовательно, порядок величины расстояний, на которых флуктуационное изменение фазы Φ порядка единицы; поэтому среднее значение квадрата флуктуационной скорости меняется с температурой по закону

$$\overline{v_s^2} \propto r_c^{-2} \propto (T_\lambda - T)^{2\nu},$$

где ν — критический индекс корреляционного радиуса. С другой

стороны, поскольку именно с длинноволновыми флуктуациями связана особенность термодинамических величин в точке перехода, естественно считать, что в окрестности этой точки флуктуационная кинетическая энергия (28.2) меняется с температурой по тому же закону, что и сингулярная часть термодинамического потенциала жидкости, т. е. как $(T_\lambda - T)^{2-\alpha}$ (где α — критический индекс теплоемкости C_p). Таким образом, находим, что

$$\rho_s \bar{v}_s^2 \propto \rho_s (T_\lambda - T)^{2\nu} \propto (T_\lambda - T)^{2-\alpha},$$

откуда $\rho_s \propto (T_\lambda - T)^{2-\alpha-2\nu}$. Наконец, учтя соотношение

$$3\nu = 2 - \alpha \quad (28.3)$$

(следующее из гипотезы масштабной инвариантности — см. V, § 149), получим окончательно

$$\rho_s \propto (T_\lambda - T)^{(2-\alpha)/3}. \quad (28.4)$$

Этим устанавливается связь между температурными зависимостями ρ_s и теплоемкости вблизи λ -точки (*B. D. Josephson*, 1966).

Заметим, что воспользовавшись соотношением:

$$\alpha + 2\beta + \nu(2 - \zeta) = 2, \quad (28.5)$$

следующим из (148.13) и (148.17) (см. V), индекс 2β , определяющий температурную зависимость n_0 , можно представить в виде

$$2\beta = (2 - \alpha)(1 - \zeta)/3.$$

Индексы α и ζ для жидкого гелия фактически очень малы; поэтому с хорошей точностью $2\beta \approx (2 - \alpha)/3 \approx 2/3$, так что

$$\rho_s \sim n_0 \sim (T_\lambda - T)^{2/3}.$$

Ввиду важности формулы (28.4) полезно привести другой, более формальный ее вывод. Для этого вычислим корреляционную функцию флуктуаций фазы Φ .

Интересуясь только классическими флуктуациями, найдем, прежде всего, связанное с ними изменение свободной энергии. Поскольку малые добавки к энергии и к свободной энергии равны, это изменение можно прямо написать согласно (28.2):

$$\Delta F = \rho_s \frac{\hbar^2}{2m^2} \int (\nabla \Phi)^2 dV. \quad (28.6)$$

Следуя методу, который был применен в V, § 116 для вычисления корреляционной функции флуктуаций плотности, разложим $\Delta \Phi$ в ряд Фурье по координатам:

$$\Delta \Phi = \sum_{\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \Phi_{-\mathbf{k}} = (\Phi_{\mathbf{k}})^*. \quad (28.7)$$

Подставим это выражение в (28.6). В результате интегрирования по dV члены с $\mathbf{k} \neq -\mathbf{k}'$ выпадают, а в оставшихся интегрирование сводится к умножению на V . Таким образом имеем

$$\Delta F = \rho_s \frac{\hbar^2}{2m^2} V \sum_{\mathbf{k}} r^2 |\Phi_{\mathbf{k}}|^2.$$

Согласно общей теории термодинамических флуктуаций это означает, что

$$\langle |\Phi_{\mathbf{k}}|^2 \rangle = \frac{T}{V} \frac{m^2}{\rho_s \hbar^2} \frac{1}{k^2}, \quad \langle \Phi_{\mathbf{k}} \Phi'_{\mathbf{k}'} \rangle = 0, \quad \mathbf{k} \neq -\mathbf{k}'. \quad (28.8)$$

Теперь можно подставить (28.7) в выражение для корреляционной функции $\varphi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \langle \Delta \Phi(\mathbf{r}_1) \Delta \Phi(\mathbf{r}_2) \rangle$ и усреднить с помощью (28.8). После простых вычислений находим

$$\varphi(r) = \frac{T}{V} \frac{m^2}{\rho_s \hbar^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{k^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = T \frac{m^2}{\rho_s \hbar^2} \int \frac{1}{k^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (28.9)$$

Ответ для интеграла можно написать, воспользовавшись тем, что $4\pi/k^2$ есть компонента Фурье кулоновского потенциала единичного заряда. Окончательно:

$$\varphi(r) = T \frac{m^2}{4\pi \rho_s \hbar^2} \frac{1}{r}. \quad (28.10)$$

Формула (28.10) применима (на достаточно больших расстояниях) при всех температурах ниже λ -точки. Вблизи T_λ она применима на расстояниях $r \ll r_c$. В этой области можно пренебречь относительно малыми флуктуациями модуля параметра порядка и считать, что флуктуации этого параметра равны $\Delta \Xi = i\sqrt{n_0} \Delta \varphi$. Тогда корреляционная функция фазы $\varphi(r)$, умноженная на n_0 , совпадает с корреляционной функцией параметра порядка $\rho(r) = \langle \Delta \Xi^*(\mathbf{r}_2) \Delta \Xi(\mathbf{r}_1) \rangle$. (Отметим, учитывая смысл Ξ как волновой функции, что ρ есть не что иное, как матрица плотности жидкости.) На границе же области применимости, при $r \sim r_c$ корреляционная функция параметра порядка должна по порядку величины совпадать с общим выражением (148.7) (см. V):

$$\rho(r) \sim r^{-(1+\zeta)}. \quad (28.11)$$

Приравнявая при $r \sim r_c$ функции $\rho(r)$ и $n_0 \varphi(r)$, получаем

$$\rho_s \sim n_0 r_c^{-\zeta} \sim (T_\lambda - T)^{2\beta - \nu \zeta}.$$

С помощью (28.3) и (28.5) легко убедиться в том, что эта температурная зависимость совпадает с (28.4).

§ 29. Квантованные вихревые нити

Обычная жидкость, заключенная в цилиндрическом сосуде, вращающемся вокруг своей оси, увлекается трением о стенки сосуда и в конце концов приводится во вращение как целое вместе с сосудом. В сверхтекучей жидкости увлекается во вращение только ее нормальная компонента; сверхтекучая же компонента остается неподвижной — в соответствии с тем, что эта компонента вообще не может вращаться как целое, так как при этом нарушалась бы потенциальность сверхтекучего движения¹⁾.

Однако при достаточно больших скоростях вращения такое состояние становится термодинамически невыгодным. Условие термодинамического равновесия состоит в минимальности величины

$$E_{\text{вр}} = E - \mathbf{M}\Omega, \quad (29.1)$$

представляющей собой энергию по отношению к вращающейся системе координат; E и $\mathbf{M}$ — энергия и момент импульса системы относительно неподвижной системы координат (см. V, § 26). Член $-\mathbf{M}\Omega$ в этом выражении и приводит (при достаточно больших Ω) к термодинамической выгоде состояния с $\mathbf{M}\Omega > 0$ по сравнению с состоянием с $\mathbf{M} = 0$.

Таким образом, при увеличении скорости вращения сосуда должно в конце концов возникнуть сверхтекучее движение. Кажущееся противоречие между этим утверждением и условием потенциальности сверхтекучего движения устраняется предположением, что потенциальность нарушается только на некоторых особых линиях в жидкости — *вихревых нитях*²⁾. Вокруг этих линий жидкость совершает движение, которое можно назвать *потенциальным вращением*, так что во всем объеме вне линий $\text{rot } \mathbf{v}_s = 0$.

Вихревые нити в жидкости имеют толщину, измеряемую атомными размерами, и с макроскопической точки зрения должны рассматриваться как бесконечно тонкие³⁾. Их существование не противоречит выражению скорости в виде (26.12), так как это выражение предполагает достаточную медленность изменения $\mathbf{v}_s$ в пространстве, между тем как вблизи вихревой линии $\mathbf{v}_s$ меняется сколь угодно быстро (см. ниже формулу (29.3)). Она

¹⁾ При вращении жидкости как целого скорость $\mathbf{v} = [\Omega \mathbf{r}]$, где Ω — угловая скорость, а радиус-вектор $\mathbf{r}$ отсчитывается от какой-либо точки на оси. При этом $\text{rot } \mathbf{v} = 2\Omega \neq 0$.

²⁾ Это предположение было высказано Онсагером (*L. Onsager*, 1949) и затем развито Фейнманом (*R. P. Feynman*, 1955).

³⁾ Это утверждение не относится, однако, к близкой окрестности λ -точки; здесь толщина вихревой нити порядка величины корреляционного радиуса флуктуаций.

не противоречит также и изложенному в § 23 обоснованию потенциальности сверхтекучего движения свойствами энергетического спектра бозе-жидкости, так как с вихревой нитью связана определенная макроскопически большая энергия (см. ниже (29.8)), и состояние жидкости с нитью не может считаться слабо возбужденным.

Рассмотрим сначала вихревые нити с чисто кинематической точки зрения — как особые линии в распределении скорости при потенциальном движении жидкости. Каждая вихревая нить характеризуется определенным значением (обозначим его через $2\pi\kappa$) циркуляции скорости по замкнутому контуру, охватывающему эту нить:

$$\oint \mathbf{v}_s d\mathbf{l} = 2\pi\kappa. \quad (29.2)$$

Это значение не зависит от выбора контура интегрирования. Действительно, если C_1 и C_2 — два контура, охватывающих вихревую нить, то разность циркуляций скорости вдоль них, согласно теореме Стокса, равна потоку вектора $\text{rot } \mathbf{v}_s$ через поверхность, натянутую между C_1 и C_2 ; но поскольку эта поверхность нигде не пересекает вихревую нить, то во всех ее точках $\text{rot } \mathbf{v}_s = 0$, так что интеграл обращается в нуль. Отсюда же следует, что вихревая нить не может прерываться: она либо замкнута, либо оканчивается на границах жидкости (а в неограниченной жидкости — уходит обоими своими концами на бесконечность). Действительно, наличие у вихревой нити свободного конца означало бы возможность натянуть на контур C поверхность, нигде не пересекающую нить, в результате чего интеграл в левой стороне (29.2) обратился бы в нуль.

Условие (29.2) позволяет определить распределение скоростей в жидкости, движущейся вокруг вихревой нити. В простейшем случае прямолинейной нити в неограниченной жидкости линии тока являются окружностями, плоскости которых перпендикулярны нити, а центры лежат на ней. Циркуляция скорости вдоль такой линии равна $2\pi r v_s$, так что

$$v_s = \frac{\kappa}{r}, \quad (29.3)$$

где r — расстояние до нити. Отметим, что при потенциальном вращении скорость падает с удалением от оси вращения (вихревой нити) — в противоположность вращению как целого, где скорость возрастает пропорционально r .

Для вихревой нити произвольной формы распределение скоростей дается формулой

$$\mathbf{v}_s = \frac{\kappa}{2} \int \frac{[d\mathbf{l} \cdot \mathbf{R}]}{R^3}, \quad (29.4)$$

где интегрирование производится вдоль нити, а $\mathbf{R}$ — радиус-вектор, проведенный от $d\mathbf{l}$ к точке наблюдения скорости¹⁾). На расстояниях от нити, малых по сравнению с ее радиусом кривизны, формула (29.4) приближенно сводится, конечно, к (29.3).

Как уже было отмечено, формулы (29.2)–(29.4) являются следствием одной лишь потенциальности движения жидкости. Квантовая же природа вихревых нитей в сверхтекучей жидкости проявляется в том, что постоянная κ может иметь лишь значения из определенного дискретного ряда. Действительно, воспользовавшись выражением (26.12) скорости $\mathbf{v}_s$ через фазу Φ волновой функции конденсата, находим для ее циркуляции

$$\oint \mathbf{v}_s d\mathbf{l} = \frac{\hbar}{m} \Delta\Phi, \quad (29.5)$$

где $\Delta\Phi$ — изменение фазы при обходе контура. Но ввиду однозначности волновой функции изменение ее фазы при возвращении в исходную точку может быть лишь целым кратным от 2π . Отсюда следует, что

$$\kappa = n\hbar/m, \quad (29.6)$$

где n — целое число. Мы увидим ниже, что термодинамически устойчивы фактически лишь вихревые нити с наименьшим возможным значением циркуляции ($n = 1$). Поэтому далее мы будем полагать

$$\kappa = \hbar/m. \quad (29.7)$$

Определим теперь критическую скорость вращения цилиндрического сосуда, при которой впервые появляется вихревая нить. Из соображений симметрии очевидно, что эта нить будет расположена вдоль оси сосуда. Изменение энергии жидкости за счет появления в ней вихревой нити есть

$$\Delta E = \int \frac{\rho_s v_s^2}{2} dV = \frac{\rho_s}{2} L \int v_s^2 \cdot 2\pi r dr = L \rho_s \pi \kappa^2 \int \frac{dr}{r}$$

(L — длина сосуда). Интегрирование по dr должно производиться в пределах между радиусом сосуда R и некоторым значением $r \sim a$ порядка величины атомных расстояний, на которых

¹⁾ Это выражение можно написать прямо по аналогии с известной формулой Био–Савара для магнитного поля линейных токов. Формальное совпадение обеих задач очевидно из сравнения циркуляции скорости (29.2) с циркуляцией магнитного поля $\mathbf{H}$ вокруг линейного тока J : $\oint \mathbf{H} d\mathbf{l} = \frac{4\pi}{c} J$. Одна задача получается из другой заменой обозначений: $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{v}_s$, $J/c \rightarrow \kappa/2$.

макроскопическое рассмотрение теряет смысл; ввиду логарифмической расходимости интеграла его величина мало чувствительна к точному выбору значения a . Таким образом,

$$\Delta E = L\pi\rho_s \frac{\hbar^2}{m^2} \ln \frac{R}{a} \quad (29.8)$$

(это выражение имеет, как говорят, логарифмическую точность, т. е. предполагается большим не только отношение R/a , но и его логарифм)¹⁾. Момент же импульса вращающейся жидкости:

$$M = \int \rho_s v_s r dV = \rho_s \kappa \int dV = L\pi R^2 \frac{\hbar}{m} \rho_s. \quad (29.9)$$

Возникновение вихревой нити термодинамически выгодно, если $\Delta E_{\text{вр}} = \Delta E - M\Omega < 0$, т. е. если

$$\Omega > \Omega_{\text{кр}} = \frac{\hbar}{mR^2} \ln \frac{R}{a}. \quad (29.10)$$

Изложенные рассуждения позволяют также понять причину, по которой оказываются термодинамически неустойчивыми вихревые нити с $n > 1$ в (29.6). Действительно, при замене значения $n = 1$ значением $n > 1$ энергия ΔE увеличивается в n^2 раз, а момент M — в n раз; при этом $\Delta E_{\text{вр}}$ заведомо увеличивается.

При дальнейшем увеличении скорости вращения цилиндрического сосуда (за критическим значением (29.10)) возникают новые вихревые нити, и при $\Omega \gg \Omega_{\text{кр}}$ число этих нитей будет уже очень большим. Их распределение по сечению сосуда стремится при этом к равномерному, и в пределе их совокупность имитирует вращение всей сверхтекучей части жидкости как целого²⁾. Число вихревых нитей при заданном (большом) значении Ω легко определить, потребовав, чтобы циркуляция скорости по контуру, охватывающему большое число нитей, имела бы значение, отвечающее вращению жидкости как целого.

¹⁾ Движение вокруг вихревой нити сопровождается, вообще говоря, некоторым изменением плотности жидкости. Пренебрежение в изложенном вычислении этим изменением оправдано тем, что основной вклад в энергию (29.8) возникает (в силу логарифмической расходимости интеграла) от больших расстояний r , на которых изменение плотности уже мало. По этой же причине можно пренебречь вкладом в ΔE от изменения внутренней энергии жидкости.

²⁾ В этом легко убедиться, заметив, что так как число нитей растет пропорционально Ω (см. ниже (29.11)), то второй член в $\Delta E_{\text{вр}} = \Delta E - M\Omega$ растет, как Ω^2 , а первый — как Ω , и поэтому при $\Omega \gg \Omega_{\text{кр}}$ им можно пренебречь. Тогда минимизация $\Delta E_{\text{вр}}$ сводится к максимизации M , достигаемой именно при вращении жидкости как целого.

Если такой контур охватывает единичную площадь (в плоскости, перпендикулярной оси вращения), то

$$\oint \mathbf{v}_s d\mathbf{l} = \nu \cdot 2\pi\kappa = 2\pi\nu \frac{\hbar}{m},$$

где ν — плотность распределения вихревых нитей по сечению сосуда. С другой стороны, при вращении жидкости как целого $\text{rot } \mathbf{v}_s = 2\Omega$, и та же циркуляция равна 2Ω . Приравняв оба значения, найдем

$$\nu = m\Omega/\pi\hbar. \quad (29.11)$$

Появление вихревых нитей в известном смысле нарушает свойство сверхтекучести жидкости. Элементарные возбуждения, составляющие нормальную компоненту жидкости, будут теперь рассеиваться на нитях, передавая им (а тем самым — сверхтекучей компоненте жидкости) часть своего импульса. Это означает, другими словами, появление *силы взаимного трения* между обеими компонентами жидкости.

Вихревые нити, вообще говоря, перемещаются в пространстве вместе с текущей жидкостью. При $T = 0$, когда жидкость целиком сверхтекуча, каждый элемент $d\mathbf{l}$ нити движется с той скоростью $\mathbf{v}_s$, которую жидкость имеет в точке нахождения этого элемента. При отличных же от нуля температурах испытываемая вихревой нитью сила трения приводит к появлению некоторой скорости ее перемещения относительно сверхтекучей компоненты.

Вихревые нити, возникающие при вращении, имеют прямолинейную форму. Течение же жидкости по капиллярам, щелям и т. п. может сопровождаться образованием замкнутых вихревых нитей — *вихревых колец*. Оно приводит к нарушению сверхтекучести при течении со скоростями, превышающими определенную критическую величину. Фактические значения этих *критических скоростей* зависят от конкретных условий течения; они гораздо меньше того значения, за которым нарушается условие (23.3).

В противоположность прямолинейным вихревым нитям, которые могут стоять на месте в покоящейся (вдали от них) жидкости, вихревые кольца движутся относительно жидкости. Скорость перемещения каждого элемента длины нити есть то значение $\mathbf{v}_s$, которое создается (согласно формуле (29.4)) в точке его нахождения всеми остальными участками нити; для искривленных нитей это значение, вообще говоря, отлично от нуля. В результате вихревые кольца имеют как целое не только определенные энергии, но и определенные импульсы и, в этом смысле, представляют собой особый тип элементарных возбуждений.

Задачи

1. Найти скорость движения и импульс кругового вихревого кольца.

Решение. Каждый элемент кольца движется со скоростью $\mathbf{v}_s$ в данной точке, а ввиду симметрии кругового кольца эта скорость во всех его точках одинакова. Поэтому достаточно определить скорость $\mathbf{v}_s$, создаваемую в какой-либо одной точке кольца P всеми остальными его частями. Элементы $d\mathbf{l}$ кольца и радиус-векторы $\mathbf{R}$ от $d\mathbf{l}$ к точке P лежат в плоскости кольца; поэтому определяемая формулой (29.4) скорость в точке P перпендикулярна плоскости кольца (в результате чего кольцо перемещается без изменения своей формы и размера).

Определим положение элемента $d\mathbf{l}$ углом ϑ (рис. 3). Тогда

$$dl = R_0 d\vartheta, \quad R = 2R_0 \sin \frac{\vartheta}{2}, \quad |[d\mathbf{l} \cdot \mathbf{R}]| = R \sin \frac{\vartheta}{2} dl$$

Рис. 3. (где R_0 — радиус кольца), и из (29.4) находим для скорости кольца v выражение

$$v = \frac{\kappa}{8R_0} 2 \int_0^\pi \frac{d\vartheta}{\sin(\vartheta/2)}.$$

Этот интеграл, однако, логарифмически расходится на нижнем пределе и должен быть обрезан на значении $\vartheta \sim a/R_0$, отвечающем атомным расстояниям ($\sim a$) элемента $d\mathbf{l}$ до точки P . С логарифмической точностью интеграл определяется областью значений $a/R_0 \ll \vartheta \ll \pi$ и равен

$$\int_{\sim a/R_0}^{\sim 1} \frac{2 d\vartheta}{\vartheta} = 2 \ln \frac{R_0}{a},$$

так что

$$v = \frac{\kappa}{2R_0} \ln \frac{R_0}{a} = \frac{\hbar}{2mR_0} \ln \frac{R_0}{a}. \quad (1)$$

С той же логарифмической точностью энергия вихревого кольца

$$\varepsilon = 2\pi^2 R_0 \rho_s \frac{\hbar^2}{m^2} \ln \frac{R_0}{a} \quad (2)$$

(формула (29.8) с заменой $R \rightarrow R_0$, $L \rightarrow 2\pi R_0$). Энергия ε связана со скоростью v соотношением $d\varepsilon/dp = v$, где p — импульс кольца. Отсюда

$$dp = \frac{d\varepsilon}{v} = 4\pi^2 \rho_s \frac{\hbar}{m} R_0 dR_0$$

(с логарифмической точностью, при дифференцировании следует считать большой логарифм постоянным), и затем

$$p = 2\pi^2 \rho_s \frac{\hbar}{m} R_0^2. \quad (3)$$

Формулы (2), (3) определяют в параметрическом виде (параметр R_0) зависимость $\varepsilon(p)$ для вихревых колец.

Отметим, что ввиду логарифмического характера интегрирования, приводящего к формуле (1), эта формула (с некоторым изменением обозначений в ней) остается справедливой и для скорости $\mathbf{v}$ перемещения каждого данного элемента искривленной вихревой нити любой формы:

$$\mathbf{v} = \frac{\kappa}{2R_0} \mathbf{b} \ln \frac{\lambda}{a}. \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{b}$ — единичный вектор, перпендикулярный касательной плоскости в данной точке нити (вектор биномали); R_0 — радиус кривизны нити в этой же точке; λ — характерное расстояние, на котором меняется кривизна нити.

2. Найти закон дисперсии малых колебаний прямолинейной вихревой нити (*W. Thomson*, 1880).

Решение. Выбираем линию нити в качестве оси z , и пусть вектор $\mathbf{r} = (x, y)$ дает отклонение точек нити при ее колебаниях; он является функцией z и времени t вида $\exp[i(kz - \omega t)]$. Скорость точек нити дается формулой (4), в которой под λ надо в данном случае понимать длину волны колебаний ($\lambda \sim 1/k$)

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = -i\omega\mathbf{r} = \frac{\kappa}{2} \ln \frac{1}{ak} \frac{\mathbf{b}}{R_0}.$$

Вектор биномали $\mathbf{b} = [\mathbf{t}\mathbf{n}]$, где $\mathbf{t}$ и $\mathbf{n}$ — единичные векторы касательной и главной нормали к кривой. Согласно известной формуле дифференциальной геометрии, $d^2\mathbf{r}/dl^2 = \mathbf{n}/R_0$, где l — длина, отсчитываемая вдоль кривой. При малых колебаниях нить слабо изогнута, так что можно положить $l \approx z$ и $\mathbf{t} = \mathbf{n}_z$ (единичный вектор вдоль оси z); тогда

$$\frac{\mathbf{b}}{R_0} \approx \left[\mathbf{n}_z \frac{d^2\mathbf{r}}{dz^2} \right] = -k^2 [\mathbf{n}_z \mathbf{r}].$$

Таким образом, находим уравнение движения нити

$$-i\omega\mathbf{r} = -\frac{\kappa k^2}{2} [\mathbf{n}_z \mathbf{r}] \ln \frac{1}{ak}.$$

В раскрытом виде оно дает систему двух линейных однородных уравнений для x и y ; приравняв нулю определитель этой системы, получим искомую связь между ω и k :

$$\omega = \frac{\kappa k^2}{2} \ln \frac{1}{ak}.$$

§ 30. Неоднородный бозе-газ

В § 25 мы рассмотрели свойства почти идеального бозе-газа со слабым отталкиванием между частицами. Новые существенно квантовые особенности этой системы проявляются, однако, если газ пространственно неоднороден. В этом параграфе мы обобщим теорию на случай неоднородного газа.

Рассмотрим слабо неидеальный газ при абсолютном нуле температур. В таком газе почти все его частицы находятся в конденсате. В терминах ψ -операторов это означает, что «над-конденсатная» часть оператора ($\hat{\Psi}'$) мала по сравнению с его

средним значением, т. е. по сравнению с конденсатной волновой функцией Ξ . Оператор $\hat{\Psi}(t, \mathbf{r})$ удовлетворяет «уравнению Шредингера» (7.8). С учетом лишь парных взаимодействий для бесспиновых частиц оно имеет вид (индекс (1) у $U^{(1)}$ опускаем)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mu + U(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}) + \int \hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}') U^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}') d^3x' \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}). \quad (30.1)$$

В общем случае было бы, однако, неверно просто заменить $\Psi(t, \mathbf{r})$ на $\Xi(t, \mathbf{r})$ в (30.1). Дело в том, что такая замена не учитывает сильного взаимодействия между частицами, которое имеет место на расстояниях порядка радиуса действия парного межчастичного потенциала. Эту трудность можно обойти, если, как это было сделано в § 6 и 25, формально заменить истинный потенциал взаимодействия на потенциал с тем же значением длины рассеяния a , но допускающим применение теории возмущений. В этом случае замена $\hat{\Psi}$ на Ξ в (30.1) допустима на всех расстояниях. Считая функцию $\Xi(t, \mathbf{r}')$ мало меняющейся на атомных расстояниях, мы можем вынести ее, заменив на $\Xi(t, \mathbf{r})$, из-под знака интеграла, который сводится тогда к $\int U^{(2)}(r) d^3x \equiv U_0$. Таким образом, искомое уравнение для $\Xi(t, \mathbf{r})$ имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Xi(t, \mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \mu + U(\mathbf{r}) \right) \Xi(t, \mathbf{r}) + U_0 |\Xi(t, \mathbf{r})|^2 \Xi(t, \mathbf{r}). \quad (30.2)$$

Теперь, как и в § 25, мы должны считать, что постоянная U_0 , характеризующая взаимодействие между атомами, выражается через точную длину рассеяния формулой (6.2):

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a. \quad (30.3)$$

Подчеркнем, что волновая функция конденсата $\Xi(t, \mathbf{r})$ является, как было объяснено в § 27, классической макроскопической величиной. В то же время уравнение (30.2), которому она удовлетворяет, содержит в явном виде постоянную Планка $\hbar$.

В стационарном состоянии функция Ξ не зависит от времени (напомним, что уравнение (30.1) уже отвечает гамильтониану $\hat{H}' = \hat{H} - \hat{N}\mu$.) Поэтому такое состояние описывается

уравнением¹⁾:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \mu + U(\mathbf{r})\right) \Xi(\mathbf{r}) + U_0 |\Xi(\mathbf{r})|^2 \Xi(\mathbf{r}) = 0. \quad (30.4)$$

Отметим, что в отсутствие внешнего поля из уравнения (30.4) следует, что химический потенциал однородного газа равен значению $\mu = nU_0$ (n — плотность газа), соответствующему первому приближению (25.6) теории Боголюбова.

Важным приложением полученных уравнений является задача о структуре вихревой нити в почти идеальном бозе-газе. Как уже говорилось, толщина самой вихревой нити в жидкости измеряется атомными расстояниями. В почти идеальном бозе-газе ситуация, однако, другая. Здесь «сердцевина» вихревой нити, в которой свойства среды существенно изменены, имеет (как мы увидим ниже) макроскопическую толщину, и ее структура может быть описана полученными выше уравнениями. Пусть внешнее поле отсутствует и n есть невозмущенная плотность газа на бесконечности. Полагая $\mu = nU_0$ в (30.3), получаем уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \Xi(\mathbf{r}) + U_0 \{ |\Xi(\mathbf{r})|^2 - n \} \Xi(\mathbf{r}) = 0. \quad (30.5)$$

Прямолинейной вихревой нити соответствует решение вида

$$\Xi = \sqrt{n} e^{i\varphi} f\left(\frac{r}{r_0}\right), \quad r_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0 n}}, \quad (30.6)$$

где r и φ — расстояние до оси вихря и полярный угол вокруг нее. Фаза этой функции отвечает значению циркуляции (29.7). Квадрат $|\Xi|^2$ есть плотность числа частиц в конденсате; в рассматриваемом приближении она совпадает с полной плотностью газа. При $r \rightarrow \infty$ последняя должна стремиться к заданному значению n , а функция f — соответственно к 1.

Введя безразмерную переменную $\xi = r/r_0$, получим для функции $f(\xi)$ уравнение

$$\frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{df}{d\xi} \right) - \frac{f}{\xi^2} + f - f^3 = 0. \quad (30.7)$$

¹⁾ Уравнения (30.2) и (30.4) были получены *Е. П. Гроссом* (*E. P. Gross*, 1961) и *Л. П. Питаевским* (1961) в связи с обсуждаемой ниже проблемой вихревой нити в бозе-газе. Уравнение аналогичное (30.4) рассматривалось ранее *В. Л. Гинзбургом* и *Л. П. Питаевским* (1958) в теории сверхтекучести жидкого гелия вблизи λ -точки. Смысл коэффициентов в этих двух задачах существенно различен, однако формальное сходство уравнений позволяет использовать решение, полученное для вихревой нити в гелии, для бозе-газа. Это решение показано на рис. 4.

На рис. 4 показано решение, полученное из (30.7) численным интегрированием. При $\xi \rightarrow 0$ оно обращается в нуль пропорционально ξ , а при $\xi \rightarrow \infty$ стремится к 1 по закону $f = 1 - 1/2\xi^2$.

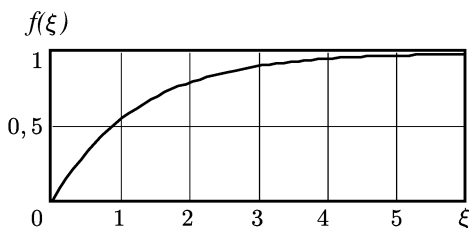


Рис. 4.

Параметр r_0 определяет порядок величины радиуса «сердцевины» вихря. Введя вместо U_0 длину рассеяния, согласно $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$ (30.3), найдем, что

$$r_0 \sim n^{-1/3} \eta^{-1/2} \gg n^{-1/3},$$

где $\eta = an^{1/3}$ — газовый параметр. Этот радиус, таким образом, действительно велик по сравнению с межатомными расстояниями, если газовый параметр достаточно мал.

Другой задачей, в которой неоднородность газа играет существенную роль, является задача о газе во внешнем поле. Пусть газ находится в поле притяжения с потенциальной энергией $U(\mathbf{r}) < 0$. (Такая постановка соответствует реальной экспериментальной ситуации, когда атомы удерживаются «магнитной ловушкой»). Волновая функция основного состояния может быть выбрана вещественной и удовлетворяет уравнению (30.4). На бесконечности функция должна стремиться к нулю, а химический потенциал μ определяется из условия нормировки:

$$\int \Xi(\mathbf{r})^2 d^3x = N, \quad (30.8)$$

где N — полное число частиц в газе. В общем случае уравнение (30.4) можно решить только численно. Существуют, однако, два предельных случая, где задачу можно сильно упростить.

Дело в том, что относительная роль различных членов в уравнении (30.4) зависит от соотношения между величиной r_0 , определенной согласно (30.6), и характерным размером газового «облака» R . Простая оценка показывает, что отношение члена, содержащего взаимодействие U_0 , к члену с лапласианом имеет порядок $(R/r_0)^2$.

Таким образом, при условии $R \ll r_0$ взаимодействие вообще несущественно. Уравнение (30.4) в этом случае сводится к уравнению Шредингера для частицы в потенциале $U(\mathbf{r})$. Это означает, что газ можно считать идеальным и все атомы конденсируются в состоянии, соответствующем основному состоянию индивидуального атома в поле $U(\mathbf{r})$.

В обратном предельном случае в уравнении можно пренебречь лапласианом. Плотность газа дается тогда простой формулой:

$$\Xi(\mathbf{r})^2 = n(\mathbf{r}) = \frac{1}{U_0}(\mu - U(\mathbf{r})), \quad (30.9)$$

которая выражает классическое условие постоянства химического потенциала во внешнем поле. Отметим, что в этом приближении газ имеет резкую границу, определяемую уравнением $\mu - U(\mathbf{r}) = 0$. Химический потенциал находится интегрированием выражения (30.9) по области $U(\mathbf{r}) < \mu$.

Задача

Найти спектр элементарных возбуждений в почти идеальном бозе-газе, рассматривая его как закон дисперсии малых колебаний конденсатной волновой функции.

Решение. Рассматриваем малые колебания Ξ вокруг постоянного среднего значения $\sqrt{n}$:

$$\Xi = \sqrt{n} + Ae^{i(\mathbf{kr}-\omega t)} + B^*e^{-i(\mathbf{kr}-\omega t)},$$

где A, B^* — малые комплексные амплитуды. Подставив это выражение в уравнение (30.2), в котором внешний потенциал U положен равным нулю, линеаризовав его и отделив члены с различными экспоненциальными множителями, получим систему двух уравнений

$$\begin{aligned} \hbar\omega A &= \frac{p^2}{2m}A + nU_0(A + B), \\ -\hbar\omega B &= \frac{p^2}{2m}B + nU_0(A + B) \end{aligned}$$

($p = \hbar k$). Отсюда, приравняв нулю определитель системы, найдем

$$(\hbar\omega)^2 = \left(\frac{p^2}{2m}\right)^2 + \frac{p^2}{m}nU_0,$$

что совпадает с (25.10).

§ 31. Гриновские функции бозе-жидкости¹⁾

Математический аппарат функций Грина бозе-жидкости строится во многом подобно аналогичному аппарату для ферми-систем. Не повторяя заново всех рассуждений, мы приведем здесь сначала основные определения и формулы, подчеркнув при этом отличия, связанные как с другой статистикой частиц, так и с наличием конденсата²⁾. Как и в предыдущих параграфах этой главы, частицы жидкости предполагаются бесспиновыми.

При определении гриновской функции бозе-жидкости следует выделить из гейзенберговских ψ -операторов конденсатную часть, представив их в виде (26.4). Функция Грина определяется по надконденсатной части операторов согласно

$$G(X_1, X_2) = -i\langle T\hat{\Psi}'(X_1)\hat{\Psi}'^+(X_2)\rangle, \quad (31.1)$$

где снова скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по основному состоянию системы, а T — знак хронологического произведения. При этом, однако, в отличие от случая фермионов, перестановка ψ -операторов для приведения их в нужное расположение не должна сопровождаться изменением знака произведения, так что (в отличие от (7.10))

$$iG(X_1, X_2) = \begin{cases} \langle \hat{\Psi}'(X_1)\hat{\Psi}'^+(X_2)\rangle, & t_1 > t_2, \\ \langle \hat{\Psi}'^+(X_2)\hat{\Psi}'(X_1)\rangle, & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (31.2)$$

Такое же среднее значение, как (31.1), но с полными ψ -операторами вместо надконденсатных дало бы

$$-i\langle T\hat{\Psi}(X_1)\hat{\Psi}^+(X_2)\rangle = -in_0 + G(X_1, X_2), \quad (31.3)$$

где n_0 — плотность числа частиц в конденсате³⁾. В однородной жидкости функция G зависит, конечно, только от разности $X = X_1 - X_2$.

Надконденсатная матрица плотности ρ' выражается через функцию Грина согласно

$$N\rho'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = iG(t_1, \mathbf{r}_1; t_1 + 0, \mathbf{r}_2) = iG(t = -0, \mathbf{r}) \quad (31.4)$$

¹⁾ В § 31 – 33, 35 используется система единиц, в которой $\hbar = 1$.

²⁾ Применение математической техники гриновских функций к бозе-системам с конденсатом принадлежит С. Т. Беляеву (1958).

³⁾ Как и для ферми-систем, мы будем рассматривать состояния бозе-системы при заданном значении химического потенциала μ (а не числа N). Соответственно роль гамильтониана системы играет разность $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$ (7.1). При этом конденсатная часть ψ -оператора от времени не зависит.

(обратим внимание на другой общий знак по сравнению с (7.18)). В частности, при $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ отсюда получается полная плотность числа надконденсатных частиц

$$\frac{N}{V} - n_0 = iG(t = -0, \mathbf{r} = 0) \quad (31.5)$$

(ср. (7.19)).

Переход к импульсному представлению происходит по тем же формулам (7.21), (7.22). Нормировка функции $G(\omega, \mathbf{p})$ выражается формулой

$$\frac{N}{V} = n_0 + i \lim_{t \rightarrow -0} \int G(\omega, \mathbf{p}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega d^3p}{(2\pi)^4} \quad (31.6)$$

(ср. (7.24)).

Для функции Грина бозе-системы в импульсном представлении можно получить разложение, подобное тому, которое было получено в § 8 для ферми-систем. Полностью аналогичные вычисления приводят сначала к формуле

$$G(\omega, \mathbf{p}) = (2\pi)^3 \sum_m \left\{ \frac{A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega + E_0(N) - E_m(N+1) + \mu + i0} - \frac{B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)}{\omega - E_0(N) + E_m(N-1) + \mu - i0} \right\}, \quad (31.7)$$

где

$$A_m = |\langle 0 | \hat{\psi}'(0) | m \rangle|^2, \quad B_m = |\langle m | \hat{\psi}'(0) | 0 \rangle|^2$$

($\hat{\psi}'(\mathbf{r})$ — шредингеровский надконденсатный оператор)¹⁾. Для приведения этого разложения к окончательному виду замечаем, что энергии возбуждения $\varepsilon_m(N)$ в бозе-системе определяются как (всегда положительные) разности между энергиями возбужденных состояний системы и энергией ее основного состояния при неизменном числе частиц N . Учитывая, что $E_0(N) + \mu \approx \approx E_0(N+1)$, находим поэтому, что

$$E_m(N+1) - E_0(N) - \mu \approx E_m(N+1) - E_0(N+1) = \varepsilon_m(N+1) > 0,$$

$$E_m(N-1) - E_0(N) + \mu \approx E_m(N-1) - E_0(N-1) = \varepsilon_m(N-1) > 0.$$

Но добавление или удаление одной частицы меняет свойства системы лишь в членах относительного порядка $\sim 1/N$; для макроскопической системы эти члены пренебрежимо малы, так что

¹⁾ Формула (31.7) отвечает формуле (8.7). Множитель $1/2$ отсутствует теперь в связи с бесспиновостью частиц. Обратим внимание на другой знак перед вторым членом в (31.7) по сравнению с (8.7).

энергии возбуждения $\varepsilon_m(N \pm 1)$ следует считать совпадающими друг с другом и с $\varepsilon_m(N)$. Таким образом, окончательно находим

$$G(\omega, \mathbf{p}) = (2\pi)^3 \sum_m \left\{ \frac{A_m \delta_m(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega - \varepsilon_m + i0} - \frac{B_m \delta_m(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)}{\omega + \varepsilon_m - i0} \right\}. \quad (31.8)$$

Тем же способом, как было получено (8.14), отсюда легко найти, что для бозе-систем мнимая часть функции Грина всегда отрицательна:

$$\text{Im } G(\omega, \mathbf{p}) < 0. \quad (31.9)$$

Асимптотический вид функции Грина при $\omega \rightarrow \infty$ остается тем же, что и в случае ферми-систем:

$$G(\omega, \mathbf{p}) \rightarrow 1/\omega \text{ при } |\omega| \rightarrow \infty \quad (31.10)$$

(ср. (8.15)). При его выводе следует учесть правило коммутации

$$\hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}_2) - \hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_1) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

в котором стоит теперь коммутатор операторов $\hat{\Psi}$ и $\hat{\Psi}^+$ вместо антикоммутатора¹⁾.

Далее, такие же рассуждения, что и в § 8, приводят к основному результату о том, что полюсы функции Грина определяют спектр элементарных возбуждений

$$G^{-1}(\varepsilon, \mathbf{p}) = 0, \quad (31.11)$$

причем следует брать только положительные корни этого уравнения; в отличие от (8.16), вычитать μ из ε здесь не требуется.

Вблизи своего полюса функция Грина имеет вид

$$G(\omega, \mathbf{p}) \approx \frac{Z_{\pm}}{\omega \mp \varepsilon(\mathbf{p})}, \quad Z_+ > 0, \quad Z_- < 0; \quad (31.12)$$

знак вычета в полюсе совпадает со знаком ω , как это следует из положительности коэффициентов A_m, B_m в (31.8) (величина же вычета не ограничена никакими условиями, подобными, например, условию (10.4) в случае ферми-систем). Используя выражение (31.12), легко убедиться (подобно тому, как это было сделано в § 8), что неравенство (31.9) автоматически обеспечивает положительность коэффициента затухания квазичастиц, т. е. нужный знак $-\text{Im } \varepsilon > 0$, когда значения ε сдвигаются в комплексную область.

¹⁾ Тот факт, что в определении G выделена конденсатная часть ψ -операторов, здесь несуществен: постоянному члену $-in_0$ в (31.3) в импульсном представлении отвечает $\delta(\omega)\delta(\mathbf{p})$, не отражающаяся на (31.10).

Возможность перехода надконденсатных частиц в конденсат и обратно приводит к тому, что в математическом аппарате функций Грина для бозе-систем наряду с функцией (31.1) автоматически появляются (как мы увидим в § 33) также и функции

$$iF(X_1, X_2) = \langle N - 2 | T \hat{\Psi}'(X_1) \hat{\Psi}'(X_2) | N \rangle, \quad (31.13)$$

$$\begin{aligned} iF^+(X_1, X_2) &= \langle N | T \hat{\Psi}'^+(X_1) \hat{\Psi}'^+(X_2) | N - 2 \rangle = \\ &= \langle N + 2 | T \hat{\Psi}'^+(X_1) \hat{\Psi}'^+(X_2) | N \rangle, \end{aligned} \quad (31.14)$$

где матричный элемент берется для переходов с изменением полного числа частиц в системе, а символ $|N\rangle$ означает основное состояние системы с N частицами (последнее равенство в (31.14) справедливо с точностью до величин $\sim 1/N$ — ср. примечание на с. 136). Определенные таким образом функции F и F^+ называют *аномальными функциями Грина*. Покажем, что в однородной и неподвижной жидкости функции F и F^+ совпадают друг с другом.

Как и функция G , функции F и F^+ для однородной жидкости зависят только от разности $X = X_1 - X_2$ ¹⁾. При этом, поскольку перестановка X_1 и X_2 меняет лишь порядок расположения операторов в произведении, который все равно устанавливается операцией хронологизации, то

$$F(X) = F(-X). \quad (31.15)$$

Отсюда следует, конечно, что и в импульсном представлении F — четная функция своего аргумента

$$F(P) = F(-P). \quad (31.16)$$

Далее, определенное соотношение между F и F^+ возникает как результат следующего свойства гейзенберговского ψ -оператора

¹⁾ Независимость функции F от суммы времен $t_1 + t_2$ связана с тем, что в определении гамильтониана $\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}$ включен член $-\mu \hat{N}$. Тем самым из разности собственных значений энергии систем с различными числами частиц исключен член

$$E(N + 2) - E(N) \approx 2\partial E / \partial N = 2\mu,$$

а из матричных элементов оператора $\hat{\Psi}_1' \hat{\Psi}_2'$ соответственно исключен множитель $\exp[-i\mu(t_1 + t_2)]$.

неподвижной жидкости¹⁾):

$$\hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}) = \tilde{\Psi}(-t, -\mathbf{r}). \quad (31.17)$$

Полагая, скажем, $t_2 > t_1$, имеем

$$\begin{aligned} iF^+(X_1, X_2) &= \langle N + 2 | \hat{\Psi}'^+(X_2) \hat{\Psi}'^+(X_1) | N \rangle = \\ &= \langle N | \tilde{\hat{\Psi}}'^+(X_1) \tilde{\hat{\Psi}}'^+(X_2) | N + 2 \rangle = \\ &= \langle N | \hat{\Psi}'(-X_1) \hat{\Psi}'(-X_2) | N + 2 \rangle = iF(-X_1, -X_2), \end{aligned}$$

или $F^+(X) = F(-x)$. С учетом (31.15) отсюда следует искомое равенство

$$F^+(X) = F(X) \quad (31.18)$$

Выразив функцию $F(X)$ через матричные элементы ψ -операторов, можно получить для $F(\omega, \mathbf{p})$ разложение, аналогичное разложению (31.8), и тем самым выяснить вопрос о полюсах этой функции; мы не будем останавливаться здесь на этом. Укажем лишь, что полюсы функции $F(\omega, \mathbf{p})$ совпадают с полюсами функции $G(\omega, \mathbf{p})$.

В заключение этого параграфа вычислим функцию Грина идеального бозе-газа $G^{(0)}$. Заметим прежде всего, что поскольку в основном состоянии такого газа все частицы находятся в конденсате, то надконденсатный оператор уничтожения частиц

¹⁾ В нем можно убедиться следующим образом. Все отличные от нуля матричные элементы операторов $\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}}^+$ могут быть определены как вещественные величины (см. III, (64.7), (64.8)); в этом смысле операторы вещественны, т. е. $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \equiv \tilde{a}_{\mathbf{p}}^* = \tilde{a}_{\mathbf{p}}$. Поэтому шредингеровский ψ -оператор

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = V^{-1/2} \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}$$

обладает свойством $\hat{\psi}^+(\mathbf{r}) = \tilde{\hat{\psi}}(-\mathbf{r})$. Отсюда, в свою очередь, следует равенство (31.17) для гейзенберговского оператора

$$\hat{\Psi}(t, \mathbf{r}) = \exp(i\hat{H}t) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \exp(-i\hat{H}t),$$

в чем легко убедиться, заметив, что для системы без спиновых взаимодействий гамильтониан $\hat{H}$ веществен (так что $\hat{H}^+ = \hat{H}$), а в силу изотропии системы $\hat{H}(-\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r})$. Подчеркнем, однако, что вещественность гамильтониана подразумевает отсутствие в жидкости макроскопического сверхтекучего движения. Для бозе системы с конденсатом гамильтониан зависит от макроскопического параметра — конденсатной волновой функции Ξ . В движущейся жидкости этот параметр комплексен, а с ним комплексен (но, разумеется, эрмитов) и гамильтониан.

$\hat{\Psi}'$ при воздействии на волновую функцию основного состояния обращает ее в нуль. Поэтому функция $G^{(0)}(t, \mathbf{r})$ отлична от нуля только при $t = t_1 - t_2 > 0$ (когда, согласно (31.2), первым действует оператор рождения $\hat{\Psi}'^+$).

Хотя для идеального газа химический потенциал $\mu = 0$, мы не будем полагать здесь этого, рассматривая μ как не определенный заранее свободный параметр; это необходимо для дальнейшего применения функции $G^{(0)}$ в диаграммной технике для произвольной жидкости, где μ играет роль именно такого параметра. Соответственно этому, оператор $\hat{\Psi}'_0(t, \mathbf{r})$ будем писать в виде

$$\hat{\Psi}'_0(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \hat{a}_{\mathbf{p}} \exp \left[i \left(\mathbf{p}\mathbf{r} - \frac{p^2}{2m}t + \mu t \right) \right] \quad (31.19)$$

(отличающимся от (26.1) членом $i\mu t$ в показателях экспонент). При подстановке этого выражения в определение $G^{(0)}$, согласно (31.2), замечаем, что при усреднении (т. е. взятии диагонального матричного элемента) могут дать отличный от нуля результат лишь произведения $\hat{a}_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}}^+$ и $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+\hat{a}_{\mathbf{p}}$; но поскольку в основном состоянии газа числа заполнения всех состояний частиц с $\mathbf{p} \neq 0$ равны нулю, то

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^+\hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle = 0, \quad \langle \hat{a}_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \rangle = 1.$$

Перейдя затем обычным образом от суммирования по $\mathbf{p}$ к интегрированию, получим

$$G^{(0)}(t, \mathbf{r}) = \begin{cases} -i \int \exp \left[-i \frac{p^2}{2m}t + i\mu t + i\mathbf{p}\mathbf{r} \right] \frac{d^3p}{(2\pi)^3} & \text{при } t > 0, \\ 0 & \text{при } t < 0. \end{cases} \quad (31.20)$$

Отсюда для функции Грина в импульсном представлении имеем

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = -i \int_0^{\infty} \exp \left(-i \frac{p^2}{2m}t + i\mu t + i\omega t \right) dt.$$

Интегрирование осуществляется с помощью формулы

$$\int_0^{\infty} e^{i\alpha t} dt = \frac{i}{\alpha + i0} \quad (31.21)$$

(в подынтегральном выражении вводится множитель $e^{-\lambda t}$ с $\lambda > 0$, после чего переходим к пределу $\lambda \rightarrow 0$). Окончательно

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = \left[\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu + i0 \right]^{-1}. \quad (31.22)$$

Что касается функции F , то для идеального газа $F^{(0)}(X) = 0$, как это очевидно из определения (31.13), в котором оба оператора уничтожают надконденсатные частицы. Поэтому и в импульсном представлении

$$F^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = 0. \quad (31.23)$$

Этим равенством выражается тот факт, что надконденсатные частицы появляются (при $T = 0$) только в результате взаимодействия.

Задача

Найти функцию Грина фононного поля, определяемую как

$$D(X_1, X_2) \equiv D(X_1 - X_2) = -i \langle T \hat{\rho}'(X_1) \hat{\rho}'(X_2) \rangle, \quad (1)$$

где угловые скобки означают усреднение по основному состоянию поля; $\hat{\rho}'$ — оператор плотности из (24.10), а хронологическое произведение раскрывается по правилу (31.2).

Решение. При подстановке (24.10) в определение (1) замечаем, что поскольку в основном состоянии все числа заполнения фононных состояний равны нулю, то отличны от нуля лишь средние значения $\langle \hat{c}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ \rangle = 1$. Перейдя затем от суммирования по $\mathbf{k}$ к интегрированию, получим

$$D(t, \mathbf{r}) = \int \frac{\rho k}{2iu} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} \mp ukt)} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3},$$

где знаки $-$ и $+$ в показателе относятся соответственно к $t > 0$ и $t < 0$ (в интеграле для $t < 0$ произведено переобозначение переменной интегрирования $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$). Подынтегральное выражение (без множителя $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$) есть уже компонента фурье-разложения функции $D(t, \mathbf{r})$ по координатам. Разлагая так же и по времени, получим гриновскую функцию в импульсном представлении

$$D(\omega, \mathbf{r}) = \frac{\rho k}{2iu} \left\{ \int_0^\infty e^{i(\omega - uk)t} dt + \int_{-\infty}^0 e^{i(\omega + uk)t} dt \right\}.$$

Интегрирование осуществляется с помощью формулы (31.21):

$$D(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\rho k}{2u} \left[\frac{1}{\omega - uk + i0} - \frac{1}{\omega + uk - i0} \right] = \frac{\rho k^2}{\omega^2 - u^2 k^2 + i0}.$$

§ 32. Диаграммная техника для бозе-жидкости

Дальнейшее построение диаграммной техники для вычисления функций Грина бозе-системы производится подобно тому, как это было сделано в § 12, 13 для ферми-систем. Как и там, сформулируем правила этой техники для систем с парным взаимодействием между частицами, описываемым оператором

$$\hat{V}(t) = \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_1) d^3x_1 d^3x_2. \quad (32.1)$$

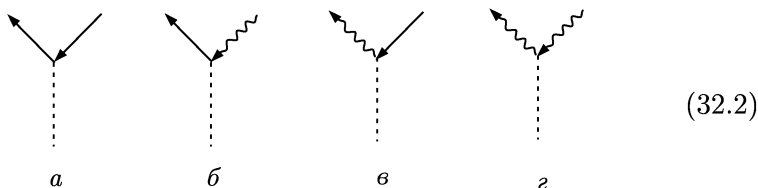
Специфика бозе-жидкостей с конденсатом состоит прежде всего в том, что все гейзенберговские ψ -операторы должны быть представлены в виде $\hat{\Psi} = \hat{\Psi}' + \Xi$, где $\hat{\Psi}'$ — его надконденсатная часть, а Ξ — конденсатная волновая функция, представляющая собой (для неподвижной жидкости) просто вещественное число $\sqrt{n_0}$ ¹⁾. После такой подстановки оператор (32.1) распадается на ряд членов, содержащих от четырех до нуля операторов $\hat{\Psi}'$ (вместе с соответствующим дополнительным числом множителей $\sqrt{n_0}$).

Все сказанное в § 12 о переходе к представлению взаимодействия остается полностью в силе, а дальнейшее раскрытие получающихся выражений осуществляется с помощью теоремы Вика (с тем лишь отличием, что перестановка ψ -операторов в усредненном произведении не требует теперь изменения знака). Разнообразие членов, на которые распадается оператор (32.1), приводит, однако, к появлению новых элементов в фейнмановских диаграммах. Опишем эти элементы сразу в окончательном, импульсном представлении.

В каждой вершине диаграммы по-прежнему сходятся три линии: штриховая линия (которой сопоставляется множитель $-iU(Q)$ с 4-импульсом $Q = (q_0, \mathbf{q})$) и две линии частиц — одна входящая и одна выходящая. Но при этом надо различать конденсатные и надконденсатные частицы. Сплошные линии будут отвечать теперь надконденсатным частицам, и такой линии (с 4-импульсом $P = (\omega, \mathbf{p})$) по-прежнему отвечает множитель $iG^{(0)}(P)$. Линии же конденсатных частиц будем изображать волнистыми; этим линиям приписывается 4-импульс $P = 0$, и им

¹⁾ Подчеркнем, что поскольку эта величина возникает от разделения на части точного (гейзенберговского) ψ -оператора, то n_0 — точное значение плотности конденсата в жидкости (при $T = 0$).

сопоставляется множитель $\sqrt{n_0}$ ¹⁾. Таким образом, возникают вершины четырех видов:



(вершины с одной или двумя волнистыми линиями называют *неполными*). В каждой вершине должен выполняться «закон сохранения 4-импульса»; поэтому в вершинах б и в 4-импульс штриховой линии совпадает с 4-импульсом сплошной линии, а в вершине г он равен нулю). Волнистые линии всегда являются внешними линиями диаграммы, т. е. присоединены к ней лишь одним из своих концов, второй же конец остается свободным.

Каждая диаграмма, входящая в определение функции Грина $G(P)$, имеет две сплошные внешние линии с 4-импульсами P (входящую и выходящую), а сверх того может иметь некоторое (четное) число волнистых внешних линий; полные числа входящих и выходящих внешних концов во всякой диаграмме одинаковы (чем выражается сохранение полного числа частиц в системе — конденсатных вместе с надконденсатными). Как и для ферми-системы (и по той же причине — см. § 13), допустимы только диаграммы, не распадающиеся на две (или более) не связанные друг с другом части. В отличие от случая ферми-систем, меняется, однако, правило, определяющее общий знак, с которым диаграммы входят в iG : все диаграммы входят с одинаковыми знаками (т. е. устраняется указанное на с. 74 правило 3).

Каждая из штриховых линий в диаграмме имеет на своих двух концах полную или неполную вершину. Это не могут, однако, быть две вершины типа (32.2г): не имея ни одного сплошного конца, такая фигура вообще не может быть присоединена к диаграмме функции Грина. Это не могут быть также вершины типов (32.2г) и (32.2в) (или (32.2г) и (32.2б)): при наличии трех волнистых концов сохранение 4-импульса в вершинах привело бы в такой фигуре к обращению в нуль также и 4-импульса четвертого конца, т. е. мы пришли бы к фигуре со всеми четырьмя конденсатными (волнистыми) концами.

¹⁾ Точнее, входящей в вершину волнистой линии должен сопоставляться множитель Ξ , а выходящей — множитель Ξ^* ; ввиду вещественности Ξ эти множители фактически одинаковы.

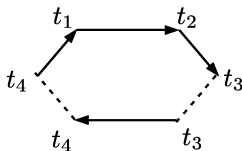
Значительное число диаграмм в каждом порядке теории возмущений, построенных по описанным правилам, однако, тождественно обращается в нуль. Причиной этого исчезновения является отсутствие надконденсатных частиц в основном состоянии идеального бозе-газа. Это в особенности ясно видно, если проследить за происхождением диаграмм в координатном представлении: равны нулю все свертки вида $\langle \hat{\Psi}'^+ \hat{\Psi}' \rangle$, в которых оператор уничтожения надконденсатных частиц стоит справа и действует на основное состояние первым; остаются только свертки вида $\langle \hat{\Psi}' \hat{\Psi}'^+ \rangle$ ¹).

Так обращаются в нуль диаграммы с «замкнутой на себя» сплошной линией: такая линия возникает от свертки $\langle \hat{\Psi}'^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}'(t, \mathbf{r}) \rangle$, представляющей плотность надконденсатных частиц. Далее, равны нулю диаграммы, содержащие сплошную линию, замкнутую штриховой линией:



Такая линия возникает от свертки $\langle \hat{\Psi}'^+(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}'(t, \mathbf{r}_1) \rangle$ двух ψ -операторов внутри одного и того же оператора взаимодействия $\hat{V}(t)$, в котором $\hat{\Psi}'^+$ стоят слева от $\hat{\Psi}'$.

Наконец, равны нулю все диаграммы, в которых можно провести замкнутый контур по некоторой последовательности сплошных и штриховых линий так, что направления сплошных линий вдоль всего контура одинаковы. Изобразим контур такого рода, указав у точек на концах линий временные аргументы ψ -операторов:



Аргументы на концах каждой штриховой линии одинаковы²). Аргументы же функций $G^{(0)}$, отвечающих сплошным линиям, равны разностям $t_2 - t_1$, $t_3 - t_2$, $t_4 - t_3$, $t_1 - t_4$; для любого замкнутого контура их сумма будет равна нулю, так что хотя бы один из них отрицателен и соответствующая функция $G^{(0)}$ обратится в нуль.

¹) По аналогичной причине обращались в нуль некоторые диаграммы для рассеяния двух частиц в вакууме — см. § 16.

²) Напомним, что в пространственно-временном представлении диаграмм штриховой линии между точками 1 и 2 сопоставляется множитель $iU(X_1 - X_2)$, содержащий δ -функцию $\delta(t_1 - t_2)$.

Описанные правила относятся и к диаграммам, определяющим аномальную функцию Грина, с той лишь разницей, что обе сплошные внешние линии должны быть выходящими (для функции F) или обе входящими (для функции F^+). Соответственно становятся неодинаковыми в этих диаграммах числа входящих и выходящих волнистых линий — так, чтобы общее число всех выходящих линий осталось равным общему числу входящих. Одной из внешних сплошных линий приписывается 4-импульс P , а другой — 4-импульс $-P$ (где P — аргумент искомой функции $F(P)$ или $F^+(P)$)¹; сумма 4-импульсов обеих этих линий должна быть равна нулю в силу «закона сохранения 4-импульса», примененного к диаграмме в целом.

Вычисленные по диаграммной технике функции Грина содержат два параметра — химический потенциал μ и плотность конденсата n_0 ; эти параметры надо еще связать с плотностью жидкости $n = N/V$. Одно соотношение между этими тремя величинами дает формула (31.6), следующая непосредственно из определения функции Грина. В качестве второго соотношения можно пользоваться полученным ниже уравнением (33.11), явно выражающим μ в терминах понятий диаграммной техники.

§ 33. Собственно-энергетические функции

Изучим более подробно структуру диаграмм для функций Грина, введя в рассмотрение понятие о *собственно-энергетической функции* подобно тому, как это было сделано в § 14 для ферми-систем: путем рассмотрения совокупности всех диаграмм (с двумя внешними сплошными линиями), которые не могут быть рассеяны на две части пересечением лишь одной сплошной линии. В отличие от § 14, однако, теперь возникают различные возможности в смысле направления внешних линий диаграмм: наряду с диаграммами с одной входящей и одной выходящей линией существуют диаграммы с двумя выходящими или двумя входящими линиями. Соответственно этому, возникают собственно-энергетические части трех родов:

$$\begin{array}{ccc}
 \begin{array}{c} \leftarrow \text{---} i\Sigma_{11} \text{---} \leftarrow \\ \bigcirc \\ \leftarrow P \quad \quad P \rightarrow \end{array} &
 \begin{array}{c} \leftarrow \text{---} i\Sigma_{20} \text{---} \leftarrow \\ \bigcirc \\ \leftarrow -P \quad \quad P \rightarrow \end{array} &
 \begin{array}{c} \leftarrow \text{---} i\Sigma_{02} \text{---} \leftarrow \\ \bigcirc \\ \leftarrow P \quad \quad -P \rightarrow \end{array}
 \end{array} \quad (33.1)$$

(в этих обозначениях первый индекс у Σ указывает число входящих, а второй — число выходящих внешних сплошных

¹) Поскольку F — четная функция своего аргумента, то выбор общего знака P здесь несуществен.

линий). Наряду со сплошными внешними линиями собственно энергетические диаграммы имеют, вообще говоря, также и волнистые (конденсатные) свободные концы. Эти концы включаются в определение собственно-энергетической функции, изображенной здесь кружком. Мы увидим ниже, что функции $\Sigma_{02}(P)$ и $\Sigma_{20}(P)$ фактически совпадают

$$\Sigma_{02}(P) = \Sigma_{20}(P). \quad (33.2)$$

Сразу же отметим также, что поскольку P и $-P$ входят в определение этих функций симметричным образом, они четны по своему аргументу:

$$\Sigma_{02}(P) = \Sigma_{02}(-P). \quad (33.3)$$

Приведем для иллюстрации все отличные от нуля диаграммы функций Σ_{11} и Σ_{02} в двух первых порядках теории возмущений

$$P \text{ (circle) } P = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4}, \quad (33.4)$$

$$P \text{ (circle) } -P = \text{diagram 1} + \text{diagram 2}. \quad (33.5)$$

Составим теперь уравнения, выражающие точные функции G и F через собственно-энергетические функции.

В терминах теории возмущений разность $G(P) - G^{(0)}(P)$ выражается суммой бесконечного числа диаграмм — цепочек вида

$$\begin{array}{c} \leftarrow P \text{ (circle)} \dots \text{ (circle)} \leftarrow P \text{ (circle)} \leftarrow P \\ \leftarrow P \text{ (circle)} \dots \text{ (circle)} \leftarrow P \text{ (circle)} \leftarrow P \end{array},$$

состоящих из различных чисел кружков, соединенных всеми возможными способами стрелками прямого и обратного (по сравнению с двумя крайними) направлений. Аналогичным образом, точная функция F (функция $F^{(0)} \equiv 0$) изобразится суммой цепочек, в которых две крайние стрелки имеют противоположные направления:

$$\begin{array}{c} \leftarrow -P \text{ (circle)} \leftarrow -P \text{ (circle)} \dots \text{ (circle)} \rightarrow P \text{ (circle)} \\ \leftarrow -P \text{ (circle)} \rightarrow P \text{ (circle)} \dots \text{ (circle)} \rightarrow P \text{ (circle)} \end{array}.$$

Если отсечь во всех этих цепочках крайнее звено (кружок вместе со стрелкой), как показано вертикальной штриховой линией, то совокупность оставшихся диаграмм с одинаковыми направлениями крайних стрелок снова будет совпадать с точной функций G , а совокупность диаграмм с противоположными направлениями крайних стрелок — с точной функцией F .

Введем графическое обозначение этих функций жирными одно- и двусторонними стрелками

$$\begin{array}{ccc} \overleftarrow{iG(P)} & \overleftrightarrow{iF(P)} & \overrightarrow{iF^+(P)} \\ P & P \quad -P & P \quad -P \end{array} \quad (33.6)$$

Тогда сделанные утверждения запишутся в виде графических равенств, составленных из скелетных диаграмм:

$$\begin{array}{l} \overleftarrow{P} = \overleftarrow{P} + \overleftarrow{P} \bigcirc \overleftarrow{P} + \overleftrightarrow{P} \bigcirc \overleftarrow{P} \\ \overleftrightarrow{-P} \overrightarrow{P} = \overleftarrow{-P} \bigcirc \overleftrightarrow{-P} \overrightarrow{P} + \overleftarrow{-P} \bigcirc \overrightarrow{P} \end{array} \quad (33.7)$$

(ср. аналогичное уравнение (14.4)). В аналитическом виде эти равенства дают¹⁾

$$\begin{aligned} G(P) &= [1 + \Sigma_{11}(P)G(P) + \Sigma_{20}(P)F(P)]G^{(0)}(P), \\ F(P) &= G^{(0)}(-P)[\Sigma_{11}(-P)F(P) + \Sigma_{02}(P)G(P)]. \end{aligned} \quad (33.8)$$

Решив эти уравнения относительно G и F и подставив выражение (31.22) для $G^{(0)}$, получим искомые формулы

$$G(P) = \frac{1}{D} \left[\omega + \frac{p^2}{2m} - \mu + \Sigma_{11}(-P) \right], \quad F(P) = -\frac{1}{D} \Sigma_{02}(P), \quad (33.9)$$

где

$$\begin{aligned} D &= [\Sigma_{02}(P)]^2 - \\ &- \left[\Sigma_{11}(-P) - \omega - i0 + \frac{p^2}{2m} - \mu \right] \left[\Sigma_{11}(-P) + \omega - i0 + \frac{p^2}{2m} - \mu \right]. \end{aligned} \quad (33.10)$$

Подчеркнем, что эти соотношения не зависят от внутренней структуры собственно-энергетических функций, а потому не связаны и с предположением о парности взаимодействий между частицами, так что они верны для любой бозе-жидкости.

¹⁾ Аналогичную систему уравнений можно было бы написать для G и F^+ , причем она отличалась бы от (33.8) лишь заменой Σ_{02} и Σ_{20} друг на друга. Поскольку $F = F^+$, то отсюда следует равенство (33.2).

Энергия элементарных возбуждений в жидкости в зависимости от импульса $\mathbf{p}$ определяется полюсами функций G и F по отношению к переменной ω . При малых $\mathbf{p}$ эти возбуждения являются фононами и их энергия стремится к нулю вместе с $\mathbf{p}$. Поэтому функция (33.10) должна обращаться в нуль при $\mathbf{p} = 0$, $\omega = 0$. Отсюда находим равенство

$$[\Sigma_{11}(0) - \mu]^2 = \Sigma_{02}^2(0).$$

Как уравнение по отношению к μ , оно имеет два корня, из которых должен быть выбран

$$\mu = \Sigma_{11}(0) - \Sigma_{02}(0). \quad (33.11)$$

Действительно, в длинноволновом пределе ψ -оператор дается выражением (27.2) и его надконденсатная часть $\hat{\Psi}' = \hat{\Psi} - \sqrt{n_0} \approx \approx i\sqrt{n_0}\hat{\Phi}$, так что $\hat{\Psi}'^+ = -\hat{\Psi}'$ и затем $F \approx -G$; последнее равенство выполняется именно при выборе (33.11), когда числители в (33.9) (в пределе $P \rightarrow 0$) отличаются только знаком. Равенство (33.11) и есть то второе соотношение (см. конец § 32), которое вместе с соотношением (31.6) дает возможность выразить параметры μ и n_0 через плотность жидкости n .

Дальнейшее разложение выражения (33.10) в ряд по ω и $\mathbf{p}$ определяет вид функции Грина в области малых значений их аргументов. При этом надо учесть, что скалярные функции Σ_{11} и Σ_{02} разлагаются по степеням $\mathbf{p}^2$, а разложение четной по всем своим аргументам функции Σ_{02} содержит лишь четные степени также и переменной ω . Представив (33.10) в виде

$$D = \left\{ \omega + \frac{1}{2} [\Sigma_{11}(P) - \Sigma_{11}(-P)] \right\}^2 - \left\{ \frac{p^2}{2m} - \mu + \frac{1}{2} [\Sigma_{11}(P) + \Sigma_{11}(-P)] \right\}^2 + \Sigma_{02}^2(-P),$$

сразу заключаем, что первые неисчезающие члены разложения имеют вид $D = \text{const}(\omega^2 - u^2 p^2 + i0)$, где u — постоянная, представляющая собой, очевидно, скорость звука в жидкости. Заметив также, что в силу (33.11) числители в (33.9) при $\omega, \mathbf{p} \rightarrow 0$ отличаются только знаком, найдем, что

$$G = -F = \frac{\text{const}}{\omega^2 - u^2 p^2 + i0}.$$

Значение постоянной в числителе можно определить, вычислив по этой гриновской функции импульсное распределение частиц

$N(\mathbf{p})$ (при малых $\mathbf{p}$) и сравнив его с известным уже нам распределением (27.7). Интеграл

$$N(\mathbf{p}) = i \lim_{t \rightarrow -0} \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega, \mathbf{p}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}$$

(ср. (7.23)) вычисляется путем замыкания пути интегрирования бесконечно удаленной полуокружностью в верхней полуплоскости (ср. замечание в конце § 7) и соответственно определяется вычетом в полюсе $\omega = -up + i0$. В результате получим $N(\mathbf{p}) = \text{const}/2up$ и сравнение с (27.7) дает $\text{const} = n_0 m u^2/n$. Таким образом, окончательно находим следующее выражение функций Грина при малых ω и $\mathbf{p}$:

$$G = -F = \frac{n_0 m u^2}{n(\omega^2 - u^2 p^2 + i0)}. \quad (33.12)$$

Отметим, что эта функция совпадает (с точностью до нормировочного коэффициента) с функцией Грина фононного поля (см. задачу в § 31) — вполне естественный результат, поскольку в области малых ω , $\mathbf{p}$ все элементарные возбуждения в бозе-жидкости являются фононами.

Наконец, проиллюстрируем полученные формулы в применении к рассмотренной в § 25 модели почти идеального бозе-газа с парным взаимодействием между частицами. В первом приближении теории возмущений Σ_{11} и Σ_{02} определяются первыми двумя диаграммами (33.4) и первой диаграммой (33.5). Раскрыв их в аналогичном виде, получим

$$\Sigma_{11} = n_0[U_0 + U(\mathbf{p})], \quad \Sigma_{02} = n_0 U(\mathbf{p}).$$

С той же точностью плотность конденсата n_0 в этих формулах можно заменить полной плотностью газа n . Как было указано в § 25, в этой модели импульсы частиц газа можно считать малыми, соответственно чему фурье-компоненты $U(\mathbf{p})$ можно заменить их значением U_0 при $\mathbf{p} = 0$. Тогда

$$\Sigma_{11} = 2nU_0, \quad \Sigma_{02} = nU_0. \quad (33.13)$$

Подстановка этих выражений в (33.11) дает $\mu = nU_0$ — в согласии с (25.6). Подстановка же в (33.9), (33.10) приводит к следующим формулам для функций Грина:

$$\begin{aligned} G(\omega, \mathbf{p}) &= \frac{\omega + p^2/2m + nU_0}{\omega^2 - \varepsilon^2(p) + i0}, \\ F(\omega, \mathbf{p}) &= \frac{-nU_0}{\omega^2 - \varepsilon^2(p) + i0}, \end{aligned} \quad (33.14)$$

где

$$\varepsilon(p) = \left[\left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 + \frac{p^2}{m} n U_0 \right]^{1/2}.$$

Из вида знаменателей этих функций ясно, что $\varepsilon(p)$ — энергия элементарных возбуждений — в согласии с полученным ранее другим способом результатом (25.10), (25.11).

§ 34. Распад квазичастиц

Конечная продолжительность жизни (затухание) квазичастицы в квантовой жидкости может быть связана как с ее столкновениями с другими квазичастицами, так и с ее самопроизвольным распадом на две (или более) новые квазичастицы. При температуре $T \rightarrow 0$ первый источник затухания исчезает (так как вероятность столкновений стремится к нулю вместе с плотностью числа квазичастиц), и тогда затухание возникает лишь от распада квазичастиц.

Рассмотрим распад квазичастицы (с импульсом $\mathbf{p}$) на две. Если $\mathbf{q}$ — импульс одной из возникающих квазичастиц, то импульс другой есть $\mathbf{p} - \mathbf{q}$, и закон сохранения энергии дает условие

$$\varepsilon(p) = \varepsilon(q) + \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|). \quad (34.1)$$

Может оказаться, что в некоторой области значений p это равенство не выполняется ни при каких $\mathbf{q}$; тогда квазичастицы в этой области будут вообще не затухающими (если, конечно, невозможен также и распад на большее число квазичастиц).

По мере изменения p затухание возникает при значении $p = p_c$ (порог распада), при котором впервые появляются корни уравнения (34.1).

Отметим прежде всего, что в точке $p = p_c$ правая часть равенства (34.1), как функция от $\mathbf{q}$, имеет экстремум. Действительно, пусть экстремальное значение суммы $\varepsilon(q) + \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|)$ при заданном p есть $E(p)$ (для определенности будем считать, что это — минимум). Тогда в уравнении

$$\varepsilon(p) - E(p) = \varepsilon(q) + \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) - E(p)$$

правая часть неотрицательна. Поэтому уравнение заведомо не имеет корней при значениях p , для которых $\varepsilon(p) - E(p) < 0$; корень появляется только в точке $p = p_c$, в которой $\varepsilon(p_c) = E(p_c)$.

Представив уравнение (34.1) в симметричном виде

$$\varepsilon(p) = \varepsilon(q_1) + \varepsilon(q_2), \quad \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = \mathbf{p},$$

найдем, что условие экстремума его правой части можно записать как $\partial\varepsilon/\partial\mathbf{q}_1 = \partial\varepsilon/\partial\mathbf{q}_2$ или

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2, \quad (34.2)$$

т. е. в пороговой точке две распадннe квазичастицы имеют одинаковые скорости. Здесь можно различать несколько случаев (Л. П. Питаевский, 1959).

а) Скорость квазичастицы в бозе-жидкости равна нулю при импульсе $p = p_0$, отвечающем ротонному минимуму на кривой рис. 2. Поэтому если $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2 = 0$, то это значит, что в точке порога квазичастица распадается на два ротона с импульсами p_0 и энергиями Δ . Соответственно энергия распадающейся квазичастицы $\varepsilon(p_c) = 2\Delta$, а ее импульс p_c связан с p_0 условием $\mathbf{p}_c = \mathbf{p}_{01} + \mathbf{p}_{02}$, т. е. $2p_0 \cos \theta = p_c$, где 2θ — угол разлета двух ротонов. Отсюда следует, что во всяком случае должно быть

$$p_c < 2p_0. \quad (34.3)$$

б) Если скорости $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2 \neq 0$, причем соответствующие им импульсы $\mathbf{q}_1$ и $\mathbf{q}_2$ конечны, то это значит, что распад в пороговой точке происходит на две квазичастицы с коллинеарными (параллельными или антипараллельными) импульсами¹⁾.

в) Если же скорости $\mathbf{v}_1$ и $\mathbf{v}_2$ отличны от нуля, но один из импульсов (скажем, $\mathbf{q}_1$) стремится к нулю вблизи пороговой точки, то соответствующая ему квазичастица является фономом и скорость $v_1 = u$. В этом случае мы имеем дело с порогом, за которым становится возможным рождение квазичастицей фонона. В самой пороговой точке энергия фонона равна нулю, а скорость квазичастицы как раз достигает скорости звука (совпадая со скоростями $v_1 = v_2 = u$).

г) Наконец, еще один, особый случай представляет распад фонона на два фонона, причем порогом является сама начальная точка спектра $p = 0$. Такой распад, однако, возможен лишь при определенном знаке кривизны начального (фононного) участка спектра: должно быть $d^2\varepsilon(p)/dp^2 > 0$, т. е. кривая $\varepsilon(p)$ должна загигаться вверх от начальной касательной $\varepsilon = up$. В этом легко убедиться, представив этот участок спектра в виде

$$\varepsilon(p) \approx up + \alpha p^3, \quad (34.4)$$

¹⁾ В силу изотропии жидкости направления квазичастицы $\mathbf{p}$ и ее скорости $\mathbf{v} = \partial\varepsilon/\partial\mathbf{p}$ коллинеарны, но могут быть направлены как в одинаковую, так и в противоположные стороны.

учитывающем наряду с линейным также и следующий член разложения по степеням малого импульса¹⁾. Уравнение сохранения энергии (34.1) дает тогда

$$u(p - q - |\mathbf{p} - \mathbf{q}|) = -\alpha(p^3 - q^3 - |\mathbf{p} - \mathbf{q}|^3).$$

Вблизи порога фонон испускается под малым углом θ к направлению начального импульса квазичастицы $\mathbf{p}$; в левой части уравнения имеем

$$p - q - |\mathbf{p} - \mathbf{q}| \approx -\frac{pq}{p - q}(1 - \cos \theta), \quad (34.5)$$

а в правой достаточно положить $|\mathbf{p} - \mathbf{q}| \approx p - q$. Тогда находим

$$1 - \cos \theta = 3\alpha(p - q)^2. \quad (34.6)$$

Отсюда видно, что должно быть $\alpha > 0$.

Мы увидим ниже (§ 35), что в случаях а) и б) функция $\varepsilon(p)$ вообще не может быть продолжена за пороговую точку, оказывающуюся, таким образом, точкой окончания спектра. В случаях же в) и г) распад квазичастицы с испусканием длинноволнового фонона приводит к появлению слабого затухания, которое может быть определено с помощью теории возмущений²⁾.

Вычислим затухание фонона, связанное с его распадом на два фонона (случай г)). Матричные элементы этого процесса имеются в членах третьего порядка в гамильтониане, дающихся выражением (24.12). Для перехода из начального (i) состояния с одним фононом $\mathbf{p}$ в конечное (f) состояние с фононами $\mathbf{q}_1$ и $\mathbf{q}_2$ матричный элемент оператора возмущения равен

$$V_{fi} = -i\delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \frac{3!(2\pi\hbar)^3}{2(2V)^{3/2}} \left(\frac{u}{\rho} p q_1 q_2 \right)^{1/2} \left\{ 1 + \frac{\rho^2}{3u^2} \frac{d}{d\rho} \frac{u^2}{\rho} \right\} \quad (34.7)$$

(индекс 0 у невозмущенной плотности ρ_0 опускаем). Обратим внимание на наличие множителя $(pq_1q_2)^{1/2}$; его малость (речь

¹⁾ Дисперсионное уравнение звуковых колебаний определяет квадрат частоты ω^2 как функцию волнового вектора. Соответственно этому, регулярно разлагается по степеням импульса $\mathbf{p}$ квадрат энергии фонона $\varepsilon^2(p)$; разложение начинается с члена $\sim \mathbf{p}^2$ и ввиду изотропии жидкости происходит по степеням $\mathbf{p}^2$. Разложение же самой функции $\varepsilon(p)$ содержит, следовательно, нечетные степени p .

²⁾ Какие именно из перечисленных случаев могут фактически осуществляться — зависит от конкретного хода кривой спектра квазичастиц $\varepsilon(p)$. Эмпирические данные для жидкого гелия (^4He) свидетельствуют о наличии (при давлениях < 15 атм) небольшого начального участка фононного спектра, в котором имеется неустойчивость типа случая г). Окончание же спектра в жидком гелии имеет место, по-видимому, в точке типа случая а).

идет о распаде длинноволнового фонона) и обеспечивает применимость теории возмущений¹⁾.

Дифференциальная вероятность распада (в 1 с) дается формулой

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) \frac{V^2 d^3 q_1 d^3 q_2}{(2\pi\hbar)^6}$$

(см. III, (43.1)). При подстановке сюда (34.7) возникает квадрат δ -функции; его надо понимать как²⁾

$$[\delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)]^2 = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2). \quad (34.8)$$

Остающаяся δ -функция устраняется интегрированием по $d^3 q_2$; положив также $E_i = up$, $E_f = u(q_1 + q_2)$ получим

$$\omega = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\rho^2}{3u^2} \frac{d}{d\rho} \frac{u^2}{\rho} \right\}^2 \frac{9\pi}{4\hbar\rho} \int p q_1 (p - q_1) \delta(p - q_1 - |\mathbf{p} - \mathbf{q}_1|) \frac{d^3 q_1}{(2\pi\hbar)^3}$$

(при независимом интегрировании по $d^3 q_1$ и $d^3 q_2$ ответ должен быть поделен на 2 для учета тождественности двух фононов). Наконец, выразив аргумент δ -функции в виде (34.5) и произведя интегрирование по $d^3 q_1 = 2\pi q_1^2 dq_1 d\cos\theta$ (по области $q_1 \leq p$), найдем полную вероятность распада

$$\omega = \frac{3p^5}{320\pi\rho\hbar^4} \left\{ 1 + \frac{\rho^2}{3u^2} \frac{d}{d\rho} \frac{u^2}{\rho} \right\}. \quad (34.9)$$

Коэффициент затухания фонона $\gamma \equiv -\text{Im}\varepsilon = \hbar\omega/2$. В частности, для почти идеального газа, согласно (25.11), величина $u^2/\rho \approx 4\pi\hbar^2 a/m^3$ не зависит от плотности. В этом случае

$$\gamma = \frac{3p^5}{640\pi\hbar^3\rho} \quad (34.10)$$

(С. Т. Беляев, 1958).

¹⁾ При вычислении матричного элемента (34.7) следует учесть, что каждый из фононных операторов $\hat{c}_{\mathbf{p}}$ и $\hat{c}_{\mathbf{p}}^+$ может браться из любого из трех множителей $\tilde{\rho}$ или $\tilde{\mathbf{v}}$; отсюда множитель $3!$. Дельта-функция в (34.7) возникает от интегрирования множителя $\exp[i(\mathbf{p} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)\mathbf{r}/\hbar]$. Наконец, учтено, что направления $\mathbf{p}$, $\mathbf{q}_1$ и $\mathbf{q}_2$ почти совпадают.

²⁾ Действительно, δ -функция $\delta(\mathbf{k})$ возникает от интеграла $\int e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3 k / (2\pi)^3$. Если же вычислить другой такой же интеграл при $\mathbf{k} = 0$ (в силу наличия уже одной δ -функции), причем распространить интегрирование по конечному объему V , то получится $V/(2\pi)^3$; и это выражено формулой (34.8).

Для процесса испускания фонона квазичастицей вблизи порога типа в) вид оператора возмущения устанавливается путем рассмотрения изменения энергии квазичастицы в звуковой волне. Это изменение складывается из двух частей:

$$\delta\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\rho' + \mathbf{v}\mathbf{p}.$$

Первый член связан с изменением плотности жидкости, от которой энергия квазичастицы зависит как от параметра. Второй член (в котором $\mathbf{v}$ — скорость жидкости в звуковой волне) есть изменение энергии квазичастицы благодаря макроскопическому движению жидкости; поскольку длина волны испускаемого (вблизи порога) фонона велика по сравнению с длиной волны квазичастицы, можно считать, что последние находятся в однородном потоке жидкости, и тогда изменение ее энергии определяется, как было объяснено в начале § 23. Оператор возмущения получается из $\delta\varepsilon$ заменой $\mathbf{v} = \nabla\varphi$ и ρ' вторично-квантованными операторами (24.10), а $\mathbf{p}$ — оператором импульса квазичастицы $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$:

$$\hat{V} = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\hat{\rho}' + \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{v}}) \quad (34.11)$$

(во втором члене произведена симметризация произведения для приведения его к эрмитову виду). Вычисление вероятности испускания фонона производится далее аналогично тому, как это было сделано выше для распада фонона (см. задачу).

Задачи

1. Определить вероятность испускания фонона квазичастицей с импульсом p , близким к пороговому значению p_c , при котором скорость квазичастицы достигает скорости звука.

Решение. Матричный элемент оператора (34.11) берется для рождения одного фонона (с импульсом $\mathbf{q}$) с одновременным переходом квазичастицы между состояниями (плоскими волнами) с импульсами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$. Вблизи порога импульс фонона $q \ll p_c$, а направление $\mathbf{q}$ почти совпадает с направлением $\mathbf{p}^1$). С учетом этого находим

$$V_{fi} = -i(2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \frac{A}{V^{3/2}} \left(\frac{qu}{2\rho} \right)^{1/2},$$

¹) Для определенности рассматриваем случай, когда фонон испускается именно в таком (а не в обратном) направлении. Для этого функция $\varepsilon(p)$ вблизи порога должна иметь вид

$$\varepsilon(p) \approx \varepsilon(p_c) + (p - p_c)u + \alpha(p - p_c)^2$$

(с положительным знаком в линейном члене). Из закона сохранения энергии легко убедиться, что испускание фонона возможно при этом, если $\alpha > 0$, и происходит при $p > p_c$; импульс испускаемого фонона пробегает значения в интервале $0 \leq q \leq 2(p - p_c)$.

где

$$A = p_c + \left| \frac{\rho}{u} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right|_{p=p_c}.$$

Отсюда дифференциальная вероятность испускания фонона

$$d\omega = \frac{\pi q u}{\hbar \rho} A^2 \delta[\varepsilon(p) - \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) - uq] \frac{d^3 q}{(2\pi\hbar)^3}$$

(δ -функция импульсов уже устранена интегрированием по $d^3 p'$). Написав аргумент δ -функции в приближенном виде $-uq(1 - \cos \theta)$ и произведя интегрирование по $d^3 q$, получим

$$\omega = \frac{2A^2(p - p_c)^3}{3\pi\rho\hbar^4}.$$

2. Найти условие, при котором нейтрон с начальной скоростью V может при рассеянии родить в жидкости возбуждение с импульсом $\mathbf{p}$ и энергией $\varepsilon(p)$.

Решение. Закон сохранения энергии и импульса в рассматриваемом процессе можно записать в виде уравнения (m — масса нейтрона, $\mathbf{P}$ — его начальный импульс):

$$\frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \frac{(\mathbf{P} - \mathbf{p})^2}{2m} = \varepsilon(p),$$

или

$$V_p \cos \theta = \varepsilon(p) + \frac{p^2}{2m},$$

где θ — угол между $\mathbf{P}$ и $\mathbf{p}$. Таким образом, искомое условие имеет вид

$$V \geq \frac{\varepsilon(p)}{p} + \frac{p}{2m}.$$

§ 35. Свойства спектра вблизи точки его окончания

В этом параграфе мы рассмотрим свойства спектра бозе-жидкости вблизи порогов распада элементарных возбуждений на две квазичастицы, из которых ни одна не является фононом (случаи а) и б) из § 34)¹⁾. В противоположность распадам с рождением фонона, к этим случаям теория возмущения неприменима, и их исследование требует выяснения характера особенностей, которые имеют в пороговых точках гриновские функции жидкости. С другой стороны, тот факт, что нас будут интересовать только эти особенности, позволяет существенно схематизировать и тем самым упростить вычисления. В частности, можно не делать различия между функциями G и F (поскольку их аналитические свойства одинаковы) и поступать так, как если бы существовал только один тип гриновских функций; учет различия между G и F привел бы лишь к появлению в уравнениях

¹⁾ Содержание этого параграфа принадлежит Л. П. Питаевскому (1959).

нескольких аналогичных (по своим аналитическим свойствам) членов, что не отразилось бы на результатах.

Тот факт, что интересующая нас особенность гриновской функции связана с распадом квазичастицы на две другие, в терминах диаграммной техники означает, что она происходит от диаграмм вида

(35.1)

которые могут быть рассеяны по двум сплошным линиям, т. е. которые содержат в себе двухчастичные промежуточные состояния. В этих диаграммах по промежуточному 4-импульсу $Q = (q_0, \mathbf{q})$ производится интегрирование, причем определяющую (в смысле возникновения особенности) роль играет область значений Q и $P-Q$, с которыми распадные квазичастицы (продукты распада) рождаются вблизи порога. Основным для излагаемой ниже теории является утверждение, что эта область значений 4-импульса не является особой для функции Грина $G(Q)$: в ней она имеет обычный полюсный вид

$$G(Q) \equiv G(q_0, \mathbf{q}) \propto [q_0 - \varepsilon(q) + i0]^{-1}, \quad (35.2)$$

где функция $\varepsilon(q)$ — энергия распадных квазичастиц — не имеет особенностей. Физическая выделенность этой области состоит лишь в том, что в ней квазичастица могла бы «слипнуться» с другой квазичастицей; но этот процесс невозможен при нуле температуры ввиду отсутствия реальных возбуждений. Особой областью для функции Грина являются лишь значения P (внешние линии диаграмм (35.1)) вблизи порога распада исходной квазичастицы.

Двум соединительным линиям на диаграмме (35.1) отвечают множители $G(Q)G(P-Q)$, а по Q производится интегрирование. При этом, ввиду существенности лишь малой области значений Q , остальные множители в диаграмме можно считать при интегрировании постоянными, равными их значению при пороговом значении $Q = Q_c$ ¹⁾. Таким образом, в диаграмме

¹⁾ Это утверждение следует уточнить. Дело в том, что множители $G(Q)G(P-Q)$ не зависят от угла φ , определяющего положение плоскости $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$. Поэтому интегрирование по $d\varphi$ сводится к усреднению остальной части подынтегрального выражения по φ , после чего d^4Q можно понимать как $2\pi q^2 dq_0 dq d\cos\theta$. Именно в таком интегрировании по d^4Q существенна малая область. Это замечание относится и к другим аналогичным моментам вычислений ниже.

возникает множитель, выражающийся интегралом

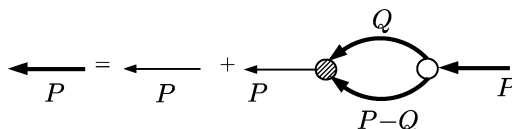
$$\Pi(P) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 Q}{[q_0 - \varepsilon(q) + i0][\omega - q_0 - \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) + i0]},$$

где $P = (\omega, \mathbf{p})$. Интегрирование по dq_0 выполняется путем замыкания пути интегрирования бесконечно удаленной полуокружностью в одном из полуплоскостей комплексного q_0 и дает

$$\Pi(P) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{\omega - \varepsilon(q) - \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) + i0}. \quad (35.3)$$

К исследованию этого интеграла мы вернемся ниже, а теперь надо выразить через него искомую точную функцию $G(P)$, просуммировав для этого все диаграммы вида (35.1).

Для функции $G(P)$ можно написать диаграммное уравнение Дайсона



$$\text{Thick line } P = \text{Thick line } P + \text{Thick line } P \text{ with shaded circle} + \text{Thick line } P \text{ with white circle}. \quad (35.4)$$

Здесь жирные линии изображают точную функцию iG , а светлые — «несобую» часть этой функции, определяемую совокупностью диаграмм, «неделимых по двум линиям». Второй же член в правой части (35.4) изображает совокупность диаграмм вида (35.1). При этом светлый кружок представляет точную «трехконцевую» вершинную функцию (обозначим ее $\Gamma(Q, P - Q, P)$), а заштрихованный — ее несобую часть, из которой исключены диаграммы, могущие быть рассеяны по двум сплошным линиям¹⁾. Как было объяснено выше, интегрирование по $d^4 Q$ приводит к появлению множителя $\Pi(P)$, причем остальные множители в диаграмме заменяются их значением при $Q = Q_c$. Таким образом, равенство (35.4) означает, что

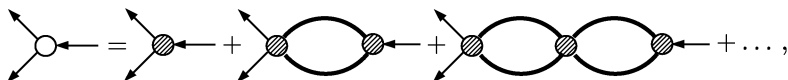
$$G(P) = a(P) + b(P)G(P)\Gamma_c(P)\Pi(P), \quad (35.5)$$

где $\Gamma_c(P) = \Gamma(Q_c, P - Q_c, P)$, а $a(P), b(P)$ — некоторые регулярные (вблизи порога $P = P_c$) функции.

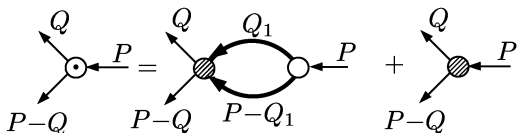
В (35.5) фигурируют две особые функции — G и Γ_c , и для выражения их через Π необходимо поэтому еще одно уравнение. Мы получим его, заметив, что точная вершинная функция Γ

¹⁾ Ситуация здесь аналогична уравнению Дайсона в квантовой электродинамике (см. IV, § 107): как и там, вся требуемая совокупность диаграмм получается путем введения поправок лишь к одной из вершинных функций.

представляется рядом «лестничного» вида



аналогичным рядом (17.3) для четырехконцевой вершинной функции. Его суммирование приводит к уравнению



(ср. (17.4)); в аналитическом виде, при $Q \approx Q_c$, оно дает

$$\Gamma_c(P) = c(P) + d(P)\Pi(P)\Gamma_c(P),$$

где $c(P)$, $d(P)$ — регулярные функции. Исключив теперь Γ_c из двух полученных уравнений, найдем искомое выражение функции Грина через Π :

$$G^{-1}(P) = \frac{A(P)\Pi(P)}{1 + B(P)\Pi(P)} + C(P), \quad (35.6)$$

где A , B , C — снова регулярные (вблизи $P = P_c$) функции.

Дальнейшие вычисления различны для разных типов распадов квазичастиц.

а) Порог распада на два ротона

В этом случае энергия $\varepsilon(q)$ распадных частиц вблизи порога дается формулой (2.6), и интеграл (35.3) принимает вид

$$\Pi(\omega, q) = \int \left\{ \omega - 2\Delta - \frac{1}{2m^*} \left[(q-p_0)^2 + (|\mathbf{p}-\mathbf{q}| - p_0)^2 \right] \right\}^{-1} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}. \quad (35.7)$$

Для интегрирования вводим новые переменные q'_z , q'_ρ , согласно определению,

$$\begin{aligned} q_x &= (p_0 \sin \theta + q'_\rho) \cos \varphi, & q_y &= (p_0 \sin \theta + q'_\rho) \sin \varphi, \\ q_z &= p_0 \cos \theta + q'_z, \end{aligned}$$

причем ось z направлена вдоль $\mathbf{p}$, а угол θ определен равенством $2p_0 \cos \theta = p$. Вблизи порога q'_z , q'_ρ малы, и с нужной точностью имеем

$$\begin{aligned} q &\approx p_0 + q'_\rho \sin \theta + q'_z \cos \theta, & |\mathbf{p} - \mathbf{q}| &\approx p_0 + q'_\rho \sin \theta - q'_z \sin \theta, \\ d^3 q &\approx p_0 \sin \theta dq'_\rho dq'_z d\varphi. \end{aligned}$$

Выражение в фигурных скобках в (35.7) принимает вид

$$\left\{ \omega - 2\Delta - \frac{1}{m^*} (q_\rho'^2 \sin^2 \theta + q_z'^2 \cos^2 \theta) \right\}$$

и после повторной замены переменных

$$q_\rho' \sin \theta = \sqrt{m^*} \rho \cos \psi, \quad q_z' \cos \theta = \sqrt{m^*} \rho \sin \psi$$

находим, интегрируя по ψ ,

$$\Pi(\omega, \mathbf{p}) = -\frac{m^* p_0}{2\pi \cos \theta} \int \frac{\rho d\rho}{-\omega + 2\Delta + \rho^2}.$$

Расходимость этого интеграла при больших ρ связана лишь со сделанными пренебрежениями и несущественна; обрезание интеграла при некотором значении $\rho^2 \gg |2\Delta - \omega|$ даст вклад лишь в регулярную часть Π . Интересующая же нас особая часть этой функции возникает от области вблизи нижнего предела интегрирования, и для нее находим

$$\Pi \propto \ln \frac{1}{2\Delta - \omega}. \quad (35.8)$$

При малых значениях $2\Delta - \omega$ этот логарифм велик; подставив (35.8) в (35.6) и разложив по его обратным степеням, получим

$$G^{-1}(\omega, p) = b + c \ln^{-1} \frac{a}{2\Delta - \omega},$$

где a, b, c — новые регулярные функции от ω и $\mathbf{p}$. В пороговой точке ($p = p_c$) энергия распадающейся квазичастицы равна 2Δ . Поскольку энергия квазичастиц определяется нулями функции G^{-1} , то это значит, что $G^{-1}(2\Delta, p_c) = 0$, а для этого должно быть и $b(2\Delta, p_c) = 0$. Но регулярная функция $b(\omega, p)$ разлагается по целым степеням разностей $p - p_c$ и $\omega - 2\Delta$; заменив также регулярные функции $a(\omega, p)$ и $c(\omega, p)$ их значениями в пороге, получим в результате следующее выражение функции Грина в околопороговой области:

$$G^{-1}(\omega, \mathbf{p}) = \beta \left[p - p_c + \alpha \ln^{-1} \frac{a}{2\Delta - \omega} \right], \quad (35.9)$$

где a, α, β — постоянные.

Приравняв это выражение нулю, мы получим вид спектра $\varepsilon(p)$ вблизи порога. Если область невозможности распада лежит при $p < p_c$, $\varepsilon < 2\Delta$, то постоянные α и a должны быть положительными и уравнение $G^{-1} = 0$ имеет здесь незатухающее решение

$$\varepsilon = 2\Delta - a \exp \left(-\frac{\alpha}{p_c - p} \right). \quad (35.10)$$

Мы видим, что кривая спектра подходит к пороговой точке с горизонтальной касательной бесконечного порядка. В области же $p > p_c$ уравнение $G^{-1} = 0$ не имеет ни вещественных, ни комплексных решений с $\varepsilon \approx 2\Delta$ при $p \approx p_c$. В этом смысле кривая спектра вообще не продолжается за пороговую точку, оканчиваясь в ней¹⁾.

б) Порог распада на две квазичастицы с параллельными импульсами

Поскольку в пороговой точке, при $p = p_c$, выражение $\varepsilon(q) + \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|)$, как функция от $\mathbf{q}$, должно иметь минимум, то вблизи порога оно имеет вид

$$\varepsilon(q) + \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) = \varepsilon_c + v_c(p - p_c) + \alpha(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0)^2 + \beta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0, \mathbf{p}_c)^2, \quad (35.11)$$

где α, β — постоянные; v_c есть скорость каждой из рождающихся в пороговой точке распадных квазичастиц, а $\mathbf{q}_0$ — импульс одной из них. Подставив (35.11) в (35.3) и введя новые переменные интегрирования согласно

$$\boldsymbol{\rho} = \mathbf{q} - \mathbf{q}_0, \quad \boldsymbol{\rho} \mathbf{p}_c = \boldsymbol{\rho} p_c \cos \psi,$$

получим

$$\Pi(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{\rho^2 d\rho d\cos\psi}{\varepsilon - \varepsilon_c - v_c(p - p_c) - \alpha\rho^2 - \beta\rho^2 p_c^2 \cos^2\psi}.$$

Этот интеграл имеет в пороговой точке корневую особенность:

$$\Pi \propto [v_c(p - p_c) - (\varepsilon - \varepsilon_c)]^{1/2}. \quad (35.12)$$

Подставив это выражение в (35.6), находим гриновскую функцию в околороговой области

$$G^{-1}(\omega, \mathbf{p}) = A(\omega, \mathbf{p}) + B(\omega, \mathbf{p})[v_c(p - p_c) - (\omega - \varepsilon_c)]^{1/2}.$$

Так как $G^{-1}(\varepsilon_c, \mathbf{p}_c) = 0$, а A и B — регулярные функции, то, разлагая последние по степеням $p - p_c$ и $\omega - \varepsilon_c$, окончательно находим

$$G^{-1} \propto [v_c(p - p_c) - (\omega - \varepsilon_c)]^{1/2} + [a(p - p_c) + b(\omega - \varepsilon_c)], \quad (35.13)$$

где a, b — постоянные.

¹⁾ Как уже было указано в примечании на с. 173, в жидком гелии спектр заканчивается, по-видимому, именно в точке такого типа (кривая на рис. 2 приближается к прямой $\varepsilon = 2\Delta$ с горизонтальной касательной).

Вид спектра определяется уравнением $G^{-1}(\varepsilon, \mathbf{p}) = 0$. Ищем его решение в виде $\varepsilon - \varepsilon_c = v_c(p - p_c) + \text{const}(p - p_c)^2$; для того чтобы оно существовало при $p < p_c$, должно быть $a + bv_c > 0$ и тогда

$$\varepsilon = \varepsilon_c + v_c(p - p_c) - (a + bv_c)^2(p - p_c)^2. \quad (35.14)$$

При том же условии в области $p > p_c$ уравнение $G^{-1} = 0$ не имеет решений с $\varepsilon \approx \varepsilon_c$ при $p \approx p_c$. Таким образом, и в этом случае спектр обрывается в пороговой точке.

§ 35*. Сверхтекучесть двумерных систем

Весьма своеобразными свойствами обладают двумерные бозе-системы — тонкие пленки жидкого гелия. Отметим, прежде всего, что в двумерном случае конденсат существует лишь при $T=0$. Плотность конденсата равна нулю при сколь угодно низкой, но конечной температуре¹⁾. Это следует из того, что если подставить $N(\mathbf{p})$ из (27.8) в интеграл $\int N(\mathbf{p}) \frac{d^2p}{(2\pi\hbar^2)}$, равный числу надконденсатных частиц, то этот интеграл будет логарифмически расходиться в области малых $\mathbf{p}$, где эта формула должна была бы быть справедлива. Это противоречие означает, что в двумерном случае неверно само лежащее в основе вывода формулы предположение о существовании конденсата при конечных температурах.

Положение здесь аналогично ситуации в двумерных кристаллах (см. V, § 137). Подобное тому, как в последних флуктуации смещения атомов размывают решетку, так флуктуации фазы уничтожают конденсат. Формальное сходство между двумя системами состоит в том, что в обоих случаях они описываются величинами, которые могут входить в выражение для энергии лишь под знаком производных. В первом случае — это векторы смещения атомов, которые не могут сами войти в энергию ввиду ее инвариантности по отношению к смещению системы как целого. Во втором случае — это фаза конденсатной волновой функции, которая не может сама войти в энергию ввиду своей неоднозначности. Тот факт, что энергия зависит лишь от градиентов этих величин и приводит в конечном счете к расходимости флуктуаций.

Мы видели в V, § 138, что логарифмическая расходимость флуктуаций приводит в двумерном кристалле к медленному

¹⁾ Эти утверждения относятся и к двумерному идеальному бозе-газу. Нетрудно убедиться в том, что в двумерном случае химический потенциал такого газа обращается в нуль только при $T \rightarrow 0$.

(степенному) убыванию корреляционной функции. Аналогично, в двумерной бозе-системе матрица плотности (26.7) не стремится при $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$ к постоянному пределу как при наличии конденсата, а убывает, но лишь по степенному закону (*J. W. Kane, L. Kadanov, 1967.*)

Переходя к количественному исследованию вопроса, введем некоторые обозначения. Обозначим через d_s двумерную сверхтекучую плотность, т. е. массу, отнесенную к единице площади. Для слоя гелия макроскопической толщины L эту величину можно записать как $d_s = \rho_s L$, где ρ_s — обычная объемная сверхтекучая плотность. Для тонких пленок эта связь отсутствует. Параметры таких пленок вообще не определяются объемными свойствами.

Волновую функцию конденсата при $T = 0$ запишем в виде

$$\Xi = \sqrt{\nu_0} e^{i\Phi},$$

где введена (при $T = 0$) поверхностная плотность конденсата ν_0 . При конечных температурах фазу Φ следует рассматривать как флуктуирующую величину, по флуктуациям которой должно производиться усреднение. Вероятность этих флуктуаций имеет вид

$$w = \exp\left[-\frac{\Delta F}{T}\right], \quad (35^*.1)$$

причем свободная энергия ΔF равна кинетической энергии жидкости (ср. (28.6)):

$$\Delta F = d_s \frac{\hbar^2}{2m^2} \int (\nabla \Phi)^2 dS.$$

Волновую функцию конденсата при конечных температурах следовало бы определить как $\langle \Xi \rangle$. Эта величина, однако, в согласии со сказанным в начале параграфа, равна нулю. Для доказательства воспользуемся полученным в задаче к § 111 (см. V) результатом, согласно которому для линейной однородной функции y переменных со средними значениями равными нулю, подчиняющихся гауссовой статистике, имеет место формула

$$\langle \exp(y) \rangle = \exp(\langle y^2 \rangle / 2). \quad (35^*.2)$$

(В квантовом случае такое утверждение справедливо для операторов, подчиняющихся теореме Вика. Это было использовано в VIII, § 127 при вычислении фактора Дебая–Валлера.) Применив формулу (35^*.2) к среднему от Ξ , получим

$$\langle \Xi \rangle = \sqrt{\nu_0} \exp(-\langle \Delta \Phi \rangle / 2) = \sqrt{\nu_0} \exp(-\varphi(0)^2), \quad (35^*.3)$$

где $\varphi(r)$ — введенная в § 28 корреляционная функция флуктуаций фазы. (Несущественное среднее значение фазы положено равным нулю.) Выражение для $\varphi(r)$ в двумерном случае можно получить из трехмерной формулы (28.9) очевидными заменами. В результате:

$$\varphi(r) = T \frac{m^2}{d_s \hbar^2} \int \frac{1}{k^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}. \quad (35^*.4)$$

Этот интеграл расходится на малых k при любых r , так что правая часть (35^*.3) обращается в нуль.

Вычислим теперь матрицу плотности системы¹⁾. Она равна по определению:

$$\rho(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \langle \Xi^*(\mathbf{r}_2) \Xi(\mathbf{r}_1) \rangle = \nu_0 \langle \exp[i(\Delta\Phi(\mathbf{r}_1) - \Delta\Phi(\mathbf{r}_2))] \rangle$$

(разумеется, как и в (35^*.3), нельзя разлагать экспоненту по флуктуациям фазы). Используя опять для усреднения формулу (35^*.2), получаем

$$\rho(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \nu_0 \exp[-\langle (\Delta\Phi(\mathbf{r}_1) - \Delta\Phi(\mathbf{r}_2))^2 \rangle / 2].$$

Выражение в квадратных скобках, очевидно, равно:

$$\langle (\Delta\Phi(\mathbf{r}_1) - \Delta\Phi(\mathbf{r}_2))^2 \rangle,$$

так что

$$\rho(r) = \nu_0 \exp[\varphi(r) - \varphi(0)].$$

Согласно (35^*.4)

$$\varphi(r) - \varphi(0) = T \frac{m^2}{d_s \hbar^2} \int \frac{1}{k^2} (e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - 1) \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}. \quad (35^*.5)$$

Этот интеграл сходится на малых k . Расходимость же на больших k связана с неприменимостью классической теории флуктуаций при $k \geq k_{\max} \sim T/\hbar u$ (u — скорость звука), так что интеграл следует обрезать на этом значении k . В результате главный вклад в интеграл вносит область значений

$$k_{\max} \geq k \geq 1/r,$$

в которой с логарифмической точностью можно пренебречь экспоненциальным членом в скобке. После этого простое интегрирование дает

$$\varphi(r) - \varphi(0) = -T \frac{m^2}{2\pi d_s \hbar^2} \ln \frac{1}{rk_{\max}}.$$

¹⁾ Следующие ниже вычисления аналогичны вычислениям корреляционной функции флуктуаций плотности двумерного кристалла в V, § 138.

Окончательный вид матрицы плотности:

$$\rho(r) = \nu_0 \frac{1}{(rk_{\max})^\eta}, \quad (35^*.6)$$

где показатель убывания равен

$$\eta = T \frac{m^2}{2\pi d_s \hbar^2}. \quad (35^*.7)$$

Разумеется, жидкость с убывающей по медленному степенному закону (35*.6) матрицей плотности качественно отличается от обычной жидкости, чья матрица плотности убывает экспоненциально. Центральным положением излагаемой теории является утверждение, что такая жидкость с медленно убывающими корреляциями является сверхтекучей. Несмотря на то, что число конденсатных частиц равно нулю, сверхтекучая плотность d_s отлична от нуля. (Это, конечно, предполагалось при выводе формул (35*.6), (35*.7), в которые d_s входит явно. Здесь существенно, что предположение о конечности d_s не приводит к противоречию, в отличие от предположения об отличном от нуля числе частиц в конденсате.)

В действительности разрушающие конденсат длинноволновые флуктуации фазы представляют собой почти однородное в пространстве ее изменение, не влияющее на механические свойства жидкости. Это делается особенно ясным, если обратиться к такому фундаментальному проявлению сверхтекучести, как потенциальность течения, т. е. равенству нулю циркуляции скорости по замкнутому контуру. Такое равенство эквивалентно требованию однозначности фазы, которое не может быть нарушено длинноволновыми ее флуктуациями. Оно нарушается, однако, самопроизвольным рождением внутри контура квантованных вихревых нитей. Такой процесс невозможен в трехмерном теле, поскольку вихревые нити имели бы в этом случае макроскопическую длину, а следовательно и энергию. В пленке же атомной толщины пронизывающие ее поперек вихревые нити имеют энергию атомного порядка и могут возбуждаться тепловым образом. Такая «точечная» вихревая нить представляет собой своеобразное элементарное возбуждение двумерной системы. Она отличается, однако, от обычных возбуждений тем, что ее энергия логарифмически зависит от площади пленки. Это приводит к тому, что вихревые нити могут рождаться тепловым образом только при температурах выше определенной температуры перехода¹⁾.

¹⁾ Излагаемые соображения были высказаны независимо В. Л. Березинским (1970) и Костерлицем и Таулессом. (J. M. Kosterlitz, D. Thouless, 1972.)

Заметим прежде всего, что рождение вихревой нити термодинамически выгодно, если оно уменьшает свободную энергию. Изменение свободной энергии за счет рождения вихревой нити равно $\Delta F = \Delta E - T\Delta S$, где ΔE — вклад нити в энергию, а ΔS — в энтропию. Заменяя в формуле (29.8) $L\rho_s$ на d_s , имеем

$$\Delta E = \pi d_s \frac{\hbar^2}{m^2} \ln \frac{R}{a} = \frac{\pi}{2} d_s \frac{\hbar^2}{m^2} \ln \frac{\sigma}{\sigma_0},$$

где $\sigma = \pi R^2$ — площадь пленки, $\sigma_0 = \pi a^2$. Энтропия ΔS определяется логарифмом объема фазового пространства, равным для нити, состояние которой определяется двумя ее координатами на плоскости, логарифму площади. Таким образом,

$$\Delta F = \frac{\pi}{2} d_s \frac{\hbar^2}{m^2} \ln \frac{\sigma}{\sigma_0} - T \ln \frac{\sigma}{\sigma_1}. \quad (35^*.8)$$

Знаменатель σ_1 под логарифмом в выражении для энтропии имеет размерность площади и по порядку величины равен σ_0 . С логарифмической точностью можно положить $\sigma_1 = \sigma_0$. Возникновение вихревой нити выгодно, если $\Delta F < 0$, т. е. если

$$T > T_c = \frac{\pi}{2} d_s \frac{\hbar^2}{m^2} \quad (35^*.9)$$

(*J. M. Kosterlitz, D. Thouless, 1972.*)

Подчеркнем, что логарифм площади имеется и в выражении для энтропии возбуждений обычного типа, например, ротоннов, или возбужденных атомов. Напротив, энергия «обычного» возбуждения не зависит от площади. Поэтому его рождение всегда термодинамически выгодно и некоторое количество таких возбуждений имеется при любых, сколь угодно низких, температурах. Число же вихревых нитей при $T < T_c$ строго равно нулю.

Отметим также то важное обстоятельство, что поскольку существование макроскопического углового момента пленки термодинамически невыгодно, вихревые нити противоположных знаков циркуляции должны рождаться в равных количествах, так что средний момент равен нулю. Это позволяет рассматривать рождение вихревых нитей как процесс диссоциации пар связанных вихрей.

Поскольку, как уже было отмечено в § 29, появление вихревых нитей означает нарушение сверхтекучести, при температурах выше T_c сверхтекучесть исчезает. T_c есть температура фазового перехода в нормальное состояние. Этот переход, однако, отличен от фазовых переходов первого и второго рода и специфичен именно для двумерных систем. Сверхтекучая плотность d_s обращается в точке перехода в нуль скачком. Непосредственно ниже точки перехода эта плотность связана с температурой перехода T_c универсальным соотношением (35*.9).

Согласно (35*.7) и (35*.9) показатель убывания матрицы плотности η равен в точке перехода $1/4$, так что

$$\rho(r) \sim r^{-1/4}. \quad (35*.10)$$

Выше точки перехода эта функция ввиду равенства нулю d_s убывает экспоненциально.

Мы увидим ниже, что при приближении сверху к точке перехода плотность вихревых нитей стремится к нулю по экспоненциальному закону. Соответственно, экспоненциально мал и вклад вихрей в термодинамические функции, так что в точке перехода непрерывны все производные термодинамических функций.

Своеобразная ситуация имеет место в пленках макроскопической толщины, для которых $d_s = \rho_s L$. Вдали от λ -точки, где $\rho_c \sim \rho$, температура T_c , если ее оценить согласно (35*.9), оказывается высокой. Двумерность системы здесь ни в чем не проявляется. По мере приближения к λ -точке, однако, ρ_s уменьшается и в конце концов достигает значения

$$\rho_s(T) = (2Tm^2/\pi L\hbar^2) \approx (2T\lambda m^2/\pi L\hbar^2).$$

При этой температуре пленка теряет сверхтекучесть по описанному в этом параграфе механизму. Таким образом, в толстой пленке переход с образованием вихрей происходит чуть ниже λ -точки, тем ближе к ней, чем толще пленка.

Описанные выше явления характерны не только для сверхтекучего гелия. Они могут происходить и в других двумерных системах, в которых в результате разрушения дальнего порядка флуктуациями возникает состояние с медленно убывающими корреляциями, например в двумерных кристаллических пленках, о которых шла речь в V, § 137. Роль вихревых нитей в этом случае играют дислокации, перпендикулярные плоскости пленки. Энергия такой дислокации имеет вид $A \ln(\sigma/\sigma_0)^1$. Соответственно при температуре $T_c = A$ происходит фазовый переход. При температурах $T > T_c$ в пленке имеется конечная плотность дислокаций. Движение дислокаций в такой пленке делает возможным ее течение. В этом смысле она ведет себя как жидкость, и фазовый переход является переходом плавления, хотя вблизи точки перехода число дислокаций мало, а там, где их нет, имеются достаточно большие «твердые» участки.

Число вихревых нитей определяется из условия равенства нулю их химического потенциала. Чтобы написать выражение для него, заметим, что добавка (35*.8) к свободной энергии и есть

¹⁾ См. VII, задачу 2 к § 27. В рассмотренной в этой задаче модели дислокации в изотропном твердом теле $A = L\mu b^2/8\pi$, где μ — модуль сдвига, b — вектор Бюргерса дислокации, L — толщина пленки.

химический потенциал, однако записанный для случая наличия всего одной нити на площади пленки. Чтобы перейти к случаю, когда имеется N вихревых нитей на единицу площади, достаточно заменить полную площадь σ на площадь, приходящуюся на одну нить, т. е. на $1/N$. Вводя вместо σ_0 и σ_1 два других параметра N_0 и ε_0 (вблизи T_c их можно считать постоянными), получаем химический потенциал нитей:

$$\mu_v = \left(\frac{\pi \hbar^2}{2m^2} d_s(T) - T \right) \ln \frac{N_0}{N} + \varepsilon_0. \quad (35^*.11)$$

(По порядку величины $N_0 \sim \sigma_0^{-1}$, $\varepsilon_0 \sim T_c$.)

При $T = T_c$ коэффициент перед логарифмом равен нулю, при $T > T_c$ он должен быть отрицателен. Закон обращения этого коэффициента в нуль нельзя установить из общих соображений. Предполагая, в духе флуктуационной теории фазовых переходов второго рода, что это обращение происходит по некоторому степенному закону

$$\left[\frac{\pi \hbar^2}{2m^2} d_s(T) - T \right] \sim (T - T_c)^\nu,$$

где ν — некоторый критический показатель, и приравнявая нулю выражение для химического потенциала, находим температурную зависимость равновесного числа нитей выше точки перехода:

$$N = N_0 \exp \left(- \frac{b}{(T - T_c)^\nu} \right). \quad (35^*.12)$$

При $T \rightarrow T_c$ это число, как уже говорилось, экспоненциально мало.

Среднее расстояние между вихрями $\xi \sim N^{-1/2}$ одновременно определяет корреляционный радиус флуктуаций, на котором происходит экспоненциальное убывание матрицы плотности. Мы видим, что вблизи точки перехода этот радиус экспоненциально велик.

ФУНКЦИИ ГРИНА ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

§ 36. Гриновские функции при конечных температурах¹⁾

Определение функции Грина макроскопической системы при отличных от нуля температурах отличается от их определения при нулевой температуре лишь тем, что усреднение по основному состоянию замкнутой системы заменяется усреднением по распределению Гиббса: символ $\langle \dots \rangle$ будет теперь обозначать

$$\langle \dots \rangle = \sum_n \omega_n \langle n | \dots | n \rangle, \quad \omega_n = \exp \frac{\Omega - E'_n}{T}, \quad (36.1)$$

где суммирование производится по всем состояниям системы (отличающимся как энергией E_n , так и числом частиц N_n), $E'_n = E_n - \mu N_n$, а $\langle n | \dots | n \rangle$ — диагональный матричный элемент по n -му состоянию. Определенные таким образом средние значения являются функциями термодинамических переменных T, μ, V .

При исследовании аналитических свойств гриновских функций при конечных температурах (*Л. Д. Ландау*, 1958) целесообразно воспользоваться так называемыми запаздывающими и опережающими функциями Грина, аналитические свойства которых оказываются более простыми²⁾. Для определенности будем говорить сначала о ферми-системах.

Запаздывающая функция Грина определяется согласно

$$iG_{\alpha\beta}^R(X_1, X_2) = \begin{cases} \langle \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) + \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \rangle, & t_1 > t_2, \\ 0, & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (36.2)$$

Для микроскопически однородной неферромагнитной системы, в отсутствие внешнего поля, эта функция (как и обычная $G_{\alpha\beta}$) сводится к скалярной функции, зависящей лишь от разности $X = X_1 - X_2$:

$$G_{\alpha\beta}^R(X_1, X_2) = \delta_{\alpha\beta} G^R(X), \quad G^R = \frac{1}{2} G_{\alpha\alpha}^R. \quad (36.3)$$

¹⁾ В § 36 – 38 пользуемся системой единиц с $\hbar = 1$.

²⁾ Эти функции принято отличать индексами R и A — от английских слов retarded и advanced.

Переход к импульсному представлению осуществляется обычным образом. Но поскольку $G^R(t, \mathbf{r}) = 0$ при $t < 0$, то в определении

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = \int \int_0^\infty e^{i(\omega t - \mathbf{p}\mathbf{r})} G^R(t, \mathbf{r}) dt d^3x \quad (36.4)$$

интегрирование по t производится фактически лишь от 0 до ∞ . Смещение переменной ω в верхнюю полуплоскость лишь улучшает сходимость такого интеграла. Поэтому интеграл (36.4) определяет в верхней полуплоскости ω аналитическую функцию, не имеющую особенностей¹⁾. В нижней же полуплоскости, где функция G^R определяется путем аналитического продолжения, она имеет полюсы (см. ниже).

Получим для функции G^R разложение, подобное выведенному в § 8 разложению (8.7) для функции G при $T = 0$.

Раскрыв матричный элемент $\langle n | \dots | n \rangle$ от произведения ψ -операторов по правилу матричного умножения и выразив матричные элементы в виде (8.4), получим

$$\begin{aligned} iG^R(t, \mathbf{r}) = & \\ = \frac{1}{2} \sum_{n, m} \omega_n \{ & e^{-i(\omega_{mn}t - \mathbf{k}_{mn}\mathbf{r})} \langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle \langle m | \hat{\psi}_\alpha^+(0) | n \rangle + \\ & + e^{i(\omega_{mn}t - \mathbf{k}_{mn}\mathbf{r})} \langle n | \hat{\psi}_\alpha^+(0) | m \rangle \langle m | \hat{\psi}_\alpha(0) | n \rangle, \end{aligned}$$

где

$$\omega_{mn} = E'_m - E'_n, \quad \mathbf{k}_{mn} = \mathbf{P}_m - \mathbf{P}_n.$$

Для двух членов в фигурных скобках суммирование по n и m имеет несколько различный смысл: в первом члене числа частиц в состояниях n и m связаны соотношением $N_m = N_n + 1$, а во втором: $N_m = N_n - 1$. Чтобы устранить это различие, взаимно переобозначим во второй сумме индексы m и n . Заметив также, что

$$\langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle \langle m | \hat{\psi}_\alpha^+(0) | n \rangle = |\langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2 \equiv A_{mn},$$

приводим все выражение к виду

$$iG^R(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{n, m} \omega_n e^{-i(\omega_{mn}t - \mathbf{k}_{mn}\mathbf{r})} A_{mn} (1 + e^{-\omega_{mn}/T}), \quad t > 0. \quad (36.5)$$

¹⁾ Ср. аналогичные рассуждения для функции $\alpha(\omega)$ в V, § 123. Сходство аналитических свойств функций G^R и α , разумеется, не случайно: согласно V (126.8), последняя выражается аналогичным образом через определенный операторный коммутатор.

Наконец, при вычислении интеграла (36.4) заменяем (как и в § 8) $\omega \rightarrow \omega + i0$ и окончательно находим:

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = \frac{(2\pi)^3}{2} \sum_{m,n} \omega_n \frac{A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn})}{\omega - \omega_{mn} + i0} (1 + e^{-\omega_{mn}/T}). \quad (36.6)$$

Обратим внимание на то, что все полюсы этого выражения расположены (в соответствии со сказанным выше) под вещественной осью, в нижней полуплоскости ω .

Последнее свойство достаточно для того, чтобы установить определенную связь между вещественной и мнимой частями функции — так называемое *соотношение Крамерса–Кронига*, или *дисперсионное соотношение*

$$\operatorname{Re} G^R(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G^R(u, \mathbf{p})}{u - \omega} du \quad (36.7)$$

(см. вывод такого же соотношения для $\alpha(\omega)$ в V, § 123). В его справедливости можно также убедиться и непосредственной проверкой, отделив в (36.6) вещественную и мнимую части с помощью формулы (8.11). Отметим также, что с учетом той же формулы можно переписать (36.7) в виде

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(u, \mathbf{p})}{u - \omega - i0} du, \quad (36.8)$$

где

$$\rho(u, \mathbf{p}) = -\pi \frac{(2\pi)^3}{2} \sum_{m,n} \omega_n A_{mn} \delta(u - \omega_{mn}) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn}) (1 + e^{-\omega_{mn}/T}).$$

При вещественных ω имеем $\rho = \operatorname{Im} G^R$.

Представление (36.8) приобретает более глубокий смысл при переходе к «макроскопическому пределу» $V \rightarrow \infty$ (при заданном отношении N/V). В этом пределе полюсы ω_{mn} сливаются, и функция $\rho(u)$ делается отличной от нуля при всех u (а не просто равна сумме δ -функций в дискретных точках). При этом формула (36.8) непосредственно определяет $G^R(\omega)$ в верхней полуплоскости ω и на вещественной оси. Для определения же $G^R(\omega)$ в нижней полуплоскости ω необходимо произвести аналитическое продолжение интеграла, для чего следует деформировать контур интегрирования таким образом, чтобы он всегда огибал точку $u = \omega$ снизу. При этом $G^R(\omega)$ может иметь особенности в нижней полуплоскости (на конечном расстоянии от вещественной оси), когда контур «зажимается» между полюсом $u = \omega$ и особенностью числителя.

Опережающая функция Грина вводится аналогичным образом, согласно определению,

$$iG_{\alpha\beta}^A(X_1, X_2) = \begin{cases} 0 & , \quad t_1 > t_2, \\ -\langle \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) + \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \rangle, & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (36.9)$$

Функция $G^A(\omega, \mathbf{p})$ в импульсном представлении является аналитической функцией переменной ω , не имеющей особенностей в нижней полуплоскости. Ее разложение отличается от (36.6) изменением знака перед $i0$ в знаменателях. Это значит, что на вещественной оси $G^A(\omega) = G^{R*}(\omega)$, а во всей плоскости ω :

$$G^A(\omega^*) = G^{R*}(\omega). \quad (36.10)$$

При $\omega \rightarrow \infty$ функции G^R и G^A стремятся к нулю по тому же закону, что и функция G :

$$G^R, G^A \rightarrow 1/\omega \text{ при } |\omega| \rightarrow \infty. \quad (36.11)$$

Напомним (см. вывод (8.15)), что коэффициент (единица) в этом асимптотическом выражении определяется величиной скачка функции при $t_2 = t_1$; этот скачок не зависит от температуры и одинаков для всех трех функций G^R, G^A, G , как это ясно из их определений.

Для установления связи между введенными таким образом функциями G^R, G^A и обычной функцией Грина

$$iG_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \langle T \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \rangle \quad (36.12)$$

получим для последней разложение, аналогичное (36.5). Вычисления, вполне аналогичные произведенным выше, приводят к результату¹⁾:

$$G(\omega, \mathbf{p}) = -\frac{(2\pi)^3}{2} \sum_{m,n} \omega_n A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn}) \times \\ \times \left\{ \frac{1}{\omega_{mn} - \omega} (1 + e^{-\omega_{mn}/T}) + i\pi \delta(\omega - \omega_{mn}) (1 - e^{-\omega_{mn}/T}) \right\}. \quad (36.13)$$

Сравнив (36.13) и (36.6), найдем

$$\left. \begin{matrix} G^R(\omega, \mathbf{p}) \\ G^A(\omega, \mathbf{p}) \end{matrix} \right\} = \text{Re } G(\omega, \mathbf{p}) \pm i \text{cth } \frac{\omega}{2T} \text{Im } G(\omega, \mathbf{p}). \quad (36.14)$$

¹⁾ При переходе к импульсному представлению интеграл по t разбивается на две части — от $-\infty$ до 0 и от 0 до ∞ , причем в одной из них производится переобозначение индексов суммирования m, n .

При этом, как видно из того же выражения (36.13):

$$\operatorname{sign} \operatorname{Im} G(\omega, p) = -\operatorname{sign} \omega. \quad (36.15)$$

Обратим внимание на то, что функция G , в отличие от G^R и G^A , не является аналитической функцией ω .

При $T \rightarrow 0$ имеем $\operatorname{cth}(\omega/2T) \rightarrow \operatorname{sign} \omega$, и из (36.14) следует, что на вещественной оси

$$G = \begin{cases} G^R, & \omega > 0, \\ G^A, & \omega < 0. \end{cases} \quad (36.16)$$

Таким образом, функция $G(\omega)$ при $T = 0$ представляет собой на двух вещественных полуосях ω предельные значения (при $|\operatorname{Im} \omega| \rightarrow 0$) двух различных аналитических функций: $G^R(\omega)$ на правой и $G^A(\omega)$ на левой полуоси.

Легко написать выражения функций G^R , G^A для идеального ферми-газа. Достаточно заметить, что они удовлетворяют тому же уравнению (9.6), в выводе которого использовано лишь значение скачка функции при $t_1 = t_2$. Способ же обхода полюса известен из того, что для $G^{(0)R}$ он должен находиться под, а для $G^{(0)A}$ — над вещественной осью. Отсюда следует выражение

$$G^{(0)R,A}(\omega, \mathbf{p}) = \left[\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu \pm i0 \right]^{-1}, \quad (36.17)$$

справедливое как при нулевой, так и при конечных температурах. Для функции же $G^{(0)}$ находим, согласно (36.14),

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = P \frac{1}{\omega - p^2/2m + \mu} - i\pi \operatorname{th} \frac{\omega}{2T} \cdot \delta \left(\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu \right). \quad (36.18)$$

При $T \rightarrow 0$ мы вернемся к формуле (9.7), отличающейся от (36.17) заменой $\pm i0$ на $i0 \cdot \operatorname{sign} \omega$.

Приведем аналогичные формулы для случая бозе-системы. Запаздывающая и опережающая функции Грина определяются согласно:

$$\begin{aligned} iG^R(X_1, X_2) &= \begin{cases} \langle \hat{\Psi}(X_1) \hat{\Psi}^+(X_2) - \hat{\Psi}^+(X_2) \hat{\Psi}(X_1) \rangle, & t_1 > t_2, \\ 0, & t_1 < t_2, \end{cases} \\ iG^A(X_1, X_2) &= \begin{cases} 0, & t_1 > t_2, \\ -\langle \hat{\Psi}(X_1) \hat{\Psi}^+(X_2) - \hat{\Psi}^+(X_2) \hat{\Psi}(X_1) \rangle, & t_1 < t_2. \end{cases} \end{aligned} \quad (36.19)$$

Если при этом идет речь о температурах выше λ -точки, то в этих определениях фигурируют полные ψ -операторы; при температурах же ниже λ -точки определение относится к надконденсатным операторам. Вместо (36.6) имеем теперь

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = (2\pi)^3 \sum_{m,n} \omega_n \frac{A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn})}{\omega - \omega_{mn} + i0} (1 - e^{-\omega_{mn}/T}). \quad (36.20)$$

Связь же этой функции с G дается формулой

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = \text{Re}G(\omega, \mathbf{p}) + i \operatorname{th} \frac{\omega}{2T} \cdot \text{Im}G(\omega, \mathbf{p}), \quad (36.21)$$

причем на вещественной оси

$$\text{Im}G(\omega, \mathbf{p}) < 0 \quad (36.22)$$

(функция G определяется, согласно (31.1), с усреднением по распределению Гиббса вместо усреднения по основному состоянию). Для идеального бозе-газа функция G^R дается той же формулой (36.17), а функция G :

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = P \frac{1}{\omega - p^2/2m + \mu} - i\pi \operatorname{cth} \frac{\omega}{2T} \cdot \delta\left(\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu\right). \quad (36.23)$$

Физический смысл функций Грина при отличных от нуля температурах в основном совпадает с их смыслом при $T = 0$. Разумеется, остаются справедливыми формулы, связывающие гриновскую функцию G с импульсным распределением частиц (7.23) и вообще с матрицей плотности (7.18), (31.4).

Остаются в силе также и основные утверждения о совпадении полюсов функции Грина с энергией элементарных возбуждений (поскольку, однако, сама функция G не аналитична, то при этом удобнее говорить о полюсах аналитической функции G^R , которые она имеет в нижней полуплоскости ω , или о полюсах функции G^A в верхней полуплоскости). Это утверждение снова (как и в § 8) следует из разложения (36.6). Хотя в различных членах этого разложения фигурируют теперь частоты переходов ω_{mn} между любыми двумя состояниями системы, но (после перехода к макроскопическому пределу) по-прежнему остаются полюсы, отвечающие лишь переходам из основного состояния в состояния с одним элементарным возбуждением. Переходы же между двумя возбужденными состояниями не приводят к возникновению полюса в макроскопической одночастичной функции Грина по той же причине, по которой не приводят к возникновению полюса и переходы из основного в состояния с более чем одной квазичастицей (см. § 8): разность энергий таких состояний не определяется однозначным образом разностью их импульсов.

Подчеркнем также, что при отличных от нуля температурах продолжительность жизни квазичастиц связана не только с их собственной неустойчивостью, но и с их столкновениями друг с другом. Затухание от обоих этих источников должно быть слабым для того, чтобы понятие о квазичастицах продолжало иметь смысл.

§ 37. Температурные функции Грина

Для построения диаграммной техники вычисления гриновской функции при конечных температурах надо было бы перейти от гейзенберговского представления ψ -операторов к представлению взаимодействия, как это было сделано в § 12. При этом мы снова пришли бы к выражению, отличающемуся от (12.12) лишь тем, что усреднение производится не по основному состоянию. Это отличие, однако, очень существенно: усреднение оператора $\hat{S}^{-1}$ уже не может быть отделено от усреднения остальных множителей, как это было сделано при переходе от (12.12) к (12.14); дело в том, что неосновное состояние под влиянием оператора $\hat{S}^{-1}$ переводится не само в себя, а в некоторую суперпозицию возбужденных состояний с той же энергией (включающую в себя результаты всевозможных процессов взаимного рассеяния квазичастиц). Это обстоятельство приводит к существенному усложнению диаграммной техники — возникают новые члены от свертываний, в которых участвуют также и ψ -операторы из $\hat{S}^{-1}$.

Можно, однако, изменить определение гриновской функции таким образом, чтобы подобных усложнений не возникало. Основанный на этом определении математический аппарат, разработанный Мацубарой (*T. Matsubara*, 1955), в особенности целесообразен для вычисления термодинамических величин макроскопической системы.

Введем так называемые *мацубаровские* ψ -операторы, согласно определению¹⁾,

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}_{\alpha}^M(\tau, \mathbf{r}) &= e^{\tau \hat{H}'} \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{r}) e^{-\tau \hat{H}'}, \\ \hat{\bar{\Psi}}_{\alpha}^M(\tau, \mathbf{r}) &= e^{\tau \hat{H}'} \hat{\psi}_{\alpha}^{+}(\mathbf{r}) e^{-\tau \hat{H}'},\end{aligned}\quad (37.1)$$

где τ — вспомогательная вещественная переменная; эти операторы отличаются, с формальной точки зрения, от гейзенберговских

¹⁾ В этом параграфе мы будем писать формулы одновременно для ферми-систем и бозе-систем (выше λ -точки). При разнице в знаках ферми-системам будут отвечать верхние, а бозе-системам — нижние знаки. Кроме того, для бозе-систем следует опустить спинные индексы.

операторов заменой в последних вещественной переменной t мнимой величиной $-i\tau$ ¹⁾. Такой же заменой ($\hat{\Psi} \rightarrow \hat{\Psi}^M$, $\hat{\Psi}^+ \rightarrow \hat{\Psi}^{M+}$, $i\partial/\partial t \rightarrow -\partial/\partial \tau$), например в (7.8), получаются уравнения, которыми удовлетворяют операторы (37.1). С помощью этих операторов новая функция Грина $\mathcal{G}$ определяется аналогично тому, как обычная гриновская функция G определяется через гейзенберговские ψ -операторы:

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2) = -\langle T_\tau \hat{\Psi}_\alpha^M(\tau_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_\beta^M(\tau_2, \mathbf{r}_2) \rangle, \quad (37.2)$$

где символ T_τ означает « τ -хронологизацию» — расположение операторов в порядке увеличения τ справа налево (с изменением знака при перестановке операторов в случае ферми-систем); скобки же $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по распределению Гиббса. Последнее можно представить в явном виде, записав определение (37.2) как

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta} = -\text{Sp} \{ \hat{\omega} T_\tau \hat{\Psi}_\alpha^M(\tau_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_\beta^M(\tau_2, \mathbf{r}_2) \}, \quad \hat{\omega} = \exp \frac{\Omega - \hat{H}'}{T}, \quad (37.3)$$

где Sp означает сумму всех диагональных матричных элементов. Определенную таким образом гриновскую функцию называют *температурной* в отличие от «обычной» функции G (которую называют в этой связи *временной*).

Как и $G_{\alpha\beta}$, функция $\mathcal{G}_{\alpha\beta}$ для неферромагнитной системы в отсутствие внешнего магнитного поля сводится к скаляру: $\mathcal{G}_{\alpha\beta} = \mathcal{G} \delta_{\alpha\beta}$. Для пространственно-однородной системы ее зависимость от $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ снова сводится к зависимости от разности $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

Легко также видеть, что уже по самому определению (37.3) функция $\mathcal{G}$ зависит только от разности $\tau = \tau_1 - \tau_2$. Пусть, например, $\tau_1 < \tau_2$; тогда имеем²⁾

$$\mathcal{G} = \pm \frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} \text{Sp} \{ e^{-\hat{H}'/T} e^{\tau_2 \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}_2) e^{(-\tau_2 + \tau_1) \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}_1) e^{-\tau_1 \hat{H}'} \}$$

или, произведя под знаком Sp циклическую перестановку множителей:

$$\mathcal{G} = \pm \frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} \text{Sp} \{ e^{-(1/T + \tau) \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha^+(\mathbf{r}_2) e^{\tau \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}_1) \}, \quad \tau < 0, \quad (37.4)$$

откуда и очевидно сделанное утверждение.

¹⁾ Подчеркнем, что в виду этого отличия оператор $\hat{\Psi}^M$ отнюдь не совпадает с $\hat{\Psi}^{M+}$.

²⁾ Заключенный в скобки множитель 2 относится к ферми-системам, а для бозе-систем должен быть заменен единицей.

Переменная τ будет фактически пробегать значения лишь в конечном интервале

$$-1/T \leq \tau \leq 1/T. \quad (37.5)$$

При этом значения функции $\mathcal{G}(\tau)$ при $\tau < 0$ и $\tau > 0$ связаны друг с другом простым соотношением. При $\tau = \tau_1 - \tau_2 > 0$, аналогично выводу (37.4), находим

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= -\frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} \text{Sp} \{ e^{-(1/T-\tau)\hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}_1) e^{-\tau\hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha^+(\mathbf{r}_2) \} = \\ &= -\frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} \text{Sp} \{ e^{-\tau\hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha^+(\mathbf{r}_2) e^{-(1/T-\tau)\hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}_1) \}, \quad \tau > 0, \end{aligned}$$

а сравнив это выражение с (37.4), получим

$$\mathcal{G}(\tau) = \mp \mathcal{G}\left(\tau + \frac{1}{T}\right), \quad \tau < 0 \quad (37.6)$$

(ввиду (37.5) аргумент функции справа при $\tau < 0$ положителен).

Разложив теперь функцию $\mathcal{G}(\tau, \mathbf{r})$ в интеграл Фурье по координатам и в ряд Фурье по τ (на интервале (37.5))¹⁾:

$$\mathcal{G}(\tau, \mathbf{r}) = T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - \zeta_s \tau)} \mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3}, \quad (37.7)$$

причем для ферми-систем

$$\zeta_s = (2s + 1)\pi T, \quad (37.8a)$$

а для бозе-систем

$$\zeta_s = 2s\pi T \quad (37.8b)$$

($s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$); при этом автоматически выполняется условие (37.6). Обратное к (37.7) преобразование имеет вид

$$\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) = \int_0^{1/T} \int e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r} - \zeta_s \tau)} \mathcal{G}(\tau, \mathbf{r}) d^3 x d\tau \quad (37.9)$$

(интеграл по области $-1/T \leq \tau \leq 1/T$ преобразован в интеграл от 0 до $1/T$ с учетом (37.6) и (37.8)).

Вычисления, аналогичные произведенным в § 36, позволяют выразить $\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p})$ через матричные элементы шредингеровских ψ -операторов. Они приводят к результату

$$\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) = \frac{(2\pi)^3}{(2)} \sum_{m,n} \omega_n \frac{A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn})}{i\zeta_s - \omega_{mn}} (1 \pm e^{-\omega_{mn}/T}). \quad (37.10)$$

¹⁾ Введение этого приема принадлежит А. А. Абрикосову, Л. П. Горькову, И. Е. Дзялошинскому (1959) и Е. С. Фрадкуну (1959).

Отсюда видно прежде всего, что

$$\mathcal{G}(-\zeta_s, \mathbf{p}) = \mathcal{G}^*(\zeta_s, \mathbf{p}). \quad (37.11)$$

Далее, сравнив (37.10) с разложениями (36.6) и (36.20) для G^R , найдем, что

$$\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) = G^R(i\zeta_s, \mathbf{p}), \quad \zeta_s > 0. \quad (37.12)$$

Условие $\zeta_s > 0$ связано с тем, что выражения (36.6) и (36.20) справедливы непосредственно лишь в верхней полуплоскости ω , как это объяснено на с. 191. Таким образом, в компонентах Фурье температурная функция Грина совпадает с запаздывающей функцией Грина, взятой в дискретных точках мнимой оси ω . Этот результат позволяет, в частности, сразу написать выражение для температурной функции Грина идеального газа: заменой $\omega \rightarrow i\zeta_s$ находим из (36.17)

$$\mathcal{G}^{(0)}(\zeta_s, \mathbf{p}) = \left[i\zeta_s - \frac{p^2}{2m} + \mu \right]^{-1}. \quad (37.13)$$

В следующем параграфе будет изложена диаграммная техника для вычисления функции $\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p})$. Для определения же функции $G^R(\omega, \mathbf{p})$ (и тем самым, в частности, для определения энергетического спектра системы) надо построить аналитическую функцию, совпадающую с $\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p})$ в точках $\omega = i\zeta_s$ и не имеющую особенностей в верхней полуплоскости ω . Эта процедура однозначна, если добавить требование $G^R(\omega, \mathbf{p}) \rightarrow 0$ при $|\omega| \rightarrow \infty$ (см. (36.11)). Тем не менее в конкретных случаях такое аналитическое продолжение может быть сопряжено с определенными трудностями. Но для вычисления термодинамических величин его производить не надо.

Так, для вычисления потенциала Ω можно исходить из выражения усредненной по распределению Гиббса матрицы плотности

$$N\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \pm \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_1 + 0, \mathbf{r}_2) \quad (37.14)$$

(очевидного из определения (37.2); ср. (7.17)). Положив $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1$ (и просуммировав по $\alpha = \beta$), получим для плотности системы

$$\frac{N}{V} = \pm T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) e^{-i\zeta_s \tau} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \Big|_{\tau \rightarrow -0}. \quad (37.15)$$

Это выражение определяет N как функцию μ, T, V , после чего $\Omega(\mu, T, V)$ вычисляется интегрированием равенства $N = -\partial \Omega / \partial \mu$.

§ 38. Диаграммная техника для температурных функций Грина

Диаграммная техника для вычисления температурной функции Грина $\mathcal{G}$ строится подобно тому, как это делалось в § 12, 13 для временной функции G . Тот факт, что определение мацубаровских ψ -операторов (37.1) отличается от определения гейзенберговских операторов лишь формальной заменой $it \rightarrow \tau$, позволяет во многом воспользоваться прямой аналогией.

Прежде всего вводим мацубаровские операторы в «представлении взаимодействия», отличающиеся от (37.1) заменой точного гамильтониана $\hat{H}'$ на гамильтониан свободных частиц $\hat{H}'_0$:

$$\hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau, \mathbf{r}) = \exp(\tau \hat{H}'_0) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) \exp(-\tau \hat{H}'_0). \quad (38.1)$$

Связь между операторами $\hat{\Psi}_{0\alpha}^M$ и $\hat{\Psi}_\alpha^M$ осуществляется мацубаровской S -матрицей, построенной аналогично (12.8):

$$\hat{\sigma}(\tau_2, \tau_1) = T_\tau \exp \left[- \int_{\tau_1}^{\tau_2} \hat{V}_0(\tau) d\tau \right], \quad (38.2)$$

где

$$\hat{V}_0(\tau) = \exp(\tau \hat{H}'_0) \hat{V} \exp(-\tau \hat{H}'_0) \quad (38.3)$$

— оператор взаимодействия в том же представлении. Но в то время как в § 12 связь между $\hat{\Psi}$ и $\hat{\Psi}_0$ устанавливалась при начальном условии «включения» взаимодействия при $t = -\infty$, теперь роль «начального» условия должно играть совпадение $\hat{\Psi}^M$ и $\hat{\Psi}_0^M$ при $\tau = 0$. Соответственно вместо (12.11) пишем

$$\hat{\Psi}_\alpha^M(\tau) = \hat{\sigma}^{-1}(\tau, 0) \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau) \hat{\sigma}(\tau, 0). \quad (38.4)$$

Подставим это выражение в определение функции Грина (37.3); положив, для определенности, $\tau_1 > \tau_2$, имеем

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) =$$

$$= -\text{Sp} \{ \hat{\omega} \hat{\sigma}^{-1}(\tau_1, 0) \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau_1) \hat{\sigma}(\tau_1, 0) \hat{\sigma}^{-1}(\tau_2, 0) \hat{\Psi}_{0\beta}^M(\tau_2) \hat{\sigma}(\tau_2, 0) \}$$

(аргументы $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ для краткости не выписываем). Заметив, что при $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3$

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}(\tau_1, \tau_3) &= \hat{\sigma}(\tau_1, \tau_2) \hat{\sigma}(\tau_2, \tau_3), \\ \hat{\sigma}(\tau_2, \tau_1) \hat{\sigma}^{-1}(\tau_3, \tau_1) &= \hat{\sigma}(\tau_2, \tau_3), \end{aligned}$$

переписываем в виде

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) = -\text{Sp} \left\{ \hat{\omega} \hat{\sigma}^{-1} \left(\frac{1}{T}, 0 \right) \left[\hat{\sigma} \left(\frac{1}{T}, \tau_1 \right) \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau_1) \hat{\sigma}(\tau_1, \tau_2) \hat{\Psi}_{0\beta}^M(\tau_2) \hat{\sigma}(\tau_2, 0) \right] \right\}.$$

Множители в квадратных скобках уже расположены в порядке возрастания справа налево. Поэтому можно написать

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) = -\text{Sp} \{ \hat{\omega} \hat{\sigma}^{-1} [T_\tau \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau_1) \hat{\Psi}_{0\beta}^M(\tau_2) \hat{\sigma}] \}, \quad (38.5)$$

где

$$\hat{\sigma} \equiv \hat{\sigma} \left(\frac{1}{T}, 0 \right).$$

Легко проверить, что в таком виде это выражение остается справедливым и при $\tau_1 < \tau_2$.

В отличие от (12.12), в (38.5) содержится лишний (гиббсовский) множитель, и, кроме того, усреднение производится еще по состоянию системы взаимодействующих частиц. Покажем, что оба эти отличия «взаимно погашаются», в результате чего восстанавливается полная аналогия с (12.14). Для этого воспользуемся формулой

$$e^{-\tau \hat{H}'} = e^{-\tau \hat{H}'_0} \hat{\sigma}(\tau, 0), \quad (38.6)$$

которая получается путем подстановки (38.1) в (38.4) и последующим сравнением получившегося выражения с определением $\hat{\Psi}^M$ согласно (37.1). С ее помощью заменяем в (38.5)

$$e^{-\hat{H}'/T} \hat{\sigma}^{-1} \left(\frac{1}{T}, 0 \right) = e^{-\hat{H}'_0/T}.$$

Множитель же $e^{\Omega/T}$ выносим из-под знака Sp , перенеся его из числителя в знаменатель и представив в виде

$$e^{-\Omega/T} = \text{Sp} e^{-\hat{H}'/T} = \text{Sp} e^{-\hat{H}'_0/T} \hat{\sigma} \left(\frac{1}{T}, 0 \right).$$

Наконец, умножив числитель и знаменатель на $\exp(\Omega_0/T)$ (где Ω_0 — термодинамический потенциал идеального газа при тех же значениях μ, T, V), получим окончательно

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) = -\frac{1}{\langle \hat{\sigma} \rangle_0} \langle T_\tau \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau_1) \hat{\Psi}_{0\beta}^M(\tau_2) \hat{\sigma} \rangle_0, \quad (38.7)$$

где усреднение производится по состояниям системы невзаимодействующих частиц:

$$\langle \dots \rangle_0 = \text{Sp} \{ \hat{\omega}_0 \dots \}.$$

Аналогия этого результата с (12.14) очевидна.

Для перехода к диаграммам теории возмущений, как и в § 13, разлагаем выражение (38.7) по степеням оператора взаимодействия $\hat{V}_0(\tau)$. Для системы с парным взаимодействием между частицами этот оператор отличается от (13.2) лишь заменой гейзенберговских $\hat{\Psi}_0, \hat{\Psi}_0^+$ на мацубаровские $\hat{\Psi}^M, \hat{\bar{\Psi}}^M$. Средние значения произведений ψ -операторов снова раскрываются по теореме Вика (т. е. путем выбора всеми возможными способами попарных сверток операторов); применимость этой теоремы в макроскопическом пределе доказывается в данном случае теми же рассуждениями, что и в § 13.

Возникающие, таким образом, правила диаграммной техники вполне аналогичны правилам, полученным в § 13 для техники при $T = 0$. Графическое изображение диаграмм остается в точности тем же. Несколько меняются лишь правила аналитического прочтения диаграмм.

В координатном представлении каждой сплошной линии, идущей от точки 2 в точку 1, сопоставляется множитель $-\mathcal{G}_{\alpha\beta}^{(0)}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2)$ (со знаком минус). Каждой штриховой линии, соединяющей точки 1 и 2, отвечает множитель $-U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\delta(\tau_1 - \tau_2)$. По всем переменным $\tau, \mathbf{r}$ внутренних точек диаграммы производится интегрирование по d^3x по всему пространству и по $d\tau$ — в пределах от 0 до $1/T$.

Для перехода к импульсному представлению надо разложить все функции $\mathcal{G}^{(0)}$ в виде (37.7). После интегрирования по всем внутренним переменным $\mathbf{r}$ в каждой вершине диаграммы возникает δ -функция, выражающая закон сохранения импульса ($\sum \mathbf{p} = 0$). Кроме того, в каждой вершине возникает интеграл вида

$$T \int_0^{1/T} \exp\{-i\tau(\zeta_{s_1} + \zeta_{s_2} + \zeta_{s_3})\} d\tau.$$

Этот интеграл (с учетом (37.8)) отличен от нуля, только если $\Sigma \zeta_s = 0$, причем в этом случае он равен 1. Таким образом, в каждой вершине соблюдается также и закон сохранения дискретных частот. Каждой сплошной линии ставится теперь в соответствие множитель $-\mathcal{G}_{\alpha\beta}^{(0)}(\zeta_s, \mathbf{p})$ (сплошной же линии, замкнутой на себя, снова отвечает множитель $n^{(0)}(\mu, T)$ — плотность идеального газа при заданных μ, T). Каждой штриховой линии сопоставляется множитель $-U(\mathbf{q})$. По всем импульсам и частотам, оставшимся

неопределенными (после учета законов сохранения во всех вершинах), производится интегрирование и суммирование вида

$$T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \dots$$

Общий коэффициент, с которым диаграмма входит в $-\mathcal{G}_{\alpha\beta}$, в случае ферми-систем равен $(-1)^L$, где L — число замкнутых последовательностей сплошных линий в диаграмме. В случае же бозе-систем этот коэффициент равен 1.

Разумеется, и в этой технике (как и в технике при $T = 0$) можно производить частичное суммирование и вводить различные диаграммные «блоки». В частности, можно определить вершинную часть, выражающуюся через двухчастичную функцию Грина. Эта вершинная часть связана с функцией $\mathcal{G}$ уравнением Дайсона, аналогичным (15.14). Мы не будем выписывать такие формулы, вывод которых вполне аналогичен выводу в диаграммной технике при $T = 0$.

При переходе к случаю $T = 0$ суммы по s в мацубаровских диаграммах превращаются в интегралы по ζ и мацубаровская техника превращается в технику, очень напоминающую обычную, изложенную в гл. II. Разница, однако, состоит в том, что при вещественных ζ мацубаровские функции совпадают со значениями G^R и G^A на соответствующих полуосях мнимой оси (см. (37.11), (37.12)). Для перехода к обычной технике при $T = 0$ надо еще повернуть контур интегрирования до совпадения с вещественной осью ω .

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ

§ 39. Сверхтекучий ферми-газ. Энергетический спектр

Вся изложенная в гл. I теория Ландау относится только к одной категории ферми-жидкостей — к жидкостям, обладающим энергетическим спектром, не приводящим к явлению сверхтекучести. Этот тип спектров не является единственной возможностью для квантовой ферми-жидкости, и мы переходим теперь к изучению ферми-систем со спектром другого типа. Происхождение этого типа энергетических спектров и его основные свойства можно наиболее наглядным образом выяснить на простой модели, допускающей полное теоретическое исследование — вырожденном почти идеальном ферми-газе с притяжением между частицами¹⁾.

Слабо неидеальный ферми-газ с отталкиванием между частицами был рассмотрен в § 6. На первый взгляд, произведенные там вычисления в равной степени справедливы как для случая отталкивания, так и для случая притяжения между частицами, т. е. как при положительной, так и при отрицательной длине рассеяния a . В действительности, однако, в случае притяжения ($a < 0$) найденное таким образом основное состояние системы оказывается неустойчивым по отношению к определенной перестройке, меняющей его характер и понижающей энергию.

Физическая природа этой неустойчивости состоит в стремлении частиц к «спариванию»: образованию связанных состояний парами частиц, находящихся (в $\mathbf{p}$ -пространстве) вблизи ферми-поверхности и обладающих равными по величине и противоположными по направлению импульсами и антипараллельными спинами — так называемый *эффект Купера* (*L. N. Cooper*, 1957). Замечательно, что этот эффект возникает в ферми-газе уже при сколь угодно слабом притяжении между частицами.

Именно в силу этого эффекта использованная в задаче о ферми-газе с отталкиванием система операторов $\hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}$, $\hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+$, соответствующих свободным состояниям отдельных частиц газа,

¹⁾ Эта задача лежит в основе теории сверхпроводимости, построенной Бардином, Купером и Шриффером (*J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer* (1957). Излагаемый ниже метод решения принадлежит *Н. Н. Боголюбову* (1958).

не может служить теперь правильным исходным приближением теории возмущений¹⁾). Вместо них надо уже сразу ввести новые операторы, которые будем искать в виде линейных комбинаций

$$\begin{aligned}\hat{b}_{\mathbf{p}-} &= u_p \hat{a}_{\mathbf{p}-} + v_p \hat{a}_{-\mathbf{p},+}^+, \\ \hat{b}_{\mathbf{p}+} &= u_p \hat{a}_{\mathbf{p}+} - v_p \hat{a}_{-\mathbf{p},-}^+, \end{aligned} \quad (39.1)$$

объединяющих операторы частиц с противоположными импульсами и спинами (индексы $+$ и $-$ относятся к двум значениям проекции спина); в силу изотропии газа коэффициенты u_p , v_p могут зависеть только от абсолютной величины импульса $\mathbf{p}$. Для того чтобы эти новые операторы отвечали рождению и уничтожению квазичастиц, они должны удовлетворять таким же правилам коммутации Ферми, как и старые операторы:

$$\hat{b}_{\mathbf{p}\alpha} \hat{b}_{\mathbf{p}\alpha}^+ + \hat{b}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}\alpha} = 1, \quad (39.2)$$

а все другие пары операторов антикоммумутативны (индекс α нумерует два значения проекции спина). Для этого коэффициенты преобразования должны удовлетворять условию

$$u_p^2 + v_p^2 = 1 \quad (39.3)$$

(u_p , v_p могут быть сделаны вещественными надлежащим выбором фазового множителя). При этом обратное (по отношению к (39.1)) преобразование имеет вид

$$\begin{aligned}\hat{a}_{\mathbf{p}+} &= u_p \hat{b}_{\mathbf{p}+} + v_p \hat{b}_{-\mathbf{p},-}^+, \\ \hat{a}_{\mathbf{p}-} &= u_p \hat{b}_{\mathbf{p}-} - v_p \hat{b}_{-\mathbf{p},+}^+. \end{aligned} \quad (39.4)$$

По тем же причинам (основной роли взаимодействия между парами частиц с противоположными импульсами и спинами) мы сохраним в гамильтониане (6.7) во второй сумме лишь члены, в которых $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 \equiv \mathbf{p}$, $\mathbf{p}'_1 = -\mathbf{p}'_2 \equiv \mathbf{p}'$:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}\alpha} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha} - \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}'+}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}',-}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p},-} \hat{a}_{\mathbf{p}+}, \quad (39.5)$$

где снова введена «константа связи» $g = 4\pi\hbar^2|a|/m$ (длина рассеяния $a < 0$).

¹⁾ Указание на неприменимость теории возмущений (в использованной в § 6 форме) к парам частиц с проекциями спинов $\pm 1/2$ и с импульсами $\mathbf{p}_2 \approx -\mathbf{p}_1$ дает уже наличие особенности при $\vartheta = \pi$, которой обладает полученное с помощью этой теории выражение функции взаимодействия квазичастиц (6.16); эта особенность существует только при антипараллельных спинах, которым отвечает равное -3 собственное значение оператора $\sigma_1 \sigma_2$.

В дальнейших вычислениях будет удобно снова воспользоваться обычным приемом, позволяющим избавиться от необходимости явным образом учитывать постоянство числа частиц в системе: в качестве нового гамильтониана вводится разность $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$, где

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{p}\alpha} \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}$$

— оператор числа частиц; химический потенциал определяется затем, в принципе, условием равенства среднего значения $\bar{N}$ заданному числу частиц в системе.

Введем также обозначение

$$\eta_p = \frac{p^2}{2m} - \mu. \quad (39.6)$$

Поскольку $\mu \approx p_F^2/2m$, то вблизи поверхности Ферми

$$\eta_p = v_F(p - p_F), \quad (39.7)$$

где $v_F = p_F/m$. Вычитая $\mu\hat{N}$ из выражения (39.5), напомним, таким образом, исходный гамильтониан в виде

$$\hat{H}' = \sum_{\mathbf{p}\alpha} \eta_p \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha} - \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}'+}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}',-}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p},-} \hat{a}_{\mathbf{p}+,+}. \quad (39.8)$$

Произведем в этом гамильтониане преобразование (39.4). Используя соотношения (39.2), (39.3) и возможность замены индекса суммирования $\mathbf{p}$ на $-\mathbf{p}$, получим

$$\begin{aligned} \hat{H}' = & 2 \sum_{\mathbf{p}} \eta_p v_p^2 + \sum_{\mathbf{p}} \eta_p (u_p^2 - v_p^2) (\hat{b}_{\mathbf{p}+}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}+} + \hat{b}_{\mathbf{p}-}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}-}) + \\ & + 2 \sum_{\mathbf{p}} \eta_p u_p v_p (\hat{b}_{\mathbf{p}+}^+ \hat{b}_{-\mathbf{p},-}^+ + \hat{b}_{-\mathbf{p},-} \hat{b}_{\mathbf{p}+}) - \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \hat{B}_{\mathbf{p}'}^+ \hat{B}_{\mathbf{p}}, \end{aligned} \quad (39.9)$$

$$\hat{B}_{\mathbf{p}} = u_p^2 \hat{b}_{-\mathbf{p},-} - \hat{b}_{\mathbf{p}+} - v_p^2 \hat{b}_{\mathbf{p}+}^+ \hat{b}_{-\mathbf{p},-}^+ + v_p u_p (\hat{b}_{-\mathbf{p},-} - \hat{b}_{-\mathbf{p},-}^+ - \hat{b}_{\mathbf{p}+}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}+}).$$

Выбор коэффициентов u_p , v_p осуществим теперь из условия минимальности энергии E системы при заданной энтропии. Последняя определяется комбинаторным выражением

$$S = - \sum_{\mathbf{p}\alpha} [n_{\mathbf{p}\alpha} \ln n_{\mathbf{p}\alpha} + (1 - n_{\mathbf{p}\alpha}) \ln (1 - n_{\mathbf{p}\alpha})].$$

Поэтому указанное условие эквивалентно минимизации энергии при заданных числах заполнения квазичастиц $n_{\mathbf{p}\alpha}$.

В гамильтониане (39.9) диагональные матричные элементы имеют лишь члены, содержащие произведения

$$\hat{b}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}\alpha} = n_{\mathbf{p}\alpha}, \quad \hat{b}_{\mathbf{p}\alpha} \hat{b}_{\mathbf{p}\alpha}^+ = 1 - n_{\mathbf{p}\alpha}.$$

Поэтому находим

$$E = 2 \sum_{\mathbf{p}} \eta_p v_p^2 + \sum_{\mathbf{p}} \eta_p (u_p^2 - v_p^2) (n_{\mathbf{p}+} + n_{\mathbf{p}-}) - \frac{g}{V} \left[\sum_{\mathbf{p}} u_p v_p (1 - n_{\mathbf{p}+} - n_{\mathbf{p}-}) \right]^2. \quad (39.10)$$

Варьируя это выражение по параметрам u_p (учитывая при этом связь (39.3)), получим в качестве условия минимума

$$\frac{\delta E}{\delta u_p} = -\frac{2}{v_p} (1 - n_{\mathbf{p}+} - n_{\mathbf{p}-}) \left[2\eta_p u_p v_p - \frac{g}{V} (u_p^2 - v_p^2) \sum_{\mathbf{p}'} u_{\mathbf{p}'} v_{\mathbf{p}'} (1 - n_{\mathbf{p}'+} - n_{\mathbf{p}'-}) \right] = 0.$$

Отсюда находим уравнение

$$2\eta_p u_p v_p = \Delta (u_p^2 - v_p^2), \quad (39.11)$$

где Δ обозначает сумму:

$$\Delta = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p}} u_p v_p (1 - n_{\mathbf{p}+} - n_{\mathbf{p}-}). \quad (39.12)$$

Из (39.11) и (39.3) выражаем u_p , v_p через η_p и Δ :

$$\left. \begin{matrix} u_p^2 \\ v_p^2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\eta_p}{\sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}} \right). \quad (39.13)$$

Подставив же эти значения в (39.12), получим уравнение, определяющее Δ :

$$\frac{g}{2V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1 - n_{\mathbf{p}+} - n_{\mathbf{p}-}}{\sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}} = 1.$$

В равновесии числа заполнения квазичастиц не зависят от направления спина и даются формулой распределения Ферми (с равным нулю химическим потенциалом — ср. примечание на с. 18):

$$n_{\mathbf{p}+} = n_{\mathbf{p}-} \equiv n_{\mathbf{p}} = [e^{\varepsilon/T} + 1]^{-1}. \quad (39.14)$$

Перейдя также от суммирования к интегрированию по $\mathbf{p}$ -пространству, запишем это уравнение в виде

$$\frac{g}{2} \int \frac{1 - 2n_{\mathbf{p}}}{\sqrt{\Delta^2 + \eta_{\mathbf{p}}^2}} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = 1. \quad (39.15)$$

Обратимся к исследованию полученных соотношений. Мы увидим, что величина Δ играет основную роль в теории спектров рассматриваемого типа. Вычислим прежде всего значение этой величины при $T = 0$ (обозначим его через Δ_0).

При $T = 0$ квазичастицы отсутствуют, так что $n_{\mathbf{p}} = 0$ и уравнение (39.15) принимает вид

$$\frac{g}{2(2\pi\hbar)^3} \int \frac{4\pi p^2 dp}{\sqrt{\Delta_0^2 + \eta_{\mathbf{p}}^2}} = 1. \quad (39.16)$$

Сразу же отметим, что это уравнение заведомо не могло бы иметь решения (для Δ_0) при $g < 0$, т. е. в случае отталкивания (знаки обеих сторон уравнения были бы заведомо различны).

Основной вклад в интеграл в (39.16) вносит область импульсов, в которой $\Delta_0 \ll v_F |p_F - p| \ll v_F p_F \sim \mu$ и интеграл имеет логарифмический характер (малость Δ_0 по сравнению с μ подтверждается результатом). Обрезая логарифмический интеграл при некотором $\eta = \tilde{\varepsilon} \sim \mu$, имеем¹⁾

$$\int \frac{p^2 dp}{[\Delta_0^2 + v_F^2 (p_F - p)^2]^{1/2}} \approx \frac{p_F^2}{v_F} \int \frac{d\eta}{(\Delta_0^2 + \eta^2)^{1/2}} \approx \frac{2p_F^2}{v_F} \ln \frac{\tilde{\varepsilon}}{\Delta_0}.$$

Поэтому находим

$$\frac{gmp_F}{2\pi^2\hbar^3} \ln \frac{\tilde{\varepsilon}}{\Delta_0} = 1, \quad (39.17)$$

откуда

$$\Delta_0 = \tilde{\varepsilon} \exp \left(-\frac{2\pi^2\hbar^3}{gmp_F} \right) = \tilde{\varepsilon} \exp \left(-\frac{\pi\hbar}{2p_F|a|} \right). \quad (39.18)$$

¹⁾ При $p \gg p_F$ величина $\eta_p \propto p^2$, и интеграл (39.16) в написанном виде расходится, как p . В действительности, однако, эта расходимость фиктивна и устраняется перенормировкой связи между константой g (т. е. длиной рассеяния a) и потенциалом взаимодействия, подобно тому, как это было сделано в § 6 и 25. Последовательное проведение такого довольно сложного расчета дает возможность определить также и коэффициент пропорциональности между параметром обрезания $\tilde{\varepsilon}$ и химическим потенциалом μ : $\tilde{\varepsilon} = (2/e)^{7/3} \mu = 0,49 \mu$ (см. Л. П. Горьков, Т. К. Мелик-Бархударов // ЖЭТФ. 1961. Т. 40. С. 1452).

Это выражение можно записать также в виде

$$\Delta_0 = \tilde{\varepsilon} \exp(-2/g\nu_F), \quad (39.19)$$

где $\nu_F = mp_F/\pi^2\hbar^3$ — энергетическая плотность числа состояний частицы на ферми-поверхности ($\nu d\varepsilon$ — число состояний в интервале $d\varepsilon$).

Наибольший интерес представляет форма энергетического спектра системы — энергия элементарных возбуждений $\varepsilon_{\mathbf{p}+} = \varepsilon_{\mathbf{p}-} \equiv \varepsilon(\mathbf{p})$. Мы найдем ее по изменению энергии всей системы при изменении чисел заполнения квазичастиц, т. е. проварьируя E из (39.10) по $n_{\mathbf{p}\alpha}$. Поскольку значения u_p, v_p уже выбраны из условия равенства нулю производных от E по ним, то варьирование E по $n_{\mathbf{p}\alpha}$ можно производить при постоянных u_p, v_p . Таким образом,

$$\varepsilon = \left(\frac{\delta E}{\delta n_{\mathbf{p}\alpha}} \right)_{u_p v_p}.$$

Вычисление производной с использованием (39.11) – (39.13) приводит к простому результату:

$$\varepsilon(p) = \sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}. \quad (39.20)$$

Мы видим, что энергия квазичастицы не может быть меньше величины Δ , достигаемой при $p = p_F$. Другими словами, возбужденные состояния системы отделены от основной энергетической щелью. Обладая полуцелым спином, квазичастицы должны появляться парами. В этом смысле можно сказать, что величина щели равна 2Δ . Обратим внимание на экспоненциальную малость этой величины: поскольку $p_F|a|/\hbar \ll 1$, то Δ_0 экспоненциально мало по сравнению с μ . Отметим также, что выражение (39.18) не может быть разложено по степеням малого параметра — константы связи g ; последняя входит в знаменатель показателя экспоненты, так что значение $g=0$ является существенно особой точкой функции $\Delta_0(g)$.

Спектр (39.20) удовлетворяет установленному в § 23 условию сверхтекучести: минимальное значение ε/p отлично от нуля. Поэтому ферми-газ с притяжением между частицами должен обладать свойством сверхтекучести.

На рис. 5 сравнены законы дисперсии квазичастиц в сверхтекучей (верхняя кривая) и нормальной ферми-системах. В последней этот закон изображается (в соответствии с указанной в конце § 1 трактовкой) двумя прямыми $\varepsilon = v_F|p - p_F|$.

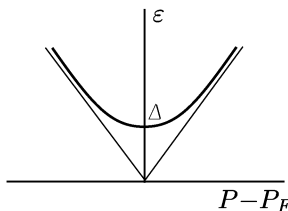


Рис. 5.

Величина щели Δ зависит от температуры, т. е. сама форма спектра зависит от статистического распределения квазичастиц — ситуация, аналогичная тому, что имеет место для ферми-жидкости нормального типа. Поскольку при возрастании температуры числа заполнения квазичастиц возрастают (стремясь к 1), то уже из уравнения (39.15) видно, что Δ при этом уменьшается и при некоторой конечной температуре T_c обратится в нуль: система перейдет из сверхтекучего состояния в нормальное. Эта точка представляет собой фазовый переход второго рода (подобный λ -переходу в сверхтекучей бозе-жидкости).

Наличие энергетической щели в спектре вырожденного ферми-газа и является выражением эффекта «спаривания», о котором уже говорилось в начале параграфа. Величину 2Δ можно рассматривать как энергию связи куперовской пары, которую надо затратить для ее разрыва.

Гамильтониан (39.5) учитывает (как уже было отмечено в § 6) взаимодействие лишь между парами частиц, находящимися в синглетном s -состоянии: орбитальный момент относительно движения частиц равен нулю, а их спины антипараллельны. Обладая равным нулю полным спином, пары ведут себя как бозевские образования и могут накапливаться в конечном числе на уровне (своего движения как целого) с наименьшей энергией — уровне с равным нулю суммарным импульсом. В таком наглядном истолковании это явление вполне аналогично накоплению частиц в состоянии с нулевой энергией (бозе-эйнштейновской конденсации) в бозе-газе; в данном случае конденсатом является совокупность спаренных частиц.

Представлению о связанных парах не следует, конечно, придавать слишком буквальный смысл. Более точно следует говорить о корреляции между состояниями пары частиц в $\mathbf{p}$ -пространстве, приводящей к конечной вероятности частицам иметь равную нулю сумму импульсов. Разброс δp значений импульсов в области корреляции соответствует энергии порядка Δ , т. е. $\delta p \sim \Delta/v_F$. Соответствующая длина $\xi \sim \hbar/\delta p \sim \hbar v_F/\Delta$ определяет порядок величины расстояний между частицами с коррелированными импульсами. При $T = 0$ эта длина (ее называют *длиной когерентности*)

$$\xi_0 \sim \frac{\hbar v_F}{\Delta_0} \sim \frac{\hbar}{p_F} \exp\left(\frac{\pi\hbar}{2p_F|a|}\right). \quad (39.21)$$

Поскольку в вырожденном ферми-газе $\hbar/p_F$ совпадает по порядку величины с межатомными расстояниями, то мы видим, что ξ_0 очень велико по сравнению с последними. Это обстоятельство в особенности наглядно демонстрирует условность понятия о связанных парах.

Происхождение эффекта Купера тесно связано с существованием ферми-поверхности, ограничивающей (в $\mathbf{p}$ -пространстве) конечную область заполненных (при $T = 0$) состояний; важное обстоятельство состоит в том, что энергетическая плотность числа состояний на этой поверхности отлична от нуля. Эта связь проявляется в формуле (39.19) для величины щели Δ_0 , обращаемой в нуль при $\nu_F \rightarrow 0$.

§ 40. Сверхтекучий ферми-газ. Термодинамические свойства

Изучение термодинамических свойств сверхтекучего ферми-газа начнем с вычисления температурной зависимости величины энергетической щели. Перепишав уравнение (39.15) в следующем виде

$$-1 + \frac{g}{2} \int \frac{d^3 p}{\varepsilon(2\pi\hbar)^3} = g \int \frac{n_{\mathbf{p}} d^3 p}{\varepsilon(2\pi\hbar)^3},$$

замечаем, что интеграл в его левой части отличается от интеграла при $T = 0$ лишь заменой Δ_0 на Δ . Поэтому учитывая (39.17), мы видим, что левая часть равна $\frac{gp_F m}{2\pi^2 \hbar^3} \ln \frac{\Delta_0}{\Delta}$. В правой части подставляем $n_{\mathbf{p}}$ из (39.14) и переходим к интегрированию по $dp = d\eta/\nu_F$:

$$\ln \frac{\Delta_0}{\Delta} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{\varepsilon(\varepsilon/T + 1)} \equiv 2I\left(\frac{\Delta}{T}\right), \quad (40.1)$$

где

$$I(u) = \int_0^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + u^2}(\exp \sqrt{x^2 + u^2} + 1)}$$

(ввиду быстрой сходимости интеграла пределы интегрирования могут быть распространены до $\pm\infty$).

В области низких температур ($T \ll \Delta_0$) интеграл вычисляется просто¹⁾:

$$\Delta = \Delta_0 \left[1 - \sqrt{\frac{2\pi T}{\Delta_0}} e^{-\Delta_0/T} \right]. \quad (40.2)$$

¹⁾ При больших u первый член разложения $I(u)$ по $1/u$:

$$I(u) \approx \int_0^{\infty} \frac{dx}{u} \exp \left[-u \left(1 + \frac{x^2}{2u^2} \right) \right] = \left(\frac{\pi}{2u} \right)^{1/2} e^{-u}.$$

В области же вблизи точки перехода Δ мало, и первые члены разложения интеграла $I(\Delta/T)$ дают¹⁾

$$\ln \frac{\Delta_0}{\Delta} = \ln \frac{\pi T}{\gamma \Delta} + \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} \frac{\Delta^2}{T^2}. \quad (40.3)$$

Отсюда, прежде всего, видно, что Δ обращается в нуль при температуре

$$T_c = \gamma \Delta_0 / \pi = 0,57 \Delta_0, \quad (40.4)$$

малой по сравнению с температурой вырождения $T_0 \sim \mu$. После этого в первом порядке по $T_c - T$ получим

$$\Delta = T_c \left[\frac{8\pi^2}{7\zeta(3)} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \right]^{1/2} = 3,06 T_c \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}. \quad (40.5)$$

¹⁾ Для разложения интеграла $I(u)$ при $u \rightarrow 0$ прибавляем и вычитаем из него интеграл

$$I_1 = \frac{1}{2} \int_0^\infty \left(\frac{1}{\sqrt{x^2 + u^2}} - \frac{1}{x} \operatorname{th} \frac{x}{2} \right) dx.$$

Тогда $I = I_1 + I_2$, где

$$I_2 = \frac{1}{2} \int_0^\infty \left(\frac{1}{x} \operatorname{th} \frac{x}{2} - \frac{1}{\sqrt{x^2 + u^2}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{x^2 + u^2}}{2} \right) dx.$$

В I_1 первый член в подынтегральном выражении интегрируется элементарно, а второй интегрируем по частям и находим

$$2I_1 = -\ln \frac{u}{2} + \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{\ln x}{\operatorname{ch}^2(x/2)} dx.$$

Стоящий здесь интеграл равен $2 \ln(\pi/2\gamma)$ (где $\ln \gamma = C = 0,577$ — постоянная Эйлера), так что $2I_1 = \ln(\pi/\gamma u)$.

Интеграл I_2 обращается в нуль при $u = 0$. Первый член его разложения по u^2 :

$$I_2 = -\frac{u^2}{4} \int_0^\infty \frac{dx}{x} \left(\frac{1}{x} \operatorname{th} \frac{x}{2} \right) '.$$

Подставляя сюда разложение

$$\operatorname{th} \frac{x}{2} = 4x \sum_{n=0}^{\infty} [\pi^2 (2n+1)^2 + x^2]^{-1}$$

(его вывод см. в примечании на с. 224) получим

$$2I_2 = 4u^2 \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^\infty \frac{dx}{[(2n+1)^2 \pi^2 + x^2]^2} = \frac{u^2}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)^{-3} = u^2 \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2}.$$

Нам осталось вычислить термодинамические величины газа. Рассмотрим сначала область низких температур.

Для вычисления теплоемкости в этой области проще всего исходить из формулы

$$\delta E = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon (\delta n_{\mathbf{p}+} + \delta n_{\mathbf{p}-}) = 2 \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon \delta n_{\mathbf{p}}$$

для изменения полной энергии при варьировании чисел заполнения квазичастиц. Разделив на δT и перейдя от суммирования к интегрированию, получим теплоемкость:

$$C = V \frac{m p_F}{\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon \frac{\partial n}{\partial T} d\varepsilon.$$

При $T \ll \Delta$ функция распределения квазичастиц $n \approx e^{-\varepsilon/T}$, а их энергия $\varepsilon \approx \Delta_0 + \eta^2/2\Delta_0$; простое интегрирование приводит к результату:

$$C = V \frac{\sqrt{2} m p_F \Delta_0^{5/2}}{\pi^{3/2} \hbar^3 T^{3/2}} e^{-\Delta_0/T}. \quad (40.6)$$

Таким образом, при $T \rightarrow 0$ теплоемкость убывает по экспоненциальному закону — прямое следствие наличия щели в энергетическом спектре.

Для дальнейших вычислений удобно исходить из термодинамического потенциала Ω , поскольку все рассмотрение ведется нами при заданном химическом потенциале системы (а не числа частиц в ней)¹⁾. Воспользуемся формулой

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} \right)_{T, V, \mu} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right\rangle, \quad (40.7)$$

где λ — какой-либо параметр, характеризующий систему (ср. V, (11.4) (15.11)); в данном случае в качестве такого параметра выберем константу связи g , фигурирующую во втором члене гамильтониана (39.8). Среднее значение этого члена дается последним слагаемым в формуле (39.10), равном, согласно (39.12), $-V\Delta^2/g \propto g$. Поэтому имеем

$$\frac{\partial \Omega}{\partial g} = -\frac{V\Delta^2}{g^2}.$$

При $g \rightarrow 0$ энергетическая щель Δ стремится к нулю. Поэтому, интегрируя это равенство по dg в пределах от 0 до g , найдем

¹⁾ Не смешивать химический потенциал газа как такового с (равным нулю) химическим потенциалом газа квазичастиц!

разность между термодинамическим потенциалом Ω в сверхтекучем состоянии и значением, которое он имел бы в нормальном состоянии ($\Delta = 0$) при той же температуре¹⁾:

$$\Omega_s - \Omega_n = -V \int_0^g \frac{\Delta^2}{g^2} dg. \quad (40.8)$$

Согласно общей теореме о малых добавках (см. V (24.16)), поправка (40.8), будучи выражена в соответствующих переменных, одинакова для всех термодинамических потенциалов.

При абсолютном нуле $\Delta = \Delta_0$, и, согласно (39.18), имеем

$$\frac{d\Delta_0}{dg} = \frac{2\pi^2 \hbar^3 \Delta_0}{mp_F g^2}.$$

Переходя в (40.8) от интегрирования по dg к интегрированию по $d\Delta_0$, найдем следующее выражение для разности энергий основных уровней сверхтекучей и нормальной систем:

$$E_s - E_n = -V \frac{mp_F}{4\pi^2 \hbar^3} \Delta_0^2 \quad (40.9)$$

Отрицательный знак этой разности и означает упомянутую в начале параграфа неустойчивость «нормального» основного состояния в случае притяжения между частицами газа. Отнесенная к одной частице, разность (40.9) составляет величину $\sim \Delta^2/\mu$.

Перейдем к обратному случаю, $T \rightarrow T_c$. Дифференцируя равенство (40.3) по g , находим

$$\frac{7\zeta(3)}{4\pi^2 T^2} \Delta d\Delta = \frac{d\Delta_0}{\Delta_0} = \frac{2\pi^2 \hbar^3}{mp_F} \frac{dg}{g^2}.$$

Подставим отсюда dg/g^2 в формулу (40.8), понимая ее как разность свободных энергий:

$$F_s - F_n = -V \frac{7\zeta(3)mp_F}{8\pi^4 \hbar^3 T^2} \int_0^{\Delta} \Delta^3 d\Delta$$

¹⁾ Здесь необходимо сделать замечание, связанное со сделанными нами с самого начала пренебрежениями. При $g=0$ в гамильтониане (39.8) вообще не остается взаимодействия между частицами, и можно было бы подумать, что мы приходим к идеальному ферми-газу, а не «нормальному» неидеальному газу. В действительности, однако, в гамильтониане (39.8) уже были сделаны пренебрежения, после которых не может идти речи о вычислении абсолютной величины энергии. Были опущены члены взаимодействия (несущественные для нахождения формы спектра и разности $\Omega_s - \Omega_n$), которые дают вклад в энергию, большой по сравнению с экспоненциально малой величиной (40.8) (это как раз тот вклад, пропорциональный Ng , который дается формулой (6.13)).

и окончательно, с учетом (40.5), получим

$$F_s - F_n = -V \frac{2mp_F T_c^2}{7\zeta(3)\hbar^3} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2. \quad (40.10)$$

Отсюда разность энтропий:

$$S_s - S_n = -V \frac{4mp_F T_c}{7\zeta(3)\hbar^3} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2.$$

Разность же теплоемкостей стремится при $T \rightarrow T_c$ к конечному значению

$$C_s - C_n = V \frac{4mp_F T_c}{7\zeta(3)\hbar^3}, \quad (40.11)$$

т. е. в точке перехода испытывает скачок, причем $C_s > C_n$. Теплоемкость нормального состояния дается (в первом приближении) формулой идеального газа (см. V, (58.6)); выраженная через p_F , она имеет вид $C_n = Vmp_F T/3\hbar^3$. Поэтому отношение теплоемкостей в точке перехода

$$\frac{C_s(T_c)}{C_n(T_c)} = \frac{12}{7\zeta(3)} + 1 = 2,43. \quad (40.12)$$

В отношении своей сверхтекучести газ характеризуется разделением его плотности ρ на нормальную и сверхтекучую части. Согласно (23.6) нормальная часть плотности

$$\rho_n = -\frac{8\pi}{3(2\pi\hbar)^3} \int p^4 \frac{dn}{d\varepsilon} dp \approx -\frac{p_F^4}{3\pi^2 \hbar^3 v_F} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dn}{d\varepsilon} d\eta.$$

Полная же плотность газа связана с p_F посредством

$$\rho = \frac{mN}{V} = \frac{8\pi p_F^3 m}{3(2\pi\hbar)^3}.$$

Поэтому

$$\frac{\rho_n}{\rho} = -2 \int_0^{\infty} \frac{dn}{d\varepsilon} d\eta. \quad (40.13)$$

Этот интеграл не требует особого вычисления, так как может быть сведен к известной уже функции $\Delta(T)$. Продифференцировав уравнение (40.1) по T и сравнив получающийся при этом интеграл с (40.13), можно убедиться в том, что

$$\frac{\rho}{\rho_n} = 1 - \frac{\Delta}{T\Delta'}. \quad (40.14)$$

Подставив сюда предельные формулы (40.2), (40.5), получим

$$T \rightarrow 0 : \frac{\rho_n}{\rho} = \left(\frac{2\pi\Delta_0}{T} \right)^{1/2} e^{-\Delta_0/T}, \quad (40.15)$$

$$T \rightarrow T_c : \frac{\rho_s}{\rho} = 2 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right). \quad (40.16)$$

Наконец, необходимо сделать еще два замечания относительно области справедливости полученных формул по температуре.

При приближении к точке перехода T_c становятся существенными процессы взаимодействия квазичастиц (не учитываемые в изложенной теории); именно эти процессы ответственны в данном случае за возникновение особенностей термодинамических величин, характерных для точки фазового перехода второго рода. В достаточной близости к этой точке полученные выше формулы должны в конце концов стать неприменимыми. Но в силу наличия малого параметра (константы связи g) в рассмотренной модели это наступает лишь при чрезвычайно малых значениях $T_c - T$; мы вернемся еще к более подробному обсуждению этого вопроса в § 45.

Как и в сверхтекучей бозе-жидкости, в рассматриваемом ферми-газе (в противоположность ферми-газу с отталкиванием — ср. § 4) может распространяться звук (со скоростью $u \sim p_F/m$, определяющейся обычным образом сжимаемостью среды). Это значит, что наряду с рассмотренным здесь спектром возбуждений фермиевского типа в спектре такого газа существует также и фононная, бозевская, ветвь возбуждений. Обусловленная фононами теплоемкость пропорциональна T^3 с малым коэффициентом, но при $T \rightarrow 0$ в конце концов она должна стать преобладающей над экспоненциально убывающей теплоемкостью (40.6)

§ 41. Гриновские функции сверхтекучего ферми-газа

Перейдем к построению математической техники гриновских функций в применении к сверхтекучим ферми-системам¹⁾.

Мы видели в § 26, что в терминах ψ -операторов бозе-эйнштейновская конденсация в бозе-системе выражается существованием отличных от нуля предельных (когда число частиц $N \rightarrow \infty$) значений матричных элементов, связывающих состояния, отличающиеся лишь изменением N на единицу. Физический смысл этого утверждения состоит в том, что удаление или прибавление одной частицы в конденсат не меняет состояния макроскопической системы.

¹⁾ Излагаемая в этом параграфе техника принадлежит Л. П. Горькову (1958).

В случае сверхтекучей ферми-системы то же самое должно относиться к конденсату из куперовских пар: состояние системы не должно меняться при изменении на единицу числа пар в конденсате. Математически это выражается в наличии отличных от нуля предельных ($N \rightarrow \infty$) значений матричных элементов произведения $\hat{\Psi}_\beta(X_2)\hat{\Psi}_\alpha(X_1)$ — оператора уничтожения двух частиц, и у эрмитово-сопряженного ему оператора рождения пары частиц $\hat{\Psi}_\alpha^+(X_1)\hat{\Psi}_\beta^+(X_2)$. Эти матричные элементы связывают «одинаковые» состояния систем, отличающиеся лишь удалением или прибавлением одной пары частиц:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle m, N | \hat{\Psi}_\beta(X_2)\hat{\Psi}_\alpha(X_1) | m, N+2 \rangle = \\ = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle m, N+2 | \hat{\Psi}_\alpha^+(X_1)\hat{\Psi}_\beta^+(X_2) | m, N \rangle^* \neq 0. \end{aligned} \quad (41.1)$$

В дальнейшем мы будем опускать знак взятия предела; для краткости будем также опускать диагональный матричный индекс m , нумерующий «одинаковые» состояния систем с различными числами частиц.

Как и в случае бозе-систем (§ 31), в математическом аппарате гриновских функций для сверхтекучих ферми-систем фигурирует несколько различных функций. Наряду с обычной гриновской функцией

$$iG_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \langle N | T \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) | N \rangle \quad (41.2)$$

необходимо ввести также и «аномальные» функции, согласно определениям,

$$\begin{aligned} iF_{\alpha\beta}(X_1, X_2) &= \langle N | T \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta(X_2) | N+2 \rangle, \\ iF_{\alpha\beta}^+(X_1, X_2) &= \langle N+2 | T \hat{\Psi}_\alpha^+(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) | N \rangle. \end{aligned} \quad (41.3)$$

Поскольку каждая из функций $F_{\alpha\beta}$ и $F_{\alpha\beta}^+$ строится из двух одинаковых операторов, то

$$F_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = -F_{\beta\alpha}(X_2, X_1), \quad F_{\alpha\beta}^+(X_1, X_2) = -F_{\beta\alpha}^+(X_2, X_1) \quad (41.4)$$

Напомним, что согласно основным принципам статистики результат статистического усреднения не зависит от того, производится ли оно по точной волновой функции стационарного состояния замкнутой системы или с помощью распределения Гиббса. Разница состоит лишь в том, что в первом случае результат усреднения будет выражен через энергию E и число частиц N , а во втором — через T и μ . Для следующих ниже в этом параграфе рассуждений более удобен первый способ.

В рассмотренной в § 39 модели ферми-газа связанные пары находятся в синглетном состоянии. Спиновая зависимость матричных элементов операторов рождения или уничтожения такой пары сводится к единичному антисимметричному спинору

$$g_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (41.5)$$

Напишем поэтому функции (41.3) в виде¹⁾

$$F_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta} F(X_1, X_2), \quad F_{\alpha\beta}^+ = g_{\alpha\beta} F^+(X_1, X_2); \quad (41.6)$$

при этом в силу (41.4) F и F^+ симметричны по X_1 и X_2 . Спиновая же зависимость гриновской функции $G_{\alpha\beta}$ для неферромагнитной системы сводится к $G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} G$. В однородной, макроскопически неподвижной системе гриновские функции G , F и F^+ зависят только от разностей координат точек и разности моментов времени (ср. примечание на с. 159).

Подобно тому как введенная в § 26 функция $\Xi(X)$ имела смысл волновой функции частиц в конденсате, так функцию $iF(t, \mathbf{r}_1; t, \mathbf{r}_2)$ можно рассматривать как волновую функцию частиц, связанных в находящихся в конденсате куперовских парах. Тогда функция

$$\Xi(X) = iF(X, X) \quad (41.7)$$

будет волновой функцией движения этих пар как целого. Из определений (41.3), (41.5) легко видеть, что при этом $F^+(X, X) = i\Xi^*(X)$. В стационарной, макроскопически неподвижной системе функция $\Xi(X)$ сводится к постоянной; надлежащим выбором фаз ψ -операторов можно сделать эту постоянную вещественной.

Вычислим теперь определенные таким образом гриновские функции для модели ферми-газа со слабым притяжением между частицами.

Гейзенберговский ψ -оператор удовлетворяет уравнению (7.8). Ввиду малости радиуса действия сил между частицами в рассматриваемом газе в интегральном члене этого уравнения можно взять значения множителей $\hat{\Psi}(t, \mathbf{r}')$ в точке $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$ и вынести

¹⁾ Ср. примечание на с. 47. В то время как по своей спиновой структуре $G_{\alpha\beta}$ есть смешанный спинор второго ранга, функции $F_{\alpha\beta}$ и $F_{\alpha\beta}^+$ представляют собой соответственно контра- и ковариантный спиноры.

их из-под знака интегрирования; тогда уравнение примет вид¹⁾

$$i\frac{\partial\hat{\Psi}_\alpha}{\partial t} = -\left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\hat{\Psi}_\alpha - g\hat{\Psi}_\gamma^+\hat{\Psi}_\gamma\hat{\Psi}_\alpha. \quad (41.8)$$

Эрмитовским сопряжением всех членов этого уравнения получим аналогичное уравнение для оператора $\hat{\Psi}^+$:

$$i\frac{\partial\hat{\Psi}_\alpha^+}{\partial t} = \left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\hat{\Psi}_\alpha^+ + g\hat{\Psi}_\alpha^+\hat{\Psi}_\gamma^+\hat{\Psi}_\gamma. \quad (41.9)$$

Подставив выражение (41.8) в производную $\partial G_{\alpha\beta}/\partial t$ (9.5), получим уравнение

$$\begin{aligned} &\left(i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)G_{\alpha\beta}(X - X') - \\ &- ig\langle N | T\hat{\Psi}_\gamma^+(X)\hat{\Psi}_\gamma(X)\hat{\Psi}_\alpha(X)\hat{\Psi}_\beta^+(X') | N \rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta^{(4)}(X - X') \end{aligned} \quad (41.10)$$

(ср. (15.12)). Фигурирующий здесь диагональный матричный элемент произведения четырех ψ -операторов может быть расписан, согласно правилу умножения матриц, в виде суммы произведений матричных элементов двух пар операторов. Из всех таких произведений оставим лишь то, которое содержит матричные элементы для переходов с изменением числа частиц $N \leftrightarrow N + 2$, и опустим все остальные члены

$$\begin{aligned} &\langle N | T\hat{\Psi}_\gamma^+\hat{\Psi}_\gamma\hat{\Psi}_\alpha\hat{\Psi}_\beta^+ | N \rangle \rightarrow \\ &\rightarrow \langle N | T\hat{\Psi}_\gamma\hat{\Psi}_\alpha | N + 2 \rangle \langle N + 2 | T\hat{\Psi}_\gamma^+\hat{\Psi}_\beta^+ | N \rangle = \\ &= -F_{\gamma\alpha}(X, X)F_{\gamma\beta}^+(X, X') = -\delta_{\alpha\beta}F(0)F^+(X - X') \end{aligned} \quad (41.11)$$

(в последнем преобразовании использованы выражения (41.5)). Физически этот член отвечает спариванию частиц и по порядку величины совпадает с плотностью конденсата.

Подчеркнем, однако, принципиальное отличие от пренебрежений, которые делались в случае слабо неидеального бозе-газа. В последнем почти все частицы находятся при $T = 0$ в конденсате, а число надконденсатных частиц, появляющихся только в результате слабого взаимодействия частиц, относительно мало. В данном же случае, напротив, сам конденсат появляется в результате слабого взаимодействия и потому включает в

¹⁾ Как и в § 39, пользуемся обозначением g для константы связи, совпадающей с постоянной $-U_0 = -\int U d^3x$. Оператор Лапласа пишем как ∇^2 во избежание путаницы со щелью Δ . В этом и следующем параграфах полагаем $\hbar = 1$.

себя лишь малую долю частиц. Другими словами, отбрасываемые при замене (41.11) члены не малы, а велики по сравнению с оставленными. Последние, однако, приводят к качественно новому эффекту — изменению характера спектра, в то время как первые были бы нужны лишь для вычисления не интересующей нас здесь поправки к основному уровню системы (ср. в этой связи примечание на с. 213).

После замены (41.11) уравнение (41.10) сводится к виду

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) G(X) + g\Xi F^+(X) = \delta^{(4)}(X) \quad (41.12)$$

(аргумент функции $X - X'$ заменен на X , а постоянная $iF(0)$ обозначена через Ξ — в соответствии с определением (41.7)). Сюда входят две неизвестные функции $G(X)$ и $F^+(X)$, поэтому для их вычисления необходимо еще одно уравнение.

Его можно получить, вычисляя производную

$$i\frac{\partial F_{\alpha\beta}^+(X - X')}{\partial t} = \left\langle N + 2 \left| T \frac{\partial \hat{\Psi}_{\alpha}^+(X)}{\partial t} \hat{\Psi}_{\beta}^+(X') \right| N \right\rangle;$$

член с δ -функцией (подобный второму члену в (9.5)) здесь не возникает, поскольку функция $F_{\alpha\beta}^+(X - X')$ (в противоположность функции $G_{\alpha\beta}(X - X')$) непрерывна при $t = t'^1$). Подставив сюда (41.9) и снова произведя выделение конденсатного члена, аналогичное (41.11), получим в результате уравнение

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\nabla^2}{2m} - \mu\right) F^+(X) + g\Xi^* G(X) = 0. \quad (41.13)$$

В него входят те же две функции G и F^+ , что и в (41.12); поэтому эти два уравнения достаточны для вычисления этих функций (для вычисления же F надо было бы вывести аналогичным образом еще одно уравнение).

Перейдем в этих уравнениях к импульсному представлению, введя обычным образом фурье-компоненты $G(P)$ и $F^+(P)$:

$$\begin{aligned} (\omega - \eta_p)G(P) + g\Xi F^+(P) &= 1, \\ (\omega + \eta_p)F^+(P) + g\Xi^* G(P) &= 0, \end{aligned} \quad (41.14)$$

¹⁾ В этом легко убедиться, вычисляя скачок функции $F_{\alpha\beta}^+$ подобно тому, как это делалось в § 9 для $G_{\alpha\beta}$, и заметив, что операторы $\hat{\Psi}_{\alpha}^+(t, \mathbf{r})$ и $\hat{\Psi}_{\beta}^+(t, \mathbf{r}')$ антикоммутируют.

где $P=(\omega, \mathbf{p})$ и $\eta_p=p^2/2m-\mu$. Отметим, что ввиду четности функции $F^+(X)$, четны также и ее фурье-компоненты $F^+(P) = F^+(-P)$.

Исключив из двух уравнений функцию F^+ , найдем для G уравнение

$$(\omega^2 - \eta_p^2 - \Delta^2)G(P) = \omega + \eta_p, \quad (41.15)$$

где введено обозначение

$$\Delta = g|\Xi|. \quad (41.16)$$

Формальное решение уравнения (41.15):

$$G(P) = \frac{\omega + \eta_p}{\omega^2 - \varepsilon^2(p)} = \frac{u_p^2}{\omega - \varepsilon(p)} + \frac{v_p^2}{\omega + \varepsilon(p)}, \quad (41.17)$$

где $\varepsilon(p) = \sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}$, а u_p и v_p даются формулами (39.13). Уже отсюда видно, что спектр элементарных возбуждений, определяемый положительным полюсом функции Грина, дается функцией $\varepsilon(p)$ — мы снова приходим к результату (39.20). Мы видим также, что энергетическая щель Δ и модуль конденсатной волновой функции движения пар как целого оказываются пропорциональными друг другу величинами.

Выражение (41.17) для $G(P)$, однако, еще неполно: в нем не определен способ обхода полюсов. Другими словами, остается еще неопределенной мнимая часть функции G ; эта часть содержит δ -функцию $\delta(\omega \pm \varepsilon)$ и потому выпадает при умножении на $\omega^2 - \varepsilon^2$ в уравнении (41.15).

При $T = 0$ правило обхода полюсов устанавливается прямым сравнением выражения (41.17) с разложением (8.7): в членах с положительными и отрицательными полюсами переменную надо заменить соответственно на $\omega + i0$ и $\omega - i0$; тогда (41.17) примет вид

$$G(\omega, \mathbf{p}) = \frac{v_p^2}{\omega - \varepsilon(p) + i0} + \frac{u_p^2}{\omega + \varepsilon(p) - i0} = \frac{\omega + \eta_p}{(\omega - \varepsilon + i0)(\omega + \varepsilon - i0)}. \quad (41.18)$$

Выражая теперь F^+ из второго из уравнений (41.14), находим

$$F^+(\omega, \mathbf{p}) = -\frac{g\Xi^*}{(\omega - \varepsilon + i0)(\omega + \varepsilon - i0)}. \quad (41.19)$$

С другой стороны, имеем, по определению,

$$i\Xi^* \equiv F^+(X=0) = \int_{-\infty}^{\infty} F^+(P) \frac{d\omega d^3p}{(2\pi)^4}. \quad (41.20)$$

Подставим сюда (41.19); интегрирование по $d\omega$ осуществляется путем замыкания контура бесконечно удаленной полуокружностью в верхней полуплоскости, после чего интеграл выражается через вычет в полюсе $\omega = \varepsilon$. В результате, после сокращения на Ξ^* , получим равенство (39.16), определяющее Δ_0 .

При $T \neq 0$ нахождение мнимой части гриновских функций несколько сложнее. Для построения функции $G(\omega, \mathbf{p})$ с правильными аналитическими свойствами по переменной ω напомним сначала запаздывающую функцию $G^R(\omega, \mathbf{p})$; она должна быть аналитична в верхней полуплоскости и потому получается из (41.17) заменой $\omega \rightarrow \omega + i0$. Мнимая часть этой функции:

$$\text{Im } G^R = -\pi[u_p^2 \delta(\omega - \varepsilon) + v_p^2 \delta(\omega + \varepsilon)].$$

Мнимая же часть искомой функции G находится отсюда с помощью формулы (36.14), согласно которой

$$\begin{aligned} \text{Im } G(\omega, \mathbf{p}) &= \text{th } \frac{\omega}{2T} \text{Im } G^R(\omega, \mathbf{p}) = \\ &= -(1 - 2n_{\mathbf{p}})\pi[u_p^2 \delta(\omega - \varepsilon) - v_p^2 \delta(\omega + \varepsilon)], \end{aligned}$$

где $n_{\mathbf{p}}$ — фермиевская функция распределения (39.14) (использовав эту формулу, мы тем самым осуществляем переход от усреднения по заданному стационарному состоянию системы к усреднению по распределению Гиббса). Функцию G с этой мнимой частью можно записать в виде

$$G(\omega, \mathbf{p}) = \frac{u_p^2}{\omega - \varepsilon + i0} + \frac{v_p^2}{\omega + \varepsilon - i0} + 2\pi i n_{\mathbf{p}}[u_p^2 \delta(\omega - \varepsilon) - v_p^2 \delta(\omega + \varepsilon)]. \quad (41.21)$$

Для функции же $F^+(\omega, \mathbf{p})$ находим теперь

$$F^+(\omega, \mathbf{p}) = F^+(\omega, \mathbf{p})|_{T=0} - \frac{i\pi g \Xi n_{\mathbf{p}}}{\varepsilon} [\delta(\omega - \varepsilon) + \delta(\omega + \varepsilon)], \quad (41.22)$$

где первый член есть функция (41.19), относящаяся к $T = 0$. Подставив это выражение в (41.20) и произведя интегрирование, мы вернемся к уравнению (39.15), определяющему $\Delta(T)$.

Уравнения (41.14) можно изобразить в диаграммном виде аналогично тому, как для сверхтекучей бозе-системы были представлены уравнения (33.7). При этом функции G , F , F^+ изображаются теми же графическими элементами (33.6) — одно- и двусторонними стрелками. Два уравнения (41.14)

записываются в виде

$$\begin{aligned}
 \overleftarrow{P} &= \overleftarrow{P} + \overleftarrow{P} \begin{array}{c} \text{wavy line} \\ \uparrow \end{array} - \overrightarrow{P} \begin{array}{c} \text{wavy line} \\ \uparrow \end{array} \\
 \overrightarrow{-P} &= \overrightarrow{-P} \begin{array}{c} \text{wavy line} \\ \downarrow \end{array} - \overrightarrow{P} \begin{array}{c} \text{wavy line} \\ \downarrow \end{array}
 \end{aligned} \quad (41.23)$$

Тонкой стрелке отвечает множитель $iG^{(0)}(P)$, где $G^{(0)}(P)$ — гриновская функция идеального ферми-газа. Входящей же в вершину и выходящей из нее волнистым линиям отвечают соответственно множители $ig\Xi$ и $-ig\Xi^*$. Сравнив (41.23) с (33.7), видим, что эти последние множители соответствуют собственнo-энергетическим функциям $i\Sigma_{02}$ и $i\Sigma_{20}$, т. е. представляют собой первые приближения для этих величин. Отметим, что новыми элементами — двусторонними стрелками и волнистыми линиями — ограничиваются особенности диаграммной техники для сверхтекучих ферми-систем; в отличие от случая бозе-систем, «тройные» вершины здесь не возникают. Поэтому диаграммная техника оказывается здесь гораздо проще и ближе к «обычной», чем для сверхтекучих бозе-систем.

§ 42. Температурные гриновские функции сверхтекучего ферми-газа

В § 41 был определен энергетический спектр сверхтекучего ферми-газа путем использования обычных, «временных», гриновских функций. Однако для решения более сложных задач (и прежде всего для исследования свойств системы во внешних полях) более удобен математический аппарат температурных гриновских функций (А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, 1958).

Температурная функция $\mathcal{G}_{\alpha\beta}$ определяется той же формулой (37.3), что и для нормального ферми-газа. Температурные же функции $\mathcal{F}_{\alpha\beta}$ и $\overline{\mathcal{F}}_{\alpha\beta}$ (соответствующие временным функциям $F_{\alpha\beta}$ и $F_{\alpha\beta}^+$) определим аналогичными формулами

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}_{\alpha\beta}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2) &= \sum_m \langle m, N | \hat{\omega} T_\tau \hat{\Psi}_{\alpha 1}^M \hat{\Psi}_{\beta 2}^M | m, N + 2 \rangle, \\
 \overline{\mathcal{F}}_{\alpha\beta}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2) &= \sum_m \langle m, N + 2 | \hat{\omega} T_\tau \hat{\Psi}_{\alpha 1}^M \hat{\Psi}_{\beta 2}^M | m, N \rangle.
 \end{aligned} \quad (42.1)$$

Спиновая зависимость этих функций отделяется (аналогично

(41.5)) в виде множителей $g_{\alpha\beta}^{-1}$):

$$\mathcal{F}_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta} \mathcal{F}, \quad \overline{\mathcal{F}}_{\alpha\beta} = -g_{\alpha\beta} \overline{\mathcal{F}}. \quad (42.2)$$

Как и $\mathcal{G}$, функции $\mathcal{F}$ и $\overline{\mathcal{F}}$ зависят только от разности $\tau = \tau_1 - \tau_2$ и удовлетворяют соотношениям (37.6) (с верхним знаком):

$$\mathcal{F}(\tau) = -\mathcal{F}\left(\tau + \frac{1}{T}\right), \quad \overline{\mathcal{F}}(\tau) = -\overline{\mathcal{F}}\left(\tau + \frac{1}{T}\right). \quad (42.3)$$

Ряды Фурье по τ для этих функций содержат, следовательно, только нечетные «частоты» (37.8a): $\zeta_s = (2s+1)\pi T$.

Мацубаровские ψ -операторы при $\tau = 0$ совпадают с гейзенберговскими при $t = 0$:

$$\hat{\Psi}^M(\tau = 0, \mathbf{r}) = \hat{\Psi}(t = 0, \mathbf{r}).$$

Сравнив определения функций $\mathcal{F}$, $\overline{\mathcal{F}}$ с определениями F , F^+ , найдем поэтому, что

$$\mathcal{F}(0, \mathbf{r}; 0, \mathbf{r}) = \Xi(\mathbf{r}), \quad \overline{\mathcal{F}}(0, \mathbf{r}; 0, \mathbf{r}) = \Xi^*(\mathbf{r}), \quad (42.4)$$

где под Ξ надо понимать конденсатную волновую функцию, усредненную по Гиббсу, т. е. выраженную через температуру системы.

Покажем, каким образом с помощью температурных функций Грина можно снова получить энергетический спектр сверхтекучего ферми-газа при отличных от нуля температурах.

Уравнения для температурных функций $\mathcal{G}$, $\mathcal{F}$, $\overline{\mathcal{F}}$ выводятся в точности аналогично выводу уравнений (41.12), (41.13), причем вместо дифференцирования по t производится дифференцирование по τ , а вместо уравнений (41.8), (41.9) используются уравнения, отличающиеся от (41.8), (41.9) заменой $it \rightarrow \tau$. Как и в (41.11), из среднего значения произведения четырех мацубаровских ψ -операторов выделяются члены, содержащие матричные элементы для переходов с изменением числа частиц на 2. В результате получим уравнения

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \mathcal{G}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') + g \Xi \overline{\mathcal{F}}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') = \delta(\tau - \tau') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (42.5)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \overline{\mathcal{F}}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') - g \Xi^* \mathcal{G}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') = 0.$$

¹⁾ Разные знаки в определениях $\mathcal{F}$ и $\overline{\mathcal{F}}$ (в противоположность одинаковым знакам в (41.5)) целесообразны в связи с отсутствием в определениях (42.1) множителя i , который был в (41.3).

После перехода к фурье-компонентам эти уравнения принимают вид

$$\begin{aligned} (i\zeta_s - \eta_p)\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) + g\Xi\overline{\mathcal{F}}(\zeta_s, \mathbf{p}) &= 1, \\ -(i\zeta_s + \eta_p)\overline{\mathcal{F}}(\zeta_s, \mathbf{p}) - g\Xi^*\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) &= 0. \end{aligned} \quad (42.6)$$

Решение этих уравнений:

$$\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) = -\frac{i\zeta_s + \eta_p}{\zeta_s^2 + \varepsilon^2}, \quad (42.7)$$

$$\overline{\mathcal{F}}(\zeta_s, \mathbf{p}) = -\frac{g\Xi^*}{\zeta_s^2 + \varepsilon^2} = F^+(i\zeta_s, \mathbf{p}), \quad (42.8)$$

где снова $\varepsilon^2 = \Delta^2 + \eta_p^2$, $\Delta = g\Xi$ (причем это решение определено однозначно и никаких δ -функций — как это было для функций G и F^+ — вообще не содержит).

Условие, определяющее энергетическую щель в спектре, получается теперь из равенства

$$\Xi^* = \overline{\mathcal{F}}(\tau = 0, \mathbf{r} = 0) = T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \overline{\mathcal{F}}(\zeta_s, \mathbf{p}) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3},$$

или, после подстановки (42.8):

$$\frac{gT}{(2\pi)^3} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 p}{\zeta_s^2 + \varepsilon^2(p)} = 1. \quad (42.9)$$

Суммирование по s осуществляется формулой¹⁾

$$\sum_{s=-\infty}^{\infty} [(2s+1)^2\pi^2 + a^2]^{-1} = \frac{1}{2a} \operatorname{th} \frac{a}{2} \quad (42.10)$$

¹⁾ Эту формулу можно получить, написав

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2s+1)^2\pi^2 + a^2} &= \frac{1}{2a} \left[\frac{1}{a + i\pi(2s+1)} + \frac{1}{a - i\pi(2s+1)} \right] = \\ &= \frac{1}{2a} \int_0^{\infty} e^{-ax} [e^{-i\pi(2s+1)x} + e^{i\pi(2s+1)x}] dx \end{aligned}$$

и произведя суммирование геометрической прогрессии под знаком интегрирования.

и приводит к равенству

$$\frac{g}{2} \int \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} = 1, \quad (42.11)$$

совпадающему с (39.15).

§ 43. Сверхпроводимость металлов

Явление сверхпроводимости металлов, открытое Камерлинг Оннесом (*Kamerling Onnes*) в 1911 г., представляет собой сверхтекучесть электронной ферми-жидкости в них, подобную сверхтекучести рассмотренного в предыдущих параграфах вырожденного ферми-газа. Разумеется, во многих важных отношениях электронная жидкость и ферми-газ являются существенно различными физическими системами. Но в то же время основные физические моменты, относящиеся к свойствам энергетического спектра, в обоих случаях остаются одинаковыми. Обсудим качественным образом вопрос о том, какие именно черты рассмотренной выше модели можно перенести и в какой мере на электроны в металлах.

Важной особенностью металла является анизотропия его электронного энергетического спектра в противоположность изотропии спектра рассмотренного ферми-газа. Это обстоятельство, однако, не мешает возникновению феномена Купера, для которого существен лишь сам факт существования резкой ферми-поверхности (какой бы ни была ее форма) и конечность плотности числа состояний на ней. Необходимо также, чтобы электроны с противоположными импульсами и спинами имели одну и ту же энергию, т. е. находились бы оба на ферми-поверхности. Это требование автоматически обеспечивается симметрией по отношению к обращению времени. Можно сказать, что спариваются электроны в состояниях, получающихся друг из друга обращением времени.

Далее следует вопрос о знаке взаимодействия электронов в металле. В очень упрощенном смысле можно сказать, что это взаимодействие складывается из кулоновского отталкивания, экранированного на межатомных расстояниях, и из взаимодействия через решетку. Последнее описывается как результат обмена виртуальными фононами и имеет характер притяжения (§ 64). В случае, если последнее взаимодействие «перевешивает», металл при достаточно низких температурах станет сверхпроводником.

Существенно, что во взаимодействии через обмен фононами участвуют только электроны, лежащие в сравнительно узком слое $\mathbf{p}$ -пространства вблизи ферми-поверхности; толщина этого слоя $\sim \hbar\omega_D$ и мала по сравнению с химическим потенциалом

электронов μ (ω_D —дебаевская частота кристалла). Поэтому, если пользоваться для описания сверхпроводимости моделью слабо неидеального ферми-газа, то под параметром обрезания $\tilde{\epsilon}$ в (39.19) надо понимать величину¹⁾

$$\tilde{\epsilon} \sim \hbar\omega_D \quad (43.1)$$

(вместо $\tilde{\epsilon} \sim \mu$).

Что касается предположения о слабости взаимодействия, то реально для всех сверхпроводников

$$T_c \ll \hbar\omega_D \ll \mu. \quad (43.2)$$

Сделанное в § 39 предположение, однако, подразумевает нечто большее: малость константы связи g , приводящую к большому значению безразмерного показателя экспоненты в (39.19). В данном случае это требование выражается условием

$$\ln(\hbar\omega_D/T_c) \gg 1 \quad (43.3)$$

— должно быть велико не только отношение $\hbar\omega_D/T_c$, но и его логарифм. Это условие реально выполняется значительно хуже²⁾. С учетом всех реальных отличий электронной жидкости в металле от модели слабо неидеального ферми-газа теория сверхпроводимости становится очень сложной. В то же время оказывается, что уже простая теория, основанная на указанной модели, во многих отношениях хорошо описывает свойства сверхпроводников, причем не только качественно, но даже и количественно. Как уже упоминалось, эта теория была построена Бардином, Купером и Шриффером; в этой связи о модели ферми-газа со слабым притяжением между частицами говорят как о *модели БКШ*.

Все сказанное выше относится к «обычным» или «низкотемпературным» сверхпроводникам. В 1986 г. Беднорц и Мюллер (*G. Bednorz, K. A. Mueller*) обнаружили новый класс веществ — «высокотемпературные сверхпроводники». У этих веществ, большинство из которых представляет собой химические соединения кислорода, меди и редкоземельных металлов, возможны высокие температуры перехода — выше 100 К. При этом энергии Ферми относительно невелики — порядка 1000 К. Достаточно полная теория этого интересного явления в настоящее время, однако, еще не построена. Не вполне ясна даже природа взаимодействия, ответственного за сверхпроводимость.

¹⁾ Тем самым, кстати, отпадает вопрос о расходимости интеграла (39.16) при больших импульсах (ср. примечание на с. 207).

²⁾ Отношение $\hbar\omega_D/T_c$ меняется в пределах от примерно 10 для Pb до 300 для Al и Cd.

§ 44. Сверхпроводящий ток

Двум видам движения в электрически нейтральной сверхтекучей жидкости (жидкий гелий) отвечают в случае сверхпроводящего металла два вида электрических токов, могущих протекать в нем одновременно. *Сверхпроводящий ток* не переносит тепла и не сопровождается диссипацией энергии и может иметь место в термодинамически равновесной системе; *нормальный* же ток связан с выделением джоулева тепла. Будем обозначать плотности сверхпроводящего и нормального токов как $\mathbf{j}_s$ и $\mathbf{j}_n$; полная плотность тока $\mathbf{j} = \mathbf{j}_s + \mathbf{j}_n$.

Ряд важных заключений о свойствах сверхпроводящего тока можно сделать безотносительно к какой-либо частной модели уже из самого факта появления новой макроскопической величины — конденсатной волновой функции $\Xi(t, \mathbf{r})$.

Как и в § 26, введем фазу Φ этой функции:

$$\Xi(t, \mathbf{r}) = |\Xi|e^{i\Phi}. \quad (44.1)$$

Подобно тому как в жидком гелии градиент фазы Φ определяет, согласно (26.12), скорость сверхтекучего движения $\mathbf{v}_s$, так в сверхпроводнике градиент фазы определяет наблюдаемую в этом случае величину — плотность сверхпроводящего тока. Ввиду анизотропии металла направление $\mathbf{j}_s$ не совпадает, вообще говоря, с направлением $\nabla\Phi$ и связь между компонентами этих векторов задается некоторым тензором второго ранга. Во избежание непринципиальных усложнений, однако, мы ограничимся здесь случаем кубической симметрии металлического кристалла.

Тогда тензор второго ранга сводится к скаляру, а связь между $\mathbf{j}_s$ и $\nabla\Phi$ — к простой пропорциональности. Запишем ее в виде

$$\mathbf{j}_s = \frac{e\hbar}{2m} n_s \nabla\Phi, \quad (44.2)$$

где, по определению, $e = -|e|$ — заряд электрона, а m — его (истинная) масса. Определенную таким образом величину n_s (функция температуры) называют *плотностью числа сверхпроводящих электронов*; эта величина играет здесь роль, аналогичную плотности сверхтекучей компоненты в жидком гелии. Подчеркнем, что она отнюдь не совпадает с плотностью конденсата куперовских пар — подобно тому, как в жидком гелии ρ_s не совпадает с плотностью конденсатных атомов¹⁾.

¹⁾ Коэффициент в (44.2) записан так, чтобы в свободном сверхтекучем ферми-газе (модель БКШ) mn_s совпадало с вычисленной в § 40 величиной ρ_s . Последняя определена таким образом, что ток $\mathbf{j}_s$ должен выражаться в виде $\mathbf{j}_s = en_s \mathbf{v}_s$, где $\mathbf{v}_s$ — скорость сверхтекучего движения. В свою очередь, $\mathbf{v}_s$ связана с градиентом фазы равенством $\mathbf{v}_s = (\hbar/2m)\nabla\Phi$; удвоенная масса $2m$ (вместо m в (26.12)) стоит здесь в связи с тем, что конденсат составлен из спаренных частиц.

Формула (44.2) (как и формула (26.12) для жидкого гелия) предполагает достаточную медленность изменения фазы в пространстве. В то время, однако, как в случае бозе-жидкости требовалась малость изменения Φ лишь на межатомных расстояниях, здесь условие оказывается значительно более сильным. Роль характерного размера для сверхтекучей ферми-жидкости играет длина когерентности $\xi_0 \sim \hbar v_F / \Delta_0$, и фаза Φ должна мало меняться именно на таком расстоянии (большом по сравнению с межатомными)¹⁾.

Связь между $\mathbf{j}_s$ и Φ усложняется, если сверхпроводник находится во внешнем магнитном поле; мы рассмотрим здесь случай постоянного (во времени) поля. Необходимые изменения, которые надо внести в формулу (44.2), можно выяснить исходя из требования калибровочной инвариантности теории.

Это требование состоит в том, что все наблюдаемые физические величины должны оставаться неизменными при калибровочном преобразовании векторного потенциала магнитного поля:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \chi(\mathbf{r}), \quad (44.3)$$

где $\chi(\mathbf{r})$ — произвольная функция координат. При этом ψ -операторы преобразуются по закону, совпадающему с законом преобразования волновых функций:

$$\hat{\Psi} \rightarrow \hat{\Psi} \exp \frac{ie}{\hbar c} \chi, \quad \hat{\Psi}^+ \rightarrow \hat{\Psi}^+ \exp \left(-\frac{ie}{\hbar c} \chi \right), \quad (44.4)$$

где e — заряд частиц, описываемых ψ -оператором (см. III, (111.9))²⁾. Гриновские же функции $G(X, X')$ и $F(X, X')$, как и матричные элементы произведений $\hat{\Psi} \hat{\Psi}'^+$ или $\hat{\Psi} \hat{\Psi}'$, преобразуются согласно

$$\begin{aligned} G(X, X') &\rightarrow \exp \left\{ \frac{ie}{\hbar c} [\chi(\mathbf{r}) - \chi(\mathbf{r}')] \right\} G(X, X'), \\ F(X, X') &\rightarrow \exp \left\{ \frac{ie}{\hbar c} [\chi(\mathbf{r}) + \chi(\mathbf{r}')] \right\} F(X, X'). \end{aligned} \quad (44.5)$$

При этом

$$\Xi = iF(X, X) \rightarrow \exp \left(\frac{2ie}{\hbar c} \chi \right) \Xi,$$

¹⁾ Подчеркнем, что здесь фигурирует именно постоянный (не зависящий от температуры) параметр длины ξ_0 ; строгое обоснование этого критерия будет дано в дальнейшем (см. конец § 51).

²⁾ Благодаря тому, что во вторично-квантованный гамильтониан (7.7) ψ -операторы входят парами $\hat{\Psi}(X)$ и $\hat{\Psi}^+(X)$, он преобразуется при замене (44.3), (44.4) так же, как и обычный гамильтониан при таком же преобразовании обычных (не операторных) волновых функций. Преобразование вида (44.3), (44.4) было фактически использовано уже в § 19.

т. е. фаза конденсатной волновой функции

$$\Phi \rightarrow \Phi + \frac{2e}{\hbar c} \chi(\mathbf{r}). \quad (44.6)$$

Соотношение (44.2) не инвариантно по отношению к такому преобразованию фазы. Для достижения требуемой инвариантности оно должно быть дополнено членом, содержащим векторный потенциал магнитного поля:

$$\mathbf{j}_s = \frac{\hbar e}{2m} n_s \left(\nabla \Phi - \frac{2e}{\hbar c} \mathbf{A} \right). \quad (44.7)$$

В удвоении заряда (во втором члене в скобках) проявляется спаривание электронов в сверхпроводнике.

Уже это выражение достаточно для того, чтобы объяснить основное макроскопическое свойство сверхпроводника — вытеснение из него магнитного поля (*эффект Мейсснера*)¹⁾.

Рассмотрим однородный сверхпроводник, находящийся в слабом магнитном поле, — величина поля предполагается малой по сравнению с критическим полем H_c , разрушающим сверхпроводимость. Этим условием исключается существенное влияние магнитного поля на величину n_s . Пусть тело находится в термодинамически равновесном состоянии, так что нормальный ток отсутствует и поэтому $\mathbf{j}_s = \mathbf{j}^2$). Применив теперь к обеим частям равенства (44.7) операцию rot и заметив при этом, что $\text{rot } \mathbf{A} = \mathbf{B}$ — магнитная индукция в теле, получим *уравнение Лондонов*

$$\text{rot } \mathbf{j} = -\frac{e^2 n_s}{mc} \mathbf{B} \quad (44.8)$$

(*F. London, H. London, 1935*)³⁾.

Это уравнение специфично для сверхпроводника. Используем также и общие уравнения Максвелла

$$\text{rot } \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad (44.9)$$

$$\text{div } \mathbf{B} = 0. \quad (44.10)$$

Подставив $\mathbf{j}$ из (44.9) в (44.8) и заметив, что в силу (44.10) $\text{rot rot } \mathbf{B} = -\Delta \mathbf{B}$, получим уравнение для магнитного поля в сверхпроводнике

$$\Delta \mathbf{B} = \delta^{-2} \mathbf{B}, \quad (44.11)$$

¹⁾ Феноменологическая электродинамика сверхпроводников изложена в другом томе этого курса — см. VIII, гл. VI.

²⁾ Это будет предполагаться и везде ниже в этой главе, так что под $\mathbf{j}$ будет подразумеваться плотность сверхпроводящего тока.

³⁾ Изложенный вывод уравнения (44.8) принадлежит Л. Д. Ландау (1941).

где введено обозначение

$$\delta^2 = mc^2 / (4\pi e^2 n_s). \quad (44.12)$$

Найдем с помощью этого уравнения распределение поля в сверхпроводнике вблизи его поверхности, которую будем считать плоской; эту плоскость выбираем в качестве плоскости yz , а ось x направим внутрь тела. В этих условиях распределение поля зависит только от одной координаты x , и из (44.10) имеем $dB_x/dx=0$; из (44.11) автоматически следует тогда, что и $B_x=0$. Уравнение (44.11) принимает теперь вид $d^2\mathbf{B}/dx^2 = \mathbf{B}/\delta^2$, откуда

$$\mathbf{B}(x) = \mathfrak{H}e^{-x/\delta}, \quad (44.13)$$

где вектор $\mathfrak{H}$ параллелен поверхности.

Мы видим, что магнитное поле экспоненциально затухает в глубь сверхпроводника, проникая в него лишь на расстоянии $\sim \delta$. Эта длина макроскопична, но мала по сравнению с обычными размерами массивных образцов ($\delta \sim 10^{-6} - 10^{-5}$ см), так что поле проникает фактически лишь в тонкий поверхностный слой. Длину δ называют *лондоновской глубиной проникновения* поля. Подчеркнем, что она является непосредственно измеримой величиной, имеющей вполне определенный смысл, — в отличие от условного смысла параметра n_s .

Произведенный вывод нуждается, однако, в существенной оговорке. Исходная формула (44.7) применима лишь при условии достаточной медленности изменения всех величин в пространстве: характерные расстояния, на которых происходит существенное их изменение, должны быть велики по сравнению с длиной когерентности ξ_0 ¹⁾. В данном случае это значит, что должно быть

$$\delta \gg \xi_0. \quad (44.14)$$

Это требование, разумеется, не бросает тени на само доказательство факта вытеснения поля из сверхпроводника: предположение о невытеснении поля привело бы к логическому противоречию, так как его изменение в таком случае было бы заведомо медленным и уравнение (44.11) было бы применимо. Но конкретное уравнение (44.11) и следующий из него закон затухания поля (44.13) справедливы только при соблюдении условия (44.14).

¹⁾ Напомним, что сама индукция $\mathbf{B}$ есть истинная микроскопическая напряженность магнитного поля, усредненная по физически бесконечно малым элементам объема, размеры которых велики лишь по сравнению с постоянной решетки.

Ситуацию, когда в сверхпроводнике выполняется неравенство $\delta \gg \xi_0$, называют *лондоновской*. В обратной же ситуации, когда $\delta \ll \xi_0$, говорят о *пиппардовском* случае (закон затухания поля в глубь сверхпроводника в этом случае будет рассмотрен в § 52). При $T \rightarrow T_c$ плотность сверхпроводящих электронов $n_s \rightarrow 0$, так что $\delta \rightarrow \infty$. Поэтому в достаточной близости к точке перехода ситуация всегда лондоновская. Но при $T \rightarrow 0$ соотношение между δ и ξ_0 зависит от конкретных свойств металла¹⁾.

Наконец, рассмотрим еще одно следствие выражения (44.7), не зависящее от соотношения между δ и ξ_0 .

Как известно из макроскопической электродинамики сверхпроводников, если через отверстие сверхпроводящего тора проходит магнитный поток, то этот поток остается постоянным при любых изменениях состояния тела (не нарушающих его сверхпроводимости); при этом предполагается, что тор массивен — его диаметр и толщина велики по сравнению с длиной когерентности и глубиной проникновения поля. Покажем, что величина «вмерзшего» в отверстие тора магнитного потока может быть лишь целым кратным некоторого элементарного «кванта потока» (*F. London, 1954*).

В толщине тела (вне области проникновения поля) плотность тока $\mathbf{j} = 0$; векторный же потенциал отличен от нуля — равен нулю лишь его ротор, т. е. магнитная индукция $\mathbf{B}$. Выберем какой-либо замкнутый контур C , охватывающий собой отверстие тора и проходящий внутри тела вдали от его поверхности; таким выбором обеспечивается соблюдение условия применимости формулы (44.7) — достаточная медленность изменения фазы Φ и потенциала $\mathbf{A}$ в пространстве. Циркуляция вектора $\mathbf{A}$ вдоль контура C совпадает с потоком магнитной индукции через натянутую на контур поверхность, т. е. потоком ϕ через отверстие тора:

$$\oint \mathbf{A} d\mathbf{l} = \int \text{rot} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{f} = \int \mathbf{B} d\mathbf{f} \equiv \phi.$$

С другой стороны, приравняв выражение (44.7) нулю и проинтегрировав его по контуру, получим

$$\oint \mathbf{A} d\mathbf{l} = \frac{\hbar c}{2e} \oint \nabla \Phi \cdot d\mathbf{l} = \frac{\hbar c}{2e} \delta \Phi,$$

где $\delta \Phi$ — изменение фазы волновой функции при обходе контура. Но из требования однозначности этой функции следует, что

¹⁾ Лондоновский случай во всей области температур имеет место, например, в чистых металлах переходных групп периодической системы, в некоторых интерметаллических соединениях. Пиппардовский случай имеет место (вдали от T_c) в чистых металлах непериодических групп.

изменение фазы может быть лишь целым кратным от 2π . Таким образом, мы приходим к результату

$$\phi = n\phi_0, \quad \phi_0 = \frac{\pi\hbar c}{|e|} = 2 \cdot 10^{-7} \text{ Гс} \cdot \text{см}^2, \quad (44.15)$$

где n — целое число. Величина ϕ_0 представляет собой элементарный квант магнитного потока.

Квантование магнитного потока имеет также и другой аспект: оно приводит к дискретности значений полного тока J , который может протекать (в отсутствие внешнего магнитного поля) по сверхпроводящему кольцу. Действительно, ток J создает магнитный поток через отверстие кольца, равный LJ/c , где L — коэффициент самоиндукции. Приравняв этот поток $n\phi_0$, находим, что ток может иметь значения

$$J = \frac{c\phi_0}{L}n = \frac{\pi\hbar c^2}{|e|L}n. \quad (44.16)$$

В противоположность кванту магнитного потока, «квант полного тока» зависит (вместе с самоиндукцией L) от формы и размеров кольца.

Задача

Определить магнитный момент сверхпроводящего шарика радиуса $R \ll \delta$, находящегося в магнитном поле, в лондоновском случае.

Решение. При $R \ll \delta$ можно считать магнитное поле внутри шарика постоянным и равным внешнему полю $\mathfrak{H}$. Если выбрать векторный потенциал в виде $\mathbf{A} = 1/2[\mathfrak{H}\mathbf{r}]$, то можно положить просто

$$\mathbf{j} = -(n_s e^2 / mc) \mathbf{A}$$

(т. е. положить в (44.7) $\Phi = 0$); граничное условие исчезновения нормальной составляющей тока ($\mathbf{n}\mathbf{j} = 0$) на поверхности шарика выполняется тогда автоматически. Магнитный момент вычисляется как интеграл

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2c} \int [\mathbf{r}\mathbf{j}] dV$$

по объему шарика и равен

$$\mathbf{M} = -\frac{R^5}{30\delta^2} \mathfrak{H}.$$

§ 45. Уравнения Гинзбурга–Ландау

Полная теория, описывающая поведение сверхпроводника в магнитном поле, очень сложна. Ситуация, однако, существенно упрощается в области температур вблизи точки перехода. Здесь

оказывается возможным построить систему относительно простых уравнений, причем применимых не только в слабых, но и в сильных полях¹⁾.

В общей теории Ландау фазовых переходов второго рода отличие «несимметричной» фазы от «симметричной» описывается параметром порядка, обращающимся в точке перехода в нуль (см. V, § 142). Для сверхпроводящей фазы естественным таким параметром является конденсатная волновая функция Ξ . Во избежание излишних (с принципиальной точки зрения) усложнений будем считать симметрию металлического кристалла кубической; как было указано в § 44, в этом случае сверхпроводящее состояние характеризуется скалярной величиной n_s — плотностью сверхпроводящих электронов. Более удобным выбором параметра порядка в этом случае является величина (обозначим ее через ψ), пропорциональная Ξ , но нормированная условием $|\psi|^2 = n_s/2$. Фаза величины ψ совпадает с фазой функции Ξ :

$$\psi = \sqrt{\frac{n_s}{2}} e^{i\Phi}. \quad (45.1)$$

Плотность сверхпроводящего тока (44.2), выраженная через ψ , записывается в виде

$$\mathbf{j}_s = \frac{e\hbar}{m} |\psi|^2 \nabla \Phi = -\frac{ie\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (45.2)$$

Отправным пунктом теории является выражение для свободной энергии сверхпроводника как функционала от функции $\psi(\mathbf{r})$. В соответствии с общими положениями теории Ландау, оно получается разложением плотности свободной энергии по степеням малого (вблизи точки перехода) параметра порядка ψ и его производных по координатам. Сначала рассмотрим сверхпроводник в отсутствие магнитного поля.

В соответствии со своим смыслом как величины, пропорциональной гриновской функции $F(X, X) \equiv -i\Xi(X)$, параметр порядка ψ неоднозначен: поскольку функция $F(X, X)$ составлена из двух операторов $\hat{\Psi}$, то произвольное изменение фазы этих операторов, $\hat{\Psi} \rightarrow \hat{\Psi} e^{i\alpha/2}$, приводит к изменению фазы функции F на α . Физические величины не должны, конечно, зависеть от этого произвола, т. е. должны быть инвариантны по отношению к преобразованию комплексного параметра порядка: $\psi \rightarrow \psi e^{i\alpha}$. Этим требованием исключаются члены нечетных степеней по ψ в разложении свободной энергии.

¹⁾ Излагаемая ниже теория принадлежит В. Л. Гинзбургу и Л. Д. Ландау (1950). Замечательно, что она была построена феноменологическим путем, еще до создания микроскопической теории сверхпроводимости.

Конкретный вид этого разложения устанавливается на основе тех же соображений, что и в общей теории фазовых переходов второго рода (см. V, § 146). Не повторяя этих рассуждений, напомним следующее разложение полной свободной энергии сверхпроводящего тела¹⁾:

$$F = F_n + \int \left\{ \frac{\hbar^2}{4m} |\nabla\psi|^2 + a|\psi|^2 + \frac{b}{2} |\psi|^4 \right\} dV. \quad (45.3)$$

Здесь F_n — свободная энергия в нормальном состоянии (т. е. при $\psi = 0$); b — зависящий лишь от плотности вещества (но не от температуры) положительный коэффициент; величина a зависит от температуры по закону

$$a = (T - T_c)\alpha, \quad (45.4)$$

обращаясь в нуль в точке перехода; коэффициент $\alpha > 0$ в соответствии с тем, что сверхпроводящей фазе отвечает область $T < T_c$; коэффициент при $|\nabla\psi|^2$ в (45.3) выбран так, чтобы для тока получалось выражение (45.2) (см. ниже)²⁾. Тот факт, что в (45.3) фигурируют лишь первые производные от ψ , связан с предположением о достаточной медленности изменения ψ в пространстве.

В однородном сверхпроводнике, в отсутствие внешнего поля, параметр ψ не зависит от координат. Тогда выражение (45.3) сводится к

$$F = F_n + aV|\psi|^2 + \frac{bV}{2} |\psi|^4. \quad (45.5)$$

Равновесное значение $|\psi|^2$ (при $T < T_c$) определяется условием минимальности этого выражения:

$$|\psi|^2 = -\frac{a}{b} = \frac{\alpha}{b}(T_c - T); \quad (45.6)$$

плотность сверхпроводящих электронов в зависимости от температуры обращается в точку перехода в нуль по линейному закону.

Подставив значение (45.6) обратно в (45.5), найдем разность свободных энергий сверхпроводящего и нормального состояний:

$$F_s - F_n = -V \frac{\alpha^2}{2b} (T_c - T)^2. \quad (45.7)$$

¹⁾ Напомним лишь, что написанный вид градиентного члена связан с предположенной кубической симметрией кристалла. При более низкой симметрии он имел бы вид более общей квадратичной формы из производных $\partial\psi/\partial x_i$.

²⁾ Этот выбор (в том числе отождествление m с истинной массой электрона) не имеет, конечно, глубокого смысла и условен в той же мере, как и определение n_s в (44.2).

Дифференцированием по температуре отсюда можно найти разность энтропий, а затем и скачок теплоемкости в точке перехода¹⁾:

$$C_s - C_n = V \frac{\alpha^2 T_c}{b}. \quad (45.8)$$

Вблизи точки перехода разность (45.7) представляет собой малую добавку в свободной энергии. Согласно теореме о малых добавках (V, § 15), эта же величина (выраженная в функции температуры и давления вместо температуры и объема) дает разность термодинамических потенциалов $\Phi_s - \Phi_n$. С другой стороны, согласно общей формуле термодинамики сверхпроводников (см. VIII, (55.7)), эта разность совпадает с величиной $-V H_c^2/8\pi$, где H_c — критическое поле, разрушающее сверхпроводимость. Таким образом, находим для последнего следующий закон температурной зависимости вблизи точки перехода²⁾:

$$H_c = \left(\frac{4\pi a^2}{b} \right)^{1/2} = \left(\frac{4\pi \alpha^2}{b} \right)^{1/2} (T_c - T). \quad (45.9)$$

При наличии магнитного поля выражение (45.3) для свободной энергии должно быть изменено в двух отношениях. Во-первых, к подинтегральному выражению надо добавить плотность энергии магнитного поля $\mathbf{B}^2/8\pi$ (где $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ — магнитная индукция в теле). Во-вторых, надо изменить градиентный член таким образом, чтобы удовлетворить требованию калибровочной инвариантности. В предыдущем параграфе было показано, что

¹⁾ Сравнив формулы (45.6) и (45.8) для $|\psi|^2 = \rho_s/2m$ и для скачка теплоемкости с формулами (40.16) и (40.11) для тех же величин в модели БКШ, можно найти значения коэффициентов α и b в этой модели (Л. П. Горьков, 1959):

$$\alpha = 6\pi^2 T_c / 7\zeta(3)\mu = 7,04 \cdot T_c / \mu, \quad b = \alpha T_c / n;$$

использована связь плотности числа частиц $n = \rho/m$ и химического потенциала μ (при $T = 0$) с предельным импульсом как для идеального газа:

$$n = p_F^3 / 3\pi^2 \hbar^3, \quad \mu = p_F^2 / 2m.$$

²⁾ В модели БКШ:

$$H_c = 2,44 (mp_F / \hbar^3)^{1/2} (T_c - T) \text{ при } T \rightarrow T_c.$$

Приведем также значение H_c в этой же модели при $T = 0$:

$$H_c = 0,99 T_c (mp_F / \hbar^3)^{1/2}$$

(оно получается приравниванием $-V H_c^2/8\pi$ разности энергий (40.9)).

это условие приводит к необходимости замены градиента фазы конденсатной волновой функции $\nabla\Phi$ разностью $\nabla\Phi - 2e\mathbf{A}/\hbar c$. В данном случае это значит, что надо заменить:

$$\nabla\psi = e^{i\Phi}\nabla|\psi| + i\psi\nabla\Phi \rightarrow \nabla\psi - \frac{2ie}{\hbar c}\mathbf{A}\psi.$$

Таким образом, мы приходим к следующему основному выражению:

$$F = F_{n0} + \int \left\{ \frac{\mathbf{B}^2}{8\pi} + \frac{\hbar^2}{4m} \left| \left(\nabla - \frac{2ie}{\hbar c}\mathbf{A} \right) \psi \right|^2 + a|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4 \right\} dV \quad (45.10)$$

(F_{n0} — свободная энергия тела в нормальном состоянии в отсутствие магнитного поля). Подчеркнем, что коэффициент $2ie/\hbar c$ в этом выражении имеет безусловный характер (в отличие от отмеченной выше условности выбора коэффициента $\hbar^2/4m$). Удвоение заряда электрона в нем есть следствие эффекта Купера (*Л. П. Горьков*, 1959); этот коэффициент не мог бы быть, конечно, установлен чисто феноменологическим путем.

Дифференциальные уравнения, определяющие распределение волновой функции ψ и магнитного поля в сверхпроводнике, находятся теперь минимизацией свободной энергии как функционала от трех независимых функций: ψ , ψ^* и $\mathbf{A}$.

Комплексная величина ψ есть совокупность двух вещественных величин; поэтому ψ и ψ^* надо рассматривать при варьировании как независимые функции. Варьируя интеграл по ψ^* и преобразовав интеграл от члена $(\nabla\psi - 2ie\mathbf{A}/\hbar c)\nabla\delta\psi^*$ интегрированием по частям, получим

$$\delta F = \int \left\{ -\frac{\hbar^2}{4m} \left(\nabla - \frac{2ie}{\hbar c}\mathbf{A} \right)^2 \psi + a\psi + b|\psi|^2\psi \right\} \delta\psi^* dV + \frac{\hbar^2}{4m} \oint \left(\nabla\psi - \frac{2ie}{\hbar c}\mathbf{A}\psi \right) \delta\psi^* d\mathbf{f}; \quad (45.11)$$

второй интеграл берется по поверхности тела. Положив $\delta F = 0$, получим, в качестве условия равенства нулю объемного интеграла при произвольном $\delta\psi^*$, следующее уравнение:

$$\frac{1}{4m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \psi + a\psi + b|\psi|^2\psi = 0 \quad (45.12)$$

(варьирование же интеграла по ψ приводит к комплексно-сопряженному уравнению, т. е. не дает ничего нового).

Аналогичным образом, варьирование интеграла по $\mathbf{A}$ приводит к уравнению Максвелла

$$\text{rot } \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}, \quad (45.13)$$

причем плотность тока дается выражением

$$\mathbf{j} = -\frac{ie\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{2e^2}{mc}|\psi|^2\mathbf{A}, \quad (45.14)$$

совпадающим с (44.7) (мы пишем $\mathbf{j}$ вместо $\mathbf{j}_s$, так как в термодинамическом равновесии нормальный ток отсутствует). Отметим, что из (45.13) следует уравнение непрерывности $\operatorname{div}\mathbf{j} = 0$; это уравнение можно получить также и прямым дифференцированием выражения (45.14) с учетом уравнения (45.12).

Уравнения (45.12) – (45.14) составляют полную систему *уравнений Гинзбурга–Ландау*.

Граничные условия к этим уравнениям получаются из условия равенства нулю интегралов по поверхности в вариации δF . Из (45.11), таким образом, получается граничное условие

$$\mathbf{n}\left(-i\hbar\nabla\psi - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\psi\right) = 0, \quad (45.15)$$

где $\mathbf{n}$ — вектор нормали к поверхности тела. Отметим, что в силу этого условия обращается в нуль, как и следовало, также и нормальная компонента тока (45.14): $\mathbf{n}\mathbf{j} = 0^1$.

Что касается граничных условий для поля, то из уравнения (45.13) с учетом конечности $\mathbf{j}$ во всем пространстве (вплоть до поверхности тела) следует непрерывность тангенциальной компоненты индукции $\mathbf{B}_t$. Из уравнения же

$$\operatorname{div}\mathbf{B} = 0$$

следует непрерывность нормальной составляющей индукции B_n . Другими словами, граничные условия требуют непрерывности всего вектора $\mathbf{B}$.

¹⁾ При граничном условии (45.15) само ψ не обращается в нуль, как это, казалось бы, должно было быть для волновой функции на границе тела. Это обстоятельство связано с тем, что в действительности ψ убывает до нуля лишь на расстояниях порядка атомных от поверхности; между тем такие расстояния в теории Гинзбурга–Ландау рассматриваются как пренебрежимо малые. (Подробное см. в книге Де Жен П. Сверхпроводимость металлов и сплавов. — М.: Мир, 1968, с. 230–232.)

Условие (45.15) выведено здесь по существу для границы сверхпроводника с вакуумом. Оно остается в силе и для границы с диэлектриком, но для границы раздела между различными металлами (из которых один сверхпроводящий, а другой нормальный) оно непригодно — в нем не учитывается эффект частичного проникновения сверхпроводящих электронов в нормальный металл. В этом случае (45.15) заменяется условием более общего вида, совместимого с требованием $\mathbf{n}\mathbf{j} = 0$:

$$\mathbf{n}\left(-i\hbar\nabla\psi - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\psi\right) = \frac{i\psi}{\lambda}, \quad (45.15a)$$

где λ — вещественная постоянная (размерности длины); оценка этой постоянной требует, однако, более детального микроскопического исследования.

В слабом магнитном поле можно пренебречь его влиянием на $|\psi|^2$ и считать $|\psi|^2$ равным постоянному вдоль тела значению (45.6). Тогда подстановка (45.14) в (45.13) (и последующее применение операции rot к обоим сторонам уравнения) приводит к уравнению Лондонов (44.11) с глубиной проникновения

$$\delta = \left[\frac{mc^2 b}{8\pi e^2 |a|} \right]^{1/2} = \left[\frac{mc^2 b}{8\pi e^2 \alpha (T_c - T)} \right]^{1/2}. \quad (45.16)$$

Наряду с этим размером уравнения Гинзбурга–Ландау содержат еще одну характерную длину: корреляционный радиус флуктуаций параметра порядка ψ (в отсутствие поля); обозначим его через $\xi(T)$. По известным формулам теории флуктуаций (см. V, § 146), этот радиус выражается через коэффициенты в свободной энергии (45.3) согласно

$$\xi(T) = \frac{\hbar}{2(m|a|)^{1/2}} = \frac{\hbar}{2(m\alpha)^{1/2} (T_c - T)^{1/2}}. \quad (45.17)$$

Характерными длинами (45.16), (45.17) определяется порядок величины расстояний, на которых существенно меняется параметр порядка ψ и магнитное поле, описываемые уравнениями Гинзбурга–Ландау. При этом длина δ характерна, вообще говоря, для магнитного поля, а длина $\xi(T)$ — для распределения ψ . Обе эти длины должны быть велики по сравнению с «размерами пары» ξ_0 для того, чтобы выполнялось предположение о достаточной медленности изменения всех величин в пространстве. Поскольку обе длины возрастают при приближении к точке перехода (по закону $(T_c - T)^{-1/2}$), то вблизи нее это условие, вообще говоря, выполняется (см. ниже).

Важное значение в излагаемой теории играет *параметр Гинзбурга–Ландау*, определяемый как постоянное (не зависящее от температуры) отношение двух указанных длин:

$$\kappa = \frac{\delta(T)}{\xi(T)} = \frac{mc b^{1/2}}{(2\pi)^{1/2} |e| \hbar}. \quad (45.18)$$

По порядку величины $\kappa \sim \delta_0 / \xi_0$, где ξ_0 — длина когерентности (39.21), а δ_0 — лондоновская глубина проникновения при абсолютном нуле. Укажем также формулу

$$\kappa = 2\sqrt{2} \frac{|e|}{\hbar c} H_c(T) \delta^2(T), \quad (45.19)$$

получающуюся с помощью (45.9) и (45.16) и выражающую κ непосредственно через наблюдаемые величины.

Установив вид уравнений, обсудим теперь вопрос об области их применимости.

Со стороны низких температур эта область во всяком случае ограничена условием $T_c - T \ll T_c$, позволяющим считать параметр порядка малым и тем самым лежащим в основе всего произведенного разложения свободной энергии. Этим же условием обеспечивается соблюдение неравенства $\xi(T) \gg \xi_0$, но для соблюдения неравенства $\delta(T) \gg \xi_0$ условие оказывается более жестким в случае сверхпроводников с малыми значениями параметра κ^1 ; в этих случаях из неравенства $\delta \gg \xi_0$ следует условие

$$T_c - T \ll \kappa^2 T_c. \quad (45.20)$$

Со стороны же $T \rightarrow T_c$ применимость уравнений ограничена лишь общим условием применимости теории фазовых переходов Ландау, связанным с возрастанием флуктуаций параметра порядка. В данном случае, однако, это условие оказывается чрезвычайно слабым. Действительно, оно выражается через коэффициенты разложения (45.3) неравенством

$$T_c - T \gg \frac{b^2 T_c^2}{\alpha (\hbar^2/m)^3}$$

(см. V, (146.15)). Оценив, например, выражение в правой стороне с помощью значений b и α в модели БКШ, получим

$$(T_c - T)/T_c \gg (T_c/\mu)^4. \quad (45.21)$$

Ввиду крайней малости отношения $T_c/\mu \sim 10^{-3} - 10^{-4}$ можно считать, что это условие выполняется практически вплоть до самой точки перехода. Флуктуационная же область для перехода второго рода между сверхпроводящей и нормальной фазами практически отсутствует.

Задача

Для плоской пленки с толщиной $d \gg \xi$, δ найти критическое значение магнитного поля (параллельного плоскости пленки), разрушающего сверхпроводимость (В. Л. Гинзбург, Л. Д. Ландау, 1950)².

Решение. Выберем серединную плоскость пленки в качестве плоскости xz с осью x вдоль направления поля. В уравнении (45.13) для поля $B \equiv B_x(y)$ (меняющегося по оси y поперек пленки) можно считать $\psi = \text{const}$. Тогда первый член в выражении тока (45.14) исчезает и применение операции rot к (45.13) приводит к уравнению $B'' = \theta^2 B/\delta^2$, где $\theta = \psi/\psi_0$, $\psi_0^2 = |a|/b$.

¹) Приведем для примера значения κ для некоторых чистых металлов: Al — 0,01, Sn — 0,13, Hg — 0,16, Pb — 0,23.

²) Аналогичную задачу для маленького шарика см. в § 47.

Симметричное по y решение этого уравнения

$$B(y) = \mathfrak{H} \frac{\operatorname{ch}(y\theta/\delta)}{\operatorname{ch}(d\theta/2\delta)} \approx \mathfrak{H} \left[1 + \frac{y^2 - (d/2)^2}{2\delta^2} \theta^2 \right]$$

($\mathfrak{H}$ — внешнее поле). Этому полю отвечает распределение тока

$$j = j_z = -\frac{c}{4\pi} B' \approx -\frac{c\theta^2 \mathfrak{H}}{4\pi\delta^2} y.$$

В уравнении же (45.12) зависимостью ψ от y полностью пренебречь нельзя: малая производная $\partial^2 \psi / \partial y^2$ фактически умножается здесь на $\hbar^2 / m|a| \sim \xi^2$ и тем самым приобретает большой (в силу условия $d \ll \xi$) множитель $(\xi/d)^2$; в то же время в этом уравнении можно пренебречь потенциалом $A = A_z(y)$, приводящим здесь к членам более высокого порядка малости по d/ξ . Чтобы избавиться от необходимости рассмотрения зависимости ψ от y , усредним уравнение (45.12) по толщине пленки; производные по y при этом выпадут в силу граничного условия $\partial\psi/\partial y = 0$ на поверхности пленки. Заметив также, что

$$-\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \approx \left(\frac{mj}{|e|\hbar|\psi|^2} \right)^2 \psi$$

в силу зависимости фазы функции ψ от z (и связи ее градиента с током) найдем, после сокращения на ψ :

$$\frac{m\bar{j}^2}{4e^2|\psi|^4} - |a| + b|\psi|^2 = 0,$$

где

$$\bar{j}^2 = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} j^2 dy = \frac{c^2 d^2 \theta^4 \mathfrak{H}^2}{3(8\pi)^2 \delta^4}.$$

Используя также выражения (45.9) и (45.16), придем к уравнению

$$\frac{1}{24} \left(\frac{\mathfrak{H}d}{H_c \delta} \right)^2 = 1 - \frac{|\psi|^2}{\psi_0^2},$$

определяющему значение ψ для пленки в магнитном поле. Критическое значение поля для пленки $H_c^{(\text{пл})}$ есть то, при каком ψ обращается в нуль. Оно связано с критическим полем H_c массивного сверхпроводника равенством

$$H_c^{(\text{пл})} = \sqrt{24} H_c \frac{\delta}{d}.$$

В рассмотренных условиях разрушение сверхпроводимости полем происходит путем фазового перехода второго рода: ψ обращается в нуль при увеличении $\mathfrak{H}$ непрерывным образом. Это вполне естественно, поскольку при $d \ll \delta$ поле фактически проникает в сверхпроводящую пленку, так что нет причин для перехода первого рода, который как раз и состоял бы во внезапном проникновении поля в тело.

§ 46. Поверхностное натяжение на границе сверхпроводящей и нормальной фаз

Уравнения Гинзбурга–Ландау позволяют, в частности вычислить поверхностное натяжение на границе сверхпроводящей (s) и нормальной (n) фаз (в одном и том же образце), связав его с величинами, характеризующими объемные свойства вещества (*В. Л. Гинзбург, Л. Д. Ландау, 1950*). Напомним, что такие границы существуют в металлических образцах, находящихся в так называемом промежуточном состоянии в магнитном поле. Поскольку все отличие обоих фаз сводится к тому, что в одной из них $\psi \neq 0$, а в другой $\psi = 0$, то переход между ними совершается непрерывно в некотором слое и описывается уравнениями Гинзбурга–Ландау с граничными условиями, поставленными лишь на больших расстояниях по обе стороны этого слоя.

Рассмотрим плоскую границу раздела между n - и s -фазами металла. Выбрав эту границу в качестве плоскости yz , направим ось x в глубь s -фазы; распределение всех величин в обоих фазах зависит только от координаты x . Векторный потенциал поля, выбор которого оставался еще неоднозначным, подчиним калибровке, в которой $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$; в данном случае это дает $dA_x/dx = 0$, откуда видно, что можно положить $A_x = 0$. Из соображений симметрии очевидно, что вектор $\mathbf{A}$ лежит везде в одной плоскости; пусть это будет плоскость xy , так что $A_y \equiv A$, тогда вектор индукции лежит в плоскости xz , причем

$$B \equiv B_z = A' \quad (46.1)$$

(штрих означает дифференцирование по x).

Далее, перепишем уравнение (45.13) в обычном в макроскопической электродинамике виде $\operatorname{rot} \mathbf{H} = 0$, введя напряженность поля $\mathbf{H}$ согласно ¹⁾

$$\mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{M} = \mathbf{j}.$$

Из этого уравнения следует в данном случае, что $H = \text{const}$. Вдали от границы раздела, в толще нормальной фазы индукция и напряженность совпадают, причем равны как раз критическому значению: $B = H = H_c$ (магнитной восприимчивостью нормальной фазы пренебрегаем). Поэтому и во всем пространстве будет $H \equiv H_z = H_c$.

¹⁾ Напомним, во избежание недоразумений, что замечание в VIII, § 53 о нецелесообразности введения величины $\mathbf{H}$ относилось к электродинамике сверхпроводников, в которой область проникновения магнитного поля рассматривалась как бесконечно тонкая. Уравнения же Гинзбурга–Ландау применяются именно к структуре этой области.

Пренебрегая изменением плотности вещества при сверхпроводящем фазовом переходе, будем считать ее (наряду с температурой) постоянной вдоль всего тела¹⁾. Обозначим через f свободную энергию единицы объема (в отличие от свободной энергии F тела в целом). При постоянных температуре и плотности и при пренебрежении поверхностными эффектами дифференциал

$$df = \frac{\mathbf{H}}{4\pi} d\mathbf{B} \quad (46.2)$$

(см. VIII, § 31). Отсюда видно, что дополнительное требование постоянства $\mathbf{B}$ привело бы в этих условиях также и к постоянству величины

$$\tilde{f} = f - \frac{\mathbf{H}\mathbf{B}}{4\pi}. \quad (46.3)$$

Поэтому весь вклад в интеграл $\tilde{F} = \int \tilde{f} dV$, происходящий от переменной части $\tilde{F}$, обусловлен только наличием границы раздела. Отнеся этот вклад к единице площади границы, мы можем, следовательно, вычислить коэффициент поверхностного натяжения как интеграл

$$\alpha_{ns} = \int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{f} - \tilde{f}_n) dx, \quad (46.4)$$

где постоянная $\tilde{f}_n$ есть значение $\tilde{f}$ вдали от границы раздела, например, в глубине нормальной фазы.

Для нормальной фазы свободная энергия

$$f_n = f_{n0} + B^2/8\pi = f_{n0} + H_c^2/8\pi,$$

так что

$$\tilde{f}_n = f_n - \frac{H_c^2}{4\pi} = f_{n0} - \frac{H_c^2}{8\pi} = f_{n0} - \frac{a^2}{2b}$$

(в последнем равенстве учтено (45.9)). Величина же $\tilde{f}$ в произвольной точке выражается через плотность свободной энергии f согласно

$$\tilde{f} = f - \frac{H_c B}{4\pi}.$$

¹⁾ Строго говоря, при фазовом равновесии постоянен вдоль системы химический потенциал (а не плотность). С учетом изменения плотности надо было бы поэтому рассматривать не свободную энергию, а термодинамический потенциал Ω .

Воспользовавшись теперь выражением (45.10), приходим к следующей формуле для поверхностного натяжения:

$$\alpha_{ns} = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{B^2}{8\pi} + \frac{\hbar^2}{4m} \left(|\psi'|^2 + \frac{4e^2}{\hbar^2 c^2} A^2 |\psi|^2 \right) + \right. \\ \left. + a|\psi|^2 + \frac{b}{2} |\psi|^4 - \frac{H_c B}{4\pi} + \frac{a^2}{2b} \right\} dx. \quad (46.5)$$

Как и следовало, подынтегральное выражение обращается в нуль как в глубине нормальной фазы ($x \rightarrow -\infty$), где $\psi = 0$, $B = H_c$ так и в глубине сверхпроводящей фазы ($x \rightarrow \infty$), где $|\psi|^2 = -a/b$, $B = 0$.

Обратим внимание на то, что в подынтегральном выражении в (46.5) выпал член $i\mathbf{A}\nabla\psi$ в результате равенства $A_x = 0$. Такой же член выпадает из (45.12), так что остается уравнение с вещественными коэффициентами; поэтому решение этого уравнения может быть выбрано вещественным, что и предполагается ниже. При этом в выражении плотности тока (45.14) исчезает первый член и остается

$$\mathbf{j} = -\frac{2e^2}{mc} \psi^2 \mathbf{A}. \quad (46.6)$$

Кроме того, введем вместо переменной x и функций $A(x)$, $\psi(x)$ безразмерные величины

$$\bar{x} = \frac{x}{\delta}, \quad \bar{\psi} = \psi \sqrt{\frac{b}{|a|}}, \quad \bar{A} = \frac{A}{H_c \delta}, \quad \bar{B} = \frac{d\bar{A}}{d\bar{x}} = \frac{B}{H_c}. \quad (46.7)$$

Ниже в этом параграфе мы будем пользоваться только этими величинами, опуская для краткости черточки над буквами. Уравнение (45.12) в этих переменных принимает вид

$$\psi'' = \kappa^2 \left[\left(\frac{A^2}{2} - 1 \right) \psi + \psi^3 \right]. \quad (46.8)$$

Уравнение же (45.13) с $\mathbf{j}$ из (46.6) приводится к виду

$$A'' = A\psi^2. \quad (46.9)$$

Граничные условия к этим уравнениям в рассматриваемой задаче (отвечающие n - и s -фазам при $x \rightarrow -\infty$ и $x \rightarrow \infty$):

$$\begin{aligned} \psi &= 0, & B &= A' = 1 & \text{при } x &= -\infty, \\ \psi &= 1, & A' &= 0 & \text{при } x &= \infty. \end{aligned} \quad (46.10)$$

Легко проверить, что уравнения (46.8), (46.9) имеют первый интеграл

$$2\kappa^{-2}\psi'^2 + (2 - A^2)\psi^2 - \psi^4 + A'^2 = \text{const} = 1; \quad (46.11)$$

значение постоянной определено по граничным условиям¹⁾.

Наконец, выражение (46.5) принимает вид

$$\begin{aligned} \alpha_{ns} &= \frac{\delta H_c^2}{8\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{2}{\kappa^2} \psi'^2 + (A^2 - 2)\psi^2 + \psi^4 + (A' - 1)^2 \right] dx = \\ &= \frac{\delta H_c^2}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{2}{\kappa^2} \psi'^2 + A'(A' - 1) \right] dx \quad (46.12) \end{aligned}$$

(при переходе ко второму равенству член ψ^4 выражен из (46.11)).

Приступим к исследованию написанных уравнений. Рассмотрим сначала случай $\kappa \ll 1$ (обычно выполняющийся в сверхпроводящих чистых металлах). Это неравенство означает, что $\delta(T) \ll \xi(T)$, т. е. магнитное поле существенно меняется на расстоянии, малом по сравнению с характерным расстоянием изменения функции $\psi(x)$.

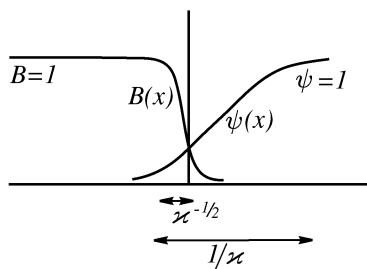


Рис. 6.

На рис. 6 схематически изображена картина распределения поля и ψ в этом случае. В области, где поле велико, имеем $\psi \approx 0$, затем поле резко падает, а функция $\psi(x)$ начинает медленно (на расстояниях

$x \sim 1/\kappa$) меняться в отсутствие поля. Положив в (46.11) $A = 0$, находим уравнение

$$\psi' = \frac{\kappa}{\sqrt{2}}(1 - \psi^2),$$

которое должно быть решено при условии $\psi = 0$ в точке $x = 0$, выбранной где-то внутри области спадания поля. Такое решение есть

$$\psi = \text{th}(\kappa x / \sqrt{2}), \quad (46.13)$$

¹⁾ Из условия (46.10) автоматически следует, что при $x \rightarrow \pm\infty$ также и $\psi' = 0$, а из этих же условий и уравнения (46.9) следует, что при $x \rightarrow \infty$ $A'' = 0$ и $A = 0$ (определенное значение $A(\infty)$ оказывается результатом выбора вещественной ψ).

а вычисление интеграла (46.12) с этой функцией (и $A = 0$) дает

$$\alpha_{ns} = \frac{H_c^2 \delta}{3\sqrt{2}\pi\kappa} = \frac{H_c^2}{8\pi} \frac{1,9\delta}{\kappa}. \quad (46.14)$$

Погрешность этого значения происходит от пренебрежения здесь вкладом в интеграл от области, в которой спадает поле. Для оценки ширины δ_1 этой области¹⁾ замечаем, с одной стороны, что, согласно уравнению (46.9), $\delta_1^{-2} \sim \psi^2$. С другой стороны, формула (46.13) должна оставаться, по порядку величины, справедливой и на границе области $x \sim \delta_1$, откуда $\psi \sim \kappa\delta_1$. Из этих двух соотношений находим $\delta_1 \sim \kappa^{-1/2}$. Вклад же в поверхностное натяжение от этой области оказывается $\sim H_c^2 \delta \kappa^{-1/2}$, т. е. мал по сравнению с (46.14) всего в отношении $\sim \kappa^{1/2}$ (так что точность (46.14) сравнительно невелика).

При увеличении параметра κ коэффициент поверхностного натяжения проходит через нуль и становится отрицательным. Это видно уже из того, что неравенство $\alpha_{ns} < 0$ во всяком случае осуществляется при достаточно больших значениях κ . Действительно, характерные расстояния изменения функции $\psi(x)$ в этой задаче не могут быть меньшими, чем для изменения $A(x)$, так как уже само по себе изменение A приводит к изменению ψ ; поэтому при большом κ членом ψ'^2/κ^2 под знаком интеграла в (46.12) можно пренебречь, а поскольку $0 < A' < 1$ (т. е. $0 < B < H_c$ в обычных единицах), то подынтегральное выражение оказывается отрицательным. Покажем, что обращение α_{ns} в нуль происходит при значении

$$\kappa = 1/\sqrt{2}. \quad (46.15)$$

Для этого перепишем выражение для α_{ns} в виде

$$\alpha_{ns} = \frac{H_c^2 \delta}{8\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [(A' - 1)^2 - \psi^4] dx \quad (46.16)$$

(оно получается из первого интеграла (46.12) интегрированием члена ψ'^2 по частям с последующей подстановкой ψ'' из (46.8)). Интеграл заведомо обратится в нуль, если будет тождественно равно нулю подынтегральное выражение, т. е. если будет

$$A' - 1 = -\psi^2 \quad (46.17)$$

¹⁾ Подчеркнем, что она не совпадает с глубиной проникновения поля в сверхпроводник из пустоты! В последнем случае в области проникновения поля $\psi \sim 1$, между тем как при проникновении из n -фазы поле спадает в области с малыми ψ .

(обратный знак в этом равенстве невозможен, так как поле $B = A'$ должно убывать с увеличением x). Исключив ψ из (46.17) и (46.9), найдем уравнение

$$A'' = A(1 - A'), \quad (46.18)$$

решение которого (при граничных условиях $A' = 1$ при $x = -\infty$ и $A = 0$ при $x = \infty$) определит распределение поля; в силу (46.17) граничные условия (46.10) для ψ после этого выполняются автоматически. Не решая уравнения (46.18) фактически, достаточно убедиться, что при $\kappa^2 = 1/2$ будет автоматически удовлетворено также и неиспользованное еще уравнение (46.8), или, что то же, его первый интеграл (46.11). Подставив (46.17) в (46.9), получим $\psi' = -A\psi/2$; это значение ψ' вместе с A' из (46.17) действительно тождественно удовлетворяет равенству (46.11) с $\kappa^2 = 1/2$.

Задача

Для сверхпроводника с параметром $\kappa \ll 1$ найти первую поправку по полю к глубине проникновения в слабых полях.

Решение. Выберем поверхность сверхпроводника в качестве плоскости yz с осью z в направлении внешнего поля $\mathfrak{H}$, ось x направим внутрь тела. Распределение поля и ψ в сверхпроводнике определяется уравнениями (46.8), (46.9), которые надо решать с граничными условиями

$$\begin{aligned} \psi' &= 0, & B &= A' = \mathfrak{H} & \text{при} & \quad x = 0, \\ \psi' &= 1, & A &= 0 & \text{при} & \quad x = \infty \end{aligned}$$

(первое из них есть условие (45.15)). Ищем решение в виде

$$\psi = 1 + \psi_1(x), \quad A = -\mathfrak{H}e^{-x} + A_1(x),$$

где ψ_1, A_1 — малые поправки к решению при $\kappa = 0$, отвечающему затуханию поля по лондоновскому закону (44.13). Для поправки ψ_1 имеем уравнение

$$\psi_1'' = 2\kappa^2\psi_1 + \frac{1}{2}\kappa^2\mathfrak{H}^2e^{-2x},$$

откуда с учетом граничных условий

$$\psi_1 = \frac{1}{8}\kappa^2\mathfrak{H}^2e^{-2x} - \frac{1}{4\sqrt{2}}\kappa\mathfrak{H}^2e^{-\sqrt{2}\kappa x}. \quad (1)$$

Теперь для A_1 пишем уравнение

$$A_1'' = A_1 - 2\mathfrak{H}e^{-x}\psi_1,$$

причем для ψ_1 сюда надо подставить только второй член из (1) первого порядка по κ . С учетом граничного условия ($A_1' = 0$ при $x = 0$) и пренебрегая, где возможно, высшими по κ членами в коэффициентах, находим

$$A_1 = -\frac{1}{8}\mathfrak{H}^3[(1 + \kappa\sqrt{2})e^{-x} - e^{-(1+\sqrt{2}\kappa)x}]. \quad (2)$$

Тем самым найдены поправки к закону затухания поля в глубь сверхпроводника. Эффективную глубину проникновения δ введем, согласно определению,

$$\mathfrak{H} \delta_{\text{эфф}} = \int_0^{\infty} B(x) dx = -A(0) = \mathfrak{H} - A_1(0).$$

Возвращаясь к обычным единицам, находим из (2)

$$\delta_{\text{эфф}} = \delta \left[1 + \frac{\kappa}{4\sqrt{2}} \left(\frac{\mathfrak{H}}{H_c} \right)^2 \right].$$

§ 47. Два рода сверхпроводников

Знак поверхностного натяжения α_{ns} оказывает существенное влияние на свойства сверхпроводников. Это дает основание делить все сверхпроводники на две категории: сверхпроводники *первого рода* с $\alpha_{ns} > 0$ и сверхпроводники *второго рода* с $\alpha_{ns} < 0$. Поскольку знак α_{ns} определяется значением параметра Гинзбурга–Ландау κ , то первым отвечают (вблизи T_c) значения $\kappa < 1/\sqrt{2}$, а вторым $\kappa > 1/\sqrt{2}$ ¹⁾.

Рассмотрим массивный цилиндрический сверхпроводник во внешнем продольном магнитном поле $\mathfrak{H}$. Если сверхпроводник относится к первому роду, то при увеличении поля он испытывает фазовый переход первого рода, когда поле достигает критического значения H_c . Роль поверхностного натяжения сводится при этом (как и при всяком фазовом переходе первого рода) лишь к затруднению образования первых зародышей новой фазы и тем самым — к возможности метастабильного сохранения s -фазы при полях, несколько превышающих H_c .

Если же сверхпроводник относится ко второму роду, то уже до достижения полем значения H_c в нем может оказаться термодинамически выгодным возникновение «вкраплений» n -фазы; увеличение объемной энергии компенсируется отрицательной энергией поверхности такого зародыша. Нижнюю границу значений поля, при которых это становится возможным, принято обозначать как H_{c1} и называть *нижним критическим полем*. Аналогичным образом, начав с металла в нормальном состоянии при большом внешнем поле, мы придем к некоторому значению $H_{c2} > H_c$ (*верхнее критическое поле*), за которым термодинамически выгодно возникновение «вкраплений» s -фазы — снова

¹⁾ К первому роду относятся сверхпроводящие чистые металлические элементы, ко второму — сверхпроводящие сплавы и упомянутые на стр. 226 высокотемпературные сверхпроводники. Предположение о том, что в сплавах $\kappa > 1/\sqrt{2}$, впервые было высказано Л. Д. Ландау.

за счет выигрыша в отрицательной энергии границ. Таким образом, в определенном интервале полей, $H_{c1} < \mathfrak{H} < H_{c2}$, сверхпроводник находится, как говорят, в *смешанном состоянии*¹⁾.

Его свойства в этом состоянии постепенно меняются от чисто сверхпроводящего при H_{c1} до чисто нормального при H_{c2} ; в то же время происходит постепенное проникновение в него магнитного поля. Значение же H_c , определяемое лишь соотношением между объемными энергиями n - и s -фаз, само по себе в этом случае ничем не замечательно.

Оба критических поля зависят, конечно, от температуры и обращаются в нуль при $T = T_c$. Это приводит к фазовой диаграмме для сверхпроводников второго рода (рис. 7; о штриховой кривой на этом рисунке — см. ниже).

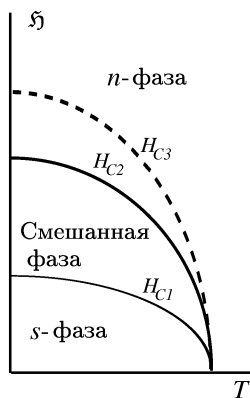


Рис. 7.

Верхнее критическое поле оказывается возможным определить (в рамках теории Гинзбурга–Ландау) даже без предварительного выяснения характера структуры смешанного состояния. Достаточно заметить, что при полях, несколько меньших H_{c2} , зародыши s -фазы могут иметь лишь малые значения параметра порядка ψ (очевидно, что $\psi \rightarrow 0$ при $\mathfrak{H} \rightarrow H_{c2}$). Поэтому состояние

этих зародышей может быть описано уравнениями Гинзбурга–Ландау, линеаризованными по ψ . Опустив в (45.12) нелинейный член, приходим к уравнению

$$\frac{1}{4m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \psi = |a|\psi, \quad (47.1)$$

причем под $\mathbf{A}$ можно понимать векторный потенциал однородного поля $\mathfrak{H}$ при $\psi = 0$, когда тело находится в нормальном состоянии с полностью проникшим в него внешним полем.

Но (47.1) по своей форме есть просто уравнение Шредингера для частицы с массой $2m$ и зарядом $2e$ в магнитном поле, причем $|a|$ играет роль уровня энергии; совпадают и граничные условия в обеих задачах: $\psi = 0$ на бесконечности. Как известно (см. III, § 112), минимальное значение энергии частицы, движущейся в однородном магнитном поле, есть $E_0 = \hbar\omega_H/2$, где $\omega_H = 2|e|\mathfrak{H}/2mc$ (от этого значения начинается непрерывный

¹⁾ Не путать его с промежуточным состоянием сверхпроводников первого рода, возникающим при определенных конфигурациях образца и внешнего магнитного поля!

спектр энергий). Из аналогии между обоими задачами следует поэтому, что описываемые уравнением (47.1) зародыши s -фазы могут существовать только при

$$|a| > \frac{|e|\hbar}{2mc} \mathfrak{H},$$

так что критическое поле $H_{c2} = 2mc|a|/|e|\hbar$. С помощью выражений (45.9), (45.17), (45.18) эта формула может быть записана как

$$H_{c2} = \sqrt{2}\kappa H_c \quad (47.2)$$

(А. А. Абрикосов, 1952).

Решение уравнения (47.1) с граничным условием $\psi = 0$, поставленным на бесконечности, отвечает образованию зародыша s -фазы в толще образца, вдали от его поверхности. Покажем, что наличие поверхности способствует образованию зародыша, в результате чего они могут возникать в тонком поверхностном слое уже при $\mathfrak{H} > H_{c2}$ (D. Saint-James, P. G. De Gennes, 1963).

Решение уравнения (47.1), описывающее зародыш s -фазы вблизи поверхности тела (которую считаем плоской), должно удовлетворять на ней граничному условию $\partial\psi/\partial x = 0$, где x — координата в направлении нормали к поверхности (условие (45.15) при $A_x = 0$). Для установления нужной квантовомеханической аналогии вспомним, что использованная выше задача о движении частиц в однородном магнитном поле, в свою очередь, эквивалентна задаче о движении в одномерной параболической потенциальной яме

$$U = \frac{2m}{2}\omega_H^2(x - x_0)^2,$$

где x_0 — постоянная, отвечающая «центру орбиты» (см. III, § 112). Рассмотрим теперь двойную яму, составленную из двух одинаковых параболических ям, расположенных симметрично относительно плоскости $x = 0$ (рис. 8). Основному состоянию частицы в таком поле отвечает волновая функция $\psi(x)$, не имеющая нулей и четная по x ; такая функция автоматически удовлетворяет условию $\psi' = 0$ при $x = 0$. В то же время основной уровень частицы в двойной яме лежит ниже уровня в одиночной яме¹⁾;

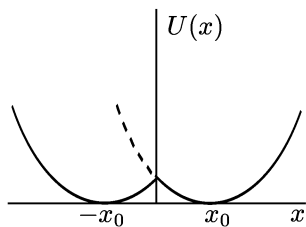


Рис. 8.

¹⁾ Это связано с понижением потенциальной энергии в полупространстве $x < 0$ по сравнению с той, которая была бы при одиночной яме (штриховая линия на рис. 8). См., например, III, § 50, задача 3.

в переносе на задачу о зародышах этим доказывается сделанное выше утверждение об облегчении их образования вблизи поверхности.

Численный расчет уровня в двойной яме приводит к результату, что его минимальное (в зависимости от параметра x_0) значение составляет $0,59E_0$. Повторив рассуждения, приводящие к формуле (47.2), найдем, что верхний предел полей, в которых возникают поверхностные зародыши s -фазы, лежит при $H_{c3} = H_{c2}/0,59$, т. е.

$$H_{c3} = 1,7H_{c2} = 2,4\kappa H_c. \quad (47.3)$$

Таким образом, в области полей между H_{c2} и H_{c3} возникает явление поверхностной сверхпроводимости; граница этой области показана на рис. 7 штриховой линией. Толщина сверхпроводящего слоя у поверхности нормальной фазы — порядка величины $\xi(T)$. Эту оценку легко получить из той же квантовомеханической аналогии: волновая функция частицы в потенциальной яме (на уровне E_0) сосредоточена в области $x \sim \hbar/\sqrt{mE_0}$; соответствующий размер зародыша получается заменой E_0 на $|a|$ и (согласно (45.17)) совпадает с $\xi(T)$.

Все сказанное выше относится к сверхпроводникам второго рода. Но введенные таким образом критические поля H_{c2} и H_{c3} могут иметь определенный физический смысл и для сверхпроводников первого рода.

Если κ лежит в интервале $1/\sqrt{2} = 0,71 > \kappa > 0,59/\sqrt{2} = 0,42$, то $H_{c2} < H_c$, но $H_{c3} > H_c$. Хотя смешанная фаза в этом случае не возникает, но в интервале полей между H_c и H_{c3} существует поверхностная сверхпроводимость.

Наконец, по смыслу произведенного вывода, значение H_{c2} (47.2) определяет (при любом κ) верхнюю границу полей, в которых возможно образование зародышей s -фазы со сколь угодно малыми ψ . Поэтому в сверхпроводнике первого рода (где $H_{c2} < H_c$) в полях $\mathfrak{H} < H_{c2}$ термодинамически невыгодная нормальная фаза абсолютно неустойчива. В интервале же $H_{2c} < \mathfrak{H} < H_c$ нормальная фаза может существовать как метастабильная: фазовый переход первого рода из n - в s -фазу в этой области может произойти только путем возникновения зародышей s -фазы с конечными значениями ψ , затрудненного положительным поверхностным натяжением на их границе (В. Л. Гинзбург, 1956).

Задача

Определить критическое поле для сверхпроводящего шарика малого радиуса $R \ll \delta$ (В. Л. Гинзбург, 1958).

Решение. В этом случае (как и в тонкой пленке — см. задачу в § 45) разрушение сверхпроводимости происходит путем фазового перехода второго

рода. Критическое поле для шарика можно найти как значение, ниже которого n -фаза теряет устойчивость по отношению к образованию зародышей s -фазы. Как и в тексте, это сводится к нахождению наименьшего собственного значения уравнения Шредингера (47.1). При условии $R \ll \delta$ последнее можно искать с помощью теории возмущений по отношению к внешнему полю, причем невозмущенная волновая функция $\psi = \text{const}$ (зародыш занимает весь объем шарика). Собственное значение определяется тогда просто как среднее значение оператора возмущения $(2e\mathbf{A}/c)^2/4m$ (среднее же значение от оператора $(ie\hbar/mc)(\mathbf{A}\nabla)$ при $\psi = \text{const}$ равно нулю). При этом векторный потенциал однородного поля должен быть выбран в виде $\mathbf{A} = [\mathfrak{H}\mathbf{r}]/2$; именно при такой калибровке решение $\psi = \text{const}$ удовлетворяет на поверхности шарика граничному условию (45.15), сводящемуся к требованию $\mathbf{nA} = 0$. Произведя усреднение, найдем

$$E_0 = \frac{e^2}{4mc^2} \frac{2}{3} \mathfrak{H}^2 \overline{r^2} = \frac{e^2 \mathfrak{H}^2 R^2}{10mc^2}.$$

Критическое поле определяется (как и в тексте) условием $E_0 = |a|$, приводящим к результату

$$H_c^{(\text{шар})} = \sqrt{20} H_c \delta / R.$$

Допустимость использования теории возмущений подтверждается тем, что найденное значение E_0 (при $\mathfrak{H} = H_c^{(\text{шар})}$) при условии $R \ll \delta$ действительно мало по сравнению со следующим собственным значением, которое соответствовало бы уже переменной в объеме шарика волновой функции и имело бы порядок величины $\hbar^2/mR^2$.

§ 48. Структура смешанного состояния

Будем снова (как и в предыдущем параграфе) рассматривать цилиндрический образец сверхпроводника второго рода, находящийся в продольном магнитном поле $\mathfrak{H}$. Выясним структуру смешанного состояния, в котором тело будет находиться в полях, лишь немногим превышающих нижнее критическое поле H_{c1} ¹⁾.

В этом случае в основную, сверхпроводящую фазу вкраплены зародыши нормальной фазы. Для достижения максимальной термодинамической выгоды они должны иметь (при отрицательном поверхностном натяжении!) по возможности большую поверхность. Естественна поэтому структура, в которой зародыши n -фазы представляют собой нити, параллельные направлению поля. Вблизи этих нитей (их называют *вихревыми*) сосредоточены и проникшее в тело магнитное поле, и охватывающие нити кольцевые сверхпроводящие токи.

Чем ближе внешнее поле к H_{c1} , тем меньше в теле таких нитей и тем больше расстояние между ними. Когда последнее достаточно велико, к отдельным вихревым нитям становятся

¹⁾ Излагаемые в этом параграфе (и в задачах к нему) результаты принадлежат А. А. Абрикосову (1957).

применимыми изложенные в конце § 44 соображения, в силу которых полный сосредоточенный вблизи нити магнитный поток должен быть целым кратным от элементарного кванта потока $\phi_0 = \pi \hbar c / |e|$; мы увидим ниже, что термодинамически выгодны нити с наименьшим возможным потоком — одним ϕ_0 . Именно конечность ϕ_0 ставит предел дальнейшему дроблению зародышей нормальной фазы.

Когда внешнее поле, увеличиваясь от малых значений, достигает значения H_{c1} , в цилиндре появляется одна вихревая нить. Напишем термодинамическое условие, определяющее этот момент, не вникая сначала в структуру самой нити, а учитывая лишь то обстоятельство, что с ней связана некоторая (положительная!) энергия; эту энергию, отнесенную к единице длины нити, обозначим через ε (в дальнейшем она будет вычислена).

Очевидно, что в цилиндрическом теле в продольном внешнем поле индукция $\mathbf{B}$ тоже будет везде направлена вдоль оси цилиндра. Это же относится и к макроскопической напряженности поля $\mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M}$, введенной в § 46. Из уравнения $\text{rot } \mathbf{H} = 0$ следует тогда, что $\mathbf{H}$ постоянно вдоль сечения (а потому и всего объема) цилиндра; в силу граничного условия непрерывности тангенциальной компоненты $\mathbf{H}$ это постоянное значение совпадает с внешним полем: $\mathbf{H} = \mathfrak{H}$. Таким образом, мы должны рассмотреть термодинамическое равновесие тела при заданных его объеме, температуре и напряженности поля $\mathbf{H}$. Условие такого равновесия состоит в минимальности $\tilde{F}$ — термодинамического потенциала по отношению к указанным переменным (см. VIII, § 31). Пусть $\tilde{F}_s$ — этот потенциал для сверхпроводящего цилиндра (поскольку в сверхпроводящей фазе $\mathbf{B} = 0$, то $\tilde{F}_s$ совпадает со свободной энергией F_s). Тогда потенциал $\tilde{F}$ для цилиндра с одной вихревой нитью будет

$$\tilde{F} = \tilde{F}_s + L\varepsilon - \int \frac{\mathbf{H}\mathbf{B}}{4\pi} dV = F_s + L\varepsilon - \frac{\mathfrak{H}}{4\pi} \int B dV.$$

Член $L\varepsilon$ есть свободная энергия нити (L — длина нити, совпадающая с длиной цилиндра), а последний член отличает потенциал $\tilde{F}$ от свободной энергии F . Поскольку индукция $\mathbf{B}$ в теле сосредоточена лишь вблизи вихревой нити, то $\int B dV = L\phi_0$, где ϕ_0 — поток индукции через сечение нити. Таким образом,

$$\tilde{F} = \tilde{F}_s + L\varepsilon - \frac{L\phi_0\mathfrak{H}}{4\pi} \quad (48.1)$$

Возникновение вихревых нитей становится термодинамически выгодным, когда добавка к $\tilde{F}_s$ делается отрицательной. Приравняв

же ее нулю, мы найдем, следовательно, критическое значение внешнего поля

$$H_{c1} = 4\pi\epsilon/\phi_0. \quad (48.2)$$

Рассмотрим теперь структуру одиночной вихревой нити. Мы ограничимся важным случаем, когда¹⁾

$$\kappa \gg 1, \quad (48.3)$$

т. е. $\delta \gg \xi$. Длина ξ определяет порядок величины радиуса «сердцевины» нити, в которой $|\psi|^2$ меняется от нуля (отвечающего нормальному состоянию на оси нити) до конечного значения, отвечающего основной s -фазе; на больших расстояниях r от оси нити $|\psi|^2$ остается уже постоянным²⁾. Индукция же $B(r)$ меняется значительно медленнее, затухая лишь на расстояниях $r \sim \delta \gg \xi$. Другими словами, весь магнитный поток в основном проходит по области вне сердцевины нити, где $|\psi|^2 = \text{const}$ (рис. 9).

Последнее обстоятельство позволяет использовать для нахождения распределения поля уравнение Лондонов (применимость которого, напомним, не связана с близостью температуры к T_c). Для придания ему нужного здесь вида прежде всего перепишем формулу (44.7), связывающую плотность сверхпроводящего тока с фазой волновой функции:

$$\mathbf{A} + \delta^2 \text{rot} \mathbf{B} = \frac{\phi_0}{2\pi} \nabla \Phi, \quad (48.4)$$

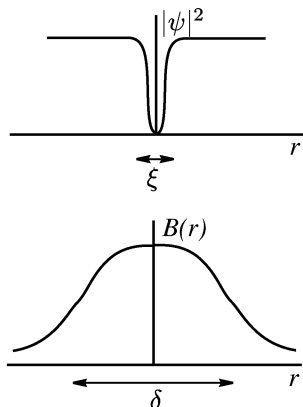


Рис. 9.

введя в нее глубину проникновения δ и выразив $\mathbf{j}$ через индукцию согласно $\mathbf{j} = c \text{rot} \mathbf{B}/4\pi$. Лондоновскому приближению отвечает предположение $\delta = \text{const}$. Проинтегрируем равенство (48.4) по замкнутому контуру C , охватывающему нить и проходящему на расстояниях $r \gg \xi$ от ее оси. Преобразовав интеграл от $\mathbf{A}$ по теореме Стокса в интеграл по поверхности, опирающейся на контур C , получим

$$\oint \mathbf{B} d\mathbf{f} + \delta^2 \oint \text{rot} \mathbf{B} d\mathbf{l} = \phi_0, \quad (48.5)$$

¹⁾ Отметим, что такое условие хорошо выполняется в высокотемпературных сверхпроводниках. В этих анизотропных телах κ зависит от направления и меняется, грубо говоря, в пределах от 50 до 500

²⁾ В этом параграфе буква r будет обозначать цилиндрическую координату — расстояние от оси.

а преобразовав таким же образом и второй интеграл, пишем

$$\int (\mathbf{B} + \delta^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{B}) d\mathbf{f} = \phi_0; \quad (48.6)$$

в правой части написано наименьшее возможное (отличное от нуля) значение, отвечающее приращению фазы всего на одно 2π . Если контур C проходит на расстояниях $r \gg \delta$ от нити, где поле и токи уже можно считать отсутствующими, второй интеграл в (48.5) может быть опущен, и мы видим, что ϕ_0 совпадает с полным потоком индукции, сосредоточенным вокруг изолированной вихревой нити. Самая же ось нити представляет собой особую линию, обход вокруг которой меняет фазу волновой функции.

Поскольку равенство (48.6) должно выполняться для любого контура C (удовлетворяющего указанным условиям), то из него следует, что должно быть

$$\mathbf{B} + \delta^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{B} = \mathbf{B} - \delta^2 \Delta \mathbf{B} = \phi_0 \delta(\mathbf{r}), \quad (48.7)$$

где $\mathbf{r}$ — двумерный радиус-вектор в плоскости поперечного сечения вихревой нити. Запись правой части этого уравнения в виде δ -функции означает, что расстояния $\sim \xi$ рассматриваются здесь как нулевые. Во всем пространстве, за исключением линии $\mathbf{r} = 0$, (48.7) совпадает с уравнением Лондонов (44.11), но для описания вихревой нити требуется решение с особенностью при $r = 0$.

Распределение поля на расстояниях r от оси в области $\delta \gg r \gg \xi$ может быть найдено прямо из (48.5). Выберем в качестве контура C окружность радиуса $\mathbf{r}$ в этой области. Поток индукции через этот контур (первый член в левой части (48.5)) составляет лишь малую долю всего магнитного потока $\sim (r/\delta)^2$; пренебрежем ею. Во втором члене $d\mathbf{l}$ есть элемент длины окружности, а поскольку вектор $\mathbf{B}$ направлен вдоль оси z (цилиндрической системы координат с осью вдоль оси нити) и зависит лишь от r , то

$$\mathbf{l}[\nabla \mathbf{B}] = [\mathbf{l} \nabla] \mathbf{B} = -\frac{\partial B_z}{\partial r} = -\frac{dB}{dr}$$

($\mathbf{l}$ — единичный вектор касательной к окружности). Таким образом, приходим к уравнению

$$\mathbf{l} \operatorname{rot} \mathbf{B} = -\frac{dB}{dr} = \frac{\phi_0}{2\pi r \delta^2}, \quad (48.8)$$

откуда

$$\mathbf{B}(r) = \frac{\phi_0}{2\pi \delta^2} \ln \frac{\delta}{r}, \quad \xi \ll r \ll \delta. \quad (48.9)$$

Ввиду логарифмического характера этой зависимости верхний предел интегрирования (на котором должно быть $B \approx 0$) может

быть положен совпадающим с верхней границей рассматриваемой области расстояний r .

Для продолжения найденного распределения в область $r \gtrsim \delta$ воспользуемся уравнением (48.7), применимым при всех $r \gg \xi$. Раскрыв оператор Лапласа в цилиндрических координатах (с учетом того, что $B = B_z(r)$), перепишем уравнение (при $r \neq 0$) в виде

$$B'' + \frac{1}{r}B' + \delta^{-2}B = 0.$$

Решение этого уравнения, убывающее при $r \rightarrow \infty$, есть

$$B(r) = \text{const} \cdot K_0(r/\delta),$$

где K_0 — функция Макдональда (функция Ганкеля от мнимого аргумента). Постоянный коэффициент определяется путем «сшивки» с решением (48.9): используя известное предельное выражение $K_0(z) \approx \ln(2/z\gamma)$ при $z \ll 1$ ($\gamma = e^C = 1,78$). Таким образом, окончательно

$$B(r) = \frac{\phi_0}{2\pi\delta^2} K_0\left(\frac{r}{\delta}\right), \quad r \gg \xi. \quad (48.10)$$

С помощью известного асимптотического выражения $K_0(z) \approx (\pi/2z)^{1/2}e^{-z}$ при $z \rightarrow \infty$ находим отсюда, в частности, закон затухания поля вдали от оси нити:

$$B(r) = \frac{\phi_0}{(8\pi r\delta^3)^{1/2}} e^{-r/\delta}. \quad (48.11)$$

Обратим внимание на очевидную аналогию между свойствами вихревых нитей в сверхпроводниках и в жидком гелии (§ 29). В обоих случаях речь идет об особых линиях, обход вокруг которых меняет фазу конденсатной волновой функции. Круговым траекториям сверхтекучего движения вокруг вихревых нитей в жидком гелии соответствуют круговые токи в сверхпроводнике; в первом случае по закону $1/r$ убывает скорость сверхтекучего движения v_s , а во втором — по такому же закону убывает плотность сверхпроводящего тока

$$j = \frac{c}{4\pi} |\text{rot} \mathbf{B}| = \frac{c\phi_0}{8\pi^2\delta^2 r}. \quad (48.12)$$

Это совпадение вполне естественно, поскольку в обоих случаях эти законы являются прямым следствием существования особой линии. Но в то время как в жидком гелии указанная зависимость $v_s(r)$ простирается до любых расстояний, в сверхпроводнике убывание $j(r)$ при $r \gg \delta$ становится экспоненциальным. Это различие связано с заряженностью электронной жидкости: движение заряженных частиц создает магнитное поле, которое,

в свою очередь, экранирует поле (если устремить заряд частиц e к нулю, то глубина проникновения $\delta \rightarrow \infty$).

Теперь можно вычислить свободную энергию вихревой нити. Вклад в нее, происходящий от области пространства вне сердцевинки ($r \gg \xi$), дается взятыми по этой области интегралами

$$\mathbf{F}_{\text{нити}} = \frac{1}{8\pi} \int \mathbf{B}^2 dV + \frac{\delta^2}{8\pi} \int (\text{rot } \mathbf{B})^2 dV. \quad (48.13)$$

Действительно, варьируя это выражение по $\mathbf{B}$ (при заданной температуре, т. е. заданном δ), мы прямо получим уравнение Лондонов (48.7) (для $r \neq 0$)¹⁾. Второй интеграл в (48.13), логарифмически расходящийся на обоих краях области $\delta \gg r \gg \xi$, велик по сравнению с первым. Подставив сюда $|\text{rot } \mathbf{B}|$ из (48.8), получим для энергии на единице длины нити

$$\varepsilon = \left(\frac{\phi_0}{4\pi\delta} \right)^2 \ln \frac{\delta}{\xi}. \quad (48.14)$$

Это выражение имеет логарифмическую точность, т. е. предполагается не только $\delta/\xi \gg 1$, но и $\ln(\delta/\xi) \gg 1$; именно с этой точностью можно пренебречь вкладом в ε от сердцевинки нити.

Результат (48.14) дает, в частности, возможность обосновать сделанное выше утверждение о том, что термодинамически выгодно возникновение вихревых нитей с наименьшим по величине магнитным потоком. Действительно, поскольку свободная энергия нити пропорциональна квадрату связанного с нитью магнитного потока, то для нити с потоком $n\phi_0$ в энергии появился бы множитель n^2 ; распадение же такой нити на n нитей с потоками ϕ_0 приведет к выигрышу в энергии в n раз.

Подставив (48.14) в (48.2), найдем для нижнего критического поля

$$H_{c1} = \frac{\phi_0}{4\pi\delta^2} \ln \frac{\delta}{\xi} \quad (48.15)$$

¹⁾ Второй член в (48.13), будучи выражен через ток $\mathbf{j}$, принимает вид

$$2\pi c^2 \delta^2 \int \mathbf{j}^2 dV = \int \frac{\rho_s \mathbf{v}_s^2}{2} dV;$$

во втором выражении подставлено также $\delta^2 = \frac{mc^2}{4\pi e^2 n_s}$ и введена плотность и скорость сверхтекучей компоненты согласно $\mathbf{j} = e\rho_s \mathbf{v}_s/m$ (см. примечание на с. 227). Мы видим, что этот член можно рассматривать как кинетическую энергию сверхпроводящих электронов.

При $T \rightarrow T_c$ это выражение можно переписать с учетом (45.19) также и в виде¹⁾

$$H_{c1} = H_c \frac{\ln \kappa}{\sqrt{2}\kappa}. \quad (48.16)$$

По мере увеличения внешнего поля растет число вихревых нитей и тем самым увеличивается проникновение магнитного поля в сверхпроводник. При учете взаимодействия между нитями термодинамическому равновесию отвечает определенное упорядоченное расположение нитей, образующее двумерную решетку (в плоскости сечения цилиндра)²⁾. При любой плотности числа нитей ось каждой из них остается линией, обход вокруг которой меняет фазу волновой функции ψ на 2π . Среднее же (по сечению цилиндра) значение индукции

$$\bar{B} = \nu \phi_0, \quad (48.17)$$

где ν — число нитей на единицу площади сечения. Действительно, если проинтегрировать соотношение (48.4) по контуру всего сечения образца, то мы придем к уравнению (48.5) с $S\nu\phi_0$ в правой части (S — площадь сечения); в левой же части первый интеграл есть полный поток индукции $S\bar{B}$, а второй представляет собой краевой эффект, малый по сравнению с первым в отношении $\sim \delta/R$ и потому пренебрежимый (R — линейные размеры сечения); здесь существенно, конечно, что поле вокруг нитей затухает на расстояниях $\sim \delta$.

До тех пор пока расстояния d между нитями остаются большими по сравнению с корреляционным радиусом ξ , можно утверждать, что магнитные поля вихревых нитей просто складываются. Действительно, при $d \gg \xi$ все еще можно провести контур, охватывающий собой любое число вихревых нитей таким образом, чтобы он везде проходил далеко (на расстояниях $\gg \xi$) от их сердцевин. На таком контуре выполняется условие лондоновского приближения (постоянство δ), и потому мы снова придем к уравнению, отличающемуся от (48.7) лишь тем, что в его правой части δ -функция заменяется суммой δ -функций от расстояний до каждой из нитей; ввиду линейности этого уравнения отсюда следует сделанное утверждение.

Когда внешнее поле приближается к H_{c2} , расстояния между вихревыми нитями становятся сравнимыми с ξ . Это ясно видно

¹⁾ Поскольку эта функция выведена в предположении $\ln \kappa \gg 1$, ею нельзя пользоваться при $\kappa \sim 1$! В частности, при $\kappa = 1/\sqrt{2}$ поле H_{c1} (как и H_{c2}) должно просто совпадать с H_c .

²⁾ Наиболее выгодна, по-видимому, решетка, образованная равносторонними треугольниками с вихревыми нитями в их вершинах.

и из самого выражения критического поля (47.2), если его написать (с помощью (45.9), (45.16), (45.17)) в виде

$$H_{c2} = \phi_0 / 2\pi \xi^2; \quad (48.18)$$

оно отвечает потоку ϕ_0 , сосредоточенному на площади $\sim \xi^2$.

Исчезновение сверхпроводимости при $\mathfrak{H} = H_{c2}$ происходит как фазовый переход второго рода. В духе общей теории таких переходов можно утверждать, что параметр порядка ψ как функция внешнего поля обращается в нуль по закону $|\psi|^2 \propto H_{c2} - \mathfrak{H}$. С другой стороны, намагниченность вещества $M = (B - H)/4\pi$ (как величина, не зависящая от выбора фазы ψ) в этой области сама пропорциональна $|\psi|^2$. Учитывая, что при $\mathfrak{H} = H_{c2}$ должно быть и $B = H_{c2}$, мы приходим, таким образом, к линейному закону зависимости индукции B в сверхпроводнике от внешнего поля вблизи точки перехода

$$B - H_{c2} \propto \mathfrak{H} - H_{c2}. \quad (48.19)$$

Задачи

1. Вычислить энергию взаимодействия двух вихревых нитей, расположенных на расстоянии $d \gg \xi$ друг от друга.

Решение. Преобразуем выражение свободной энергии (48.13) для системы двух вихревых нитей к виду, в котором интегрирования производятся лишь вблизи каждой отдельной нити. Для этого пишем, используя уравнение (48.7):

$$\mathbf{B}^2 + \delta^2 (\text{rot} \mathbf{B})^2 = \delta^2 \{ -\mathbf{B} \text{ rot rot } \mathbf{B} + (\text{rot } \mathbf{B})^2 \} = \delta^2 \text{div} [\mathbf{B} \text{ rot } \mathbf{B}].$$

Объемный интеграл преобразуется в интеграл

$$F_{\text{нитей}} = \frac{\delta^2}{8\pi} \int_{f_1 + f_2} [\mathbf{B} \text{ rot } \mathbf{B}] d\mathbf{f}, \quad (1)$$

взятый по цилиндрическим поверхностям f_1 и f_2 (малого радиуса r_0 ; $\xi \ll r_0 \ll \delta$), охватывающим сердцевину нитей. При $d \gg \xi$ поля нитей аддитивны, т. е. $\mathbf{B} = \mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_2$. Энергия взаимодействия нитей дается той частью интеграла (1), которая зависит одновременно от $\mathbf{B}_1$ и $\mathbf{B}_2$:

$$L\varepsilon_{12} = \frac{\delta^2}{8\pi} \left\{ \int [\mathbf{B}_2 \text{ rot } \mathbf{B}_1] d\mathbf{f}_1 + \int [\mathbf{B}_1 \text{ rot } \mathbf{B}_2] d\mathbf{f}_2 \right\}$$

(интегралы же вида $\int [\mathbf{B}_2 \text{ rot } \mathbf{B}_1] d\mathbf{f}_2$ стремятся к нулю при $r_0 \rightarrow 0$). С помощью (48.8) и (48.10) находим отсюда

$$\varepsilon_{12} = 2 \frac{\delta^2}{8\pi} 2\pi r_0 \frac{\phi_0}{2\pi r_0 \delta^2} B(d) = \frac{\phi_0^2}{8\pi^2 \delta^2} K_0 \left(\frac{d}{\delta} \right).$$

В частности, на расстояниях $d \gg \delta$:

$$\varepsilon_{12} = \frac{\phi_0^2}{27/2\pi^{3/2}\delta^2} \left(\frac{\delta}{d}\right)^{1/2} e^{-d/\delta}. \quad (2)$$

2. Определить зависимость средней (по сечению цилиндрического образца) магнитной индукции $\bar{B}$ от внешнего поля $\mathfrak{H}$ в смешанном состоянии, в котором вихревые нити расположены на расстояниях $d \gg \delta$ друг от друга, образуя (в сечении образца) решетку из равносторонних треугольников.

Решение. Площадь равностороннего треугольника равна $\sqrt{3}d^2/4$ (d — длина стороны), а число нитей равно половине числа треугольников в решетке (N треугольников имеют $3N$ вершин, но в решетке каждая вершина принадлежит шести соприкасающимся треугольникам), поэтому $\nu = 2/\sqrt{3}d^2$.

Термодинамический потенциал $\tilde{f}$ единицы объема тела в смешанном состоянии

$$\tilde{f} = \tilde{f}_s - \frac{\phi_0}{4\pi} \nu (-H_{c1} + \mathfrak{H}) + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \varepsilon_{ik},$$

где второй член отвечает выражению (48.1) (с H_{c1} из (48.2); в третьем члене ε_{12} — энергия взаимодействия двух нитей, а суммирование производится по всем нитям, пересекающим единицу площади. Ввиду экспоненциального убывания ε_{12} при $d \gg \delta$, в сумме достаточно учесть лишь пары соседних нитей. В треугольной решетке каждая нить имеет 6 ближайших соседей, поэтому

$$\frac{1}{2} \sum_{i,k} \varepsilon_{ik} = \frac{6}{2} \sum_i \varepsilon_{i1} = 3\nu \varepsilon_{12}(d).$$

Подставив ε_{12} из формулы (2) предыдущей задачи, находим

$$\tilde{f} = \tilde{f}_s + \frac{\phi_0}{2\sqrt{3}\pi\delta^2} \left[-\frac{\mathfrak{H} - H_{c1}}{a^2} + \frac{3\phi_0}{2\sqrt{2\pi}\delta^2} \frac{e^{-a}}{a^{5/2}} \right],$$

где $a = d/\delta$. Зависимость a от $\mathfrak{H}$ определяется условием минимальности функции $\tilde{f}(a)$; это дает

$$\mathfrak{H} - H_{c1} = \frac{3\phi_0}{4\sqrt{2\pi}\delta^2} \sqrt{ae^{-a}} \quad (3)$$

(опущен член более высокого порядка по $1/a \ll 1$). Это уравнение вместе с равенством $\bar{B} = \nu\phi_0$, т. е.

$$a = (2\phi_0/\sqrt{3}\delta^2\bar{B})^{1/2},$$

определяет искомую зависимость $\bar{B}(\mathfrak{H})$. Отметим, что при $\mathfrak{H} \rightarrow H_{c1}$ производная $d\bar{B}/d\mathfrak{H}$ стремиться к бесконечности по закону

$$\frac{d\bar{B}}{d\mathfrak{H}} \propto \frac{1}{\mathfrak{H} - H_{c1}} \ln^{-3} \frac{1}{\mathfrak{H} - H_{c1}}.$$

§ 49. Диамагнитная восприимчивость выше точки перехода

В конце § 45 уже было отмечено, что область температур вблизи T_c , в которой флуктуации параметра порядка ψ становятся большими, в сверхпроводнике чрезвычайно узка. Вне этой области флуктуационные поправки к термодинамическим величинам, вообще говоря, очень малы. Они могут, однако, оказаться существенными для магнитной восприимчивости металла выше точки перехода: появление вследствие флуктуаций даже относительно малого числа сверхпроводящих электронов может привести к вкладу в магнитную восприимчивость, превышающему обычно очень малую восприимчивость нормального металла вдали от точки перехода¹⁾.

Рассмотрим металл в слабом ($\mathcal{H} \ll H_c$ внешнем магнитном поле при температуре выше точки T_c , но близкой к ней. Равновесное значение параметра порядка здесь $\psi = 0$, а для вычисления его флуктуаций можно использовать свободную энергию из теории Гинзбурга–Ландау. При этом в выражении (45.10) можно, в виду малости флуктуаций, сохранить только квадратичные по ψ члены, опустив член с $|\psi|^4$ и понимая под $\mathbf{A}$ векторный потенциал однородного поля $\mathcal{H}$. Флуктуации индукции $\mathbf{B}$, связанные с флуктуациями ψ , квадратичны по ψ (ввиду квадратичности плотности тока $\mathbf{j}$). Поэтому в члене $\mathbf{B}^2/8\pi$ можно понимать под $\mathbf{B}$ среднее (термодинамическое) значение индукции, пренебрегая ее флуктуациями. Таким образом, изменение полной свободной энергии металла при флуктуации дается следующим выражением — функционалом от ψ^2):

$$\Delta F[\psi] = \int \left\{ \frac{1}{4m} \left| \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 + a|\psi|^2 \right\} dV. \quad (49.1)$$

Для вычисления флуктуационного вклада ΔF в свободную энергию надо рассматривать функционал (49.1) как «эффективный гамильтониан», определяющий ΔF согласно формуле

$$\exp \left(-\frac{\Delta F}{T} \right) = \int \exp \left(-\frac{\Delta F[\psi]}{T} \right) D\psi, \quad (49.2)$$

где интегрирование (функциональное) производится по всем распределениям $\psi(\mathbf{r})$ (см. V, § 147). Фактически оно осуществляется

¹⁾ Этот эффект был указан В. В. Шмидтом (1966).

²⁾ Во избежание недоразумений подчеркнем, что магнитное поле не является по отношению к сверхпроводнику «внешним полем» $\hbar$ в том смысле, как оно было введено в V, § 144. Последнее должно было бы входить в свободную энергию в виде члена $-\hbar(\psi + \psi^*)$, что в данном случае заведомо невозможно ввиду неинвариантности такого члена по отношению к выбору фазы ψ .

путем разложения ψ по некоторой полной системе собственных функций и интегрированием по бесконечному множеству коэффициентов этого разложения. В случае однородной (без внешнего поля) системы разложение производится просто по плоским волнам (см., например, задачу в V, § 147).

В данном же случае разложение следует производить по собственным функциям «уравнения Шредингера»

$$\frac{1}{4m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \psi = E\psi, \quad (49.3)$$

отвечающего гамильтониану (49.1). В § 47 уже было отмечено, что это уравнение формально совпадает с уравнением Шредингера для движения частицы (с массой $2m$ и зарядом $2e$) в однородном магнитном поле. Его собственные функции нумеруются одним дискретным (n) и двумя непрерывными (p_x, p_z) квантовыми числами, причем собственные значения зависят только от n и p_z (ось z в направлении $\mathfrak{H}$) и даются формулой

$$E \left(n + \frac{1}{2}, p_z \right) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{|e|\hbar}{mc} \mathfrak{H} + \frac{p_z^2}{4m}; \quad (49.4)$$

число различных собственных функций с заданным n , значением p_z в интервале dp_z и всеми возможными p_x есть

$$V \frac{2|e|\mathfrak{H}}{(2\pi\hbar)^2 c} dp_z$$

(см. III, § 112).

Обозначим для краткости, совокупность чисел n, p_z, p_x одним символом q и напишем разложение функции $\psi(\mathbf{r})$ в виде

$$\psi = \sum_q c_q \psi_q(\mathbf{r}), \quad (49.5)$$

где $c_q = c'_q + ic''_q$ — произвольные комплексные коэффициенты, а собственные функции предполагаются нормированными условием $\int |\psi_q|^2 dV = 1$ (интегрирование производится по объему металла).

Подстановка разложения (49.5) в (49.1) позволяет прежде всего перейти от интегрирования по объему к суммированию по q . Действительно, проинтегрировав первый член по частям, приводим (49.1) к виду

$$\Delta F[\psi] = \int \left\{ \psi^* \frac{1}{4m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \psi + \psi^* a \psi \right\} dV.$$

Подставив сюда (49.5) и учтя, что каждая из функций ψ_q удовлетворяет уравнению (49.3) с $E = E_q$ и что собственные функции

с различными q взаимно ортогональны, получим

$$\Delta F[\psi] = \sum_q |c_q|^2 (E_q + a). \quad (49.6)$$

Функциональное интегрирование в (49.2) означает интегрирование по всем $dc'_q dc''_q$. После подстановки (49.6) интегрирования по всем этим переменным разделяются и дают

$$\exp\left(-\frac{\Delta F}{T}\right) = \prod_q \frac{\pi T}{E_q + a},$$

или

$$\Delta F = -T \sum_q \ln \frac{\pi T}{E_q + a}. \quad (49.7)$$

В терминах квантовых чисел n и p_z это выражение записывается как

$$\Delta F = -V \frac{2|e|T\hbar}{(2\pi\hbar)^2 c} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \ln \frac{\pi T}{E(p_z, n+1/2) + a} dp_z. \quad (49.8)$$

Эта сумма расходится при больших E , но расходимость в действительности фиктивна и связана лишь с тем, что исходная формула (49.1) применима только при медленно меняющихся функциях $\psi(\mathbf{r})$: изменение ψ должно быть мало на расстояниях $\sim \xi_0$. В терминах собственных значений E_q это значит, что допустимы лишь $E_q \ll \hbar^2/m\xi_0^2$. Обрезав сумму по n при некотором большом N , удовлетворяющем поставленному условию, воспользуемся формулой Пуассона

$$\sum_{n=0}^N f\left(n + \frac{1}{2}\right) \approx \int_0^N f(x) dx - \frac{1}{24} f'(x) \Big|_0^N$$

(см. V, (59.10)). В применении к (49.8) первый, интегральный, член этой формулы дает, как легко понять, не зависящий от $\hbar$ вклад в свободную энергию; этот член не нужен для вычисления магнитной восприимчивости, и мы его опустим. Во втором же члене можно положить теперь $N \rightarrow \infty$ (так что параметр обрезания выпадает из ответа)¹⁾:

$$\Delta F = V \frac{e^2 T_c \hbar^2}{48\pi^2 \hbar m c^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_z}{a + p_z^2/4m}.$$

¹⁾ В коэффициенте положено $T \approx T_c$. При T вблизи T_c существенные в этом интеграле значения $p_z \sim \sqrt{ma} \sim \hbar/\xi(T) \ll \hbar/\xi_0$, т. е. удовлетворяют поставленному требованию.

Окончательно, после взятия интеграла,

$$\Delta F = V \frac{e^2 T_c \hbar^2}{24\pi \hbar c^2 \sqrt{ma}}. \quad (49.9)$$

Отсюда магнитная восприимчивость

$$\chi = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 \Delta F}{\partial \hbar^2} = -\frac{e^2 T_c}{12\pi \hbar c^2 (m\alpha)^{1/2} (T - T_c)^{1/2}} \quad (49.10)$$

(*H. Schmidt*, 1968; *A. Schmid*, 1969). Мы видим, что вблизи точки перехода восприимчивость возрастает как $(T - T_c)^{-1/2}$. В этой области (49.10) представляет собой основной вклад в магнитную восприимчивость нормального металла.

Задачи

1. Определить магнитный момент тонкой (толщина $d \ll \xi(T)$) пленки в перпендикулярном ее плоскости магнитном поле при температурах $T > T_c$, $T - T_c \ll T_c$.

Решение. Конечность толщины пленки приводит к дискретности квантового числа p_z в (49.4), причем для тонкой пленки надо ограничиться в (49.7) лишь значением $p_z = 0$ (уже первое отличное от нуля значение $p_z \sim \hbar/d$, так что $E \sim \hbar^2/md^2 \gg \hbar^2/m\xi^2 \sim a$). Число собственных функций с заданными n и p_z (и всеми возможными p_x) есть $2 |e| \hbar S / (2\pi \hbar c)$, где S — площадь пленки; поэтому суммирование по q в (49.7) надо понимать как $\sum_n (\hbar S / \pi \hbar c)$.

Применив к сумме формулу Пуассона, получим в результате

$$\Delta F = S \frac{e^2 T_c \hbar^2}{24\pi m c^2 a}.$$

Магнитный момент пленки

$$M = -\frac{\partial \Delta F}{\partial \hbar} = -S \frac{e^2 T_c \hbar}{12\pi m c^2 \alpha (T - T_c)}.$$

Обратим внимание на то, что он возрастает при $T \rightarrow T_c$ быстрее, чем в случае неограниченного металла.

2. То же для шарика радиуса $R \ll \xi(T)$ (*В. В. Шмидт*, 1966).

Решение. В этом случае из всех собственных значений уравнения (49.3) существенно лишь одно, наименьшее, отвечающее собственной функции $\psi = \text{const}$ и равное $E_0 = \frac{e^2 R^2 \hbar^2}{10mc^2}$ (см. все сказанное по этому поводу в задаче к § 47). Сумма (49.7) сводится к одному члену, и магнитный момент

$$M \approx -\frac{T_c}{a} \frac{\partial E_0}{\partial \hbar} = \frac{e^2 T_c R^2 \hbar}{5mc^2 \alpha (T - T_c)}.$$

§ 50. Эффект Джозефсона

Рассмотрим два сверхпроводника, разделенных тонким слоем диэлектрика. Для электронов этот слой представляет собой потенциальный барьер, и если слой достаточно тонок, то существует конечная вероятность их проникновения через него путем квантового туннелирования. Даже если коэффициент пропускания барьера мал, его отличие от нуля имеет принципиальное значение: оба сверхпроводника становятся единой системой, описываемой единой конденсатной волновой функцией. Это обстоятельство приводит к эффектам, впервые предсказанным Джозефсоном (*B. D. Josephson*, 1962).

Единство конденсатной волновой функции системы означает, что через контакт между двумя сверхпроводниками может течь, в отсутствие приложенной извне разности потенциалов, сверхпроводящий ток. Подобно тому как внутри сверхпроводников плотность тока определяется градиентом фазы Φ конденсатной волновой функции, так плотность j протекающего через контакт сверхпроводящего тока связана с разностью значений Φ_2 и Φ_1 фазы на обеих сторонах контакта¹⁾. Поскольку значения разности $\Phi_2 - \Phi_1$, отличающиеся на целое кратное от 2π , физически тождественны, то ясно, что функция

$$j = j(\Phi_{21}), \quad \Phi_{21} = \Phi_2 - \Phi_1 \quad (50.1)$$

должна быть периодической с периодом 2π . Операция обращения времени меняет знак тока j и в то же время меняет знак фазы Φ_{21} (поскольку волновые функции заменяются своими комплексно-сопряженными). Это значит, что функция (50.1) должна быть нечетной и обращаться в нуль при $\Phi_{21} = 0$. Будучи, разумеется, ограниченной, функция $j(\Phi_{21})$ имеет свои максимальное и минимальное значения, между которыми она и меняется при изменении разности фаз, а в силу нечетности функции эти значения одинаковы по абсолютной величине; обозначим их через $\pm j_m$.

Следует отметить, что запись (50.1) предполагает пренебрежение влиянием на ток со стороны собственного магнитного поля токов внутри контакта. В противном случае вместо разности Φ_{21} должно было бы фигурировать калибровочно инвариантное

¹⁾ Для того чтобы сверхпроводящий ток через контакт имел заметную величину, толщина диэлектрического слоя фактически должна быть очень мала: $\sim 10^{-7}$ см. Такие расстояния малы даже по сравнению с наименьшим характерным параметром длины в сверхпроводнике — длиной когерентности ξ_0 . В этом смысле слой должен рассматриваться как бесконечно тонкий, а поведение фазы внутри него в теории вообще не фигурирует.

выражение ¹⁾

$$\Phi_2 - \Phi_1 - \frac{2e}{\hbar c} \int_1^2 A_x dx.$$

Ввиду очень малой толщины диэлектрического слоя условие допустимости пренебрежения стоящим здесь интегралом от непрерывной функции $A_x(x)$ легко выполняется (а значения самого потенциала A_x на обеих сторонах можно считать одинаковыми).

Определение вида функции $j(\Phi_{21})$ во всей области температур возможно лишь на основе микроскопической теории. Мы ограничимся здесь феноменологическим рассмотрением в рамках применимости теории Гинзбурга–Ландау.

Если бы контакт был совсем непроницаем для электронов, волновые функции ψ каждого из сверхпроводников удовлетворяли бы на своем краю контакта граничным условиям (45.15):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_1}{\partial x} - \frac{2ie}{\hbar c} A_x \psi_1 &= 0, \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial x} - \frac{2ie}{\hbar c} A_x \psi_2 &= 0. \end{aligned}$$

Конечная проницаемость барьера и конечность значений ψ на границах контакта приводят к появлению в правых сторонах этих условий отличных от нуля выражений, зависящих от значений ψ по другую сторону контакта. Ввиду малости ψ (вблизи точки перехода T_c) можно ограничиться в этих функциях линейными по ψ членами, т. е. написать

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial x} - \frac{2ie}{\hbar c} A_x \psi_1 = -\frac{\psi_2}{\lambda}, \quad \frac{\partial \psi_2}{\partial x} - \frac{2ie}{\hbar c} A_x \psi_2 = \frac{\psi_1}{\lambda}; \quad (50.2)$$

коэффициент $1/\lambda$ пропорционален проницаемости барьера. Равенства (50.2) должны удовлетворять требованиям симметрии относительно обращения времени: они должны оставаться справедливыми при преобразовании $\psi \rightarrow \psi^*$; $\mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$; отсюда следует, что постоянная λ вещественна (тогда при указанном преобразовании равенства (50.2) просто совпадают со своими комплексно-сопряженными).

Связь между величиной сверхпроводящего тока через контакт и разностью фаз функции ψ можно определить, применив формулу (45.14) к какой-либо из сторон контакта (скажем, со стороны 1):

$$j = -\frac{ie\hbar}{2m} \left(\psi_1^* \frac{\partial \psi_1}{\partial x} - \psi_1 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial x} \right) - \frac{2e^2}{mc} A_x \psi_1^* \psi_1.$$

¹⁾ Направление оси x выбрано в глубь области 2.

Подставив сюда $\partial\psi_1/\partial x$ из граничного условия (50.2), получим

$$j = \frac{ie\hbar}{2m\lambda}(\psi_1^*\psi_2 - \psi_1\psi_2^*).$$

Для контактов одинаковых металлов величины ψ_1 и ψ_2 отличаются только своей фазой; находим тогда для плотности тока:

$$j = j_m \sin \Phi_{21}, \quad j_m = \frac{e\hbar}{m\lambda}|\psi|^2. \quad (50.3)$$

При приближении к точке перехода $|\psi|^2$ стремится к нулю как $T_c - T$; по такому же закону, следовательно, стремится к нулю и максимальная плотность тока через контакт¹⁾.

Пусть теперь к туннельному контакту приложена от внешнего источника некоторая разность потенциалов, т. е. в контакте имеется электрическое поле $\mathbf{E}$. Будем описывать это поле скалярным потенциалом, обозначив его здесь через V : $\mathbf{E} = -\nabla V$. Влияние этого поля на сверхпроводящий ток через контакт можно выяснить уже на основании требований калибровочной инвариантности.

В отсутствие поля (при $V = 0$) фаза волновой функции не зависит от времени: $\partial\Phi/\partial t = 0$ ²⁾. Для обобщения этого равенства на случай наличия электрического поля замечаем, что общее соотношение должно быть инвариантно по отношению к калибровочному преобразованию скалярного потенциала

$$V \rightarrow V - \frac{1}{c} \frac{\partial\chi(t)}{\partial t}, \quad (50.4)$$

не затрагивающему векторный потенциал (который предполагается не зависящим от времени). Точно так, как это было сделано при выводе преобразования (44.3), (44.6), найдем, что одновременно с V должна быть преобразована фаза волновой функции согласно

$$\Phi \rightarrow \Phi + \frac{2e}{\hbar c} \chi(t). \quad (50.5)$$

¹⁾ Микроскопическая теория, основанная на модели БКШ, показывает, что такая же связь (50.3) между j и Φ_{21} имеет место при всех температурах. Эта же теория позволяет связать j_m с электрическим сопротивлением контакта между двумя металлами в нормальном состоянии. Изложение этой теории можно найти в книге: *И. О. Кулик, И. К. Янсон. Эффект Джозефсона в сверхпроводящих туннельных структурах.* — М.: «Наука», 1970.

²⁾ Напомним (ср. примечание на с. 159), что временной множитель $\exp(-2i\mu t/\hbar)$ исключен из волновой функции тем, что гамильтониан системы $\hat{H}$ заменен на $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$.

Отсюда ясно, что калибровочно инвариантным будет соотношение

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{2e}{\hbar} V = 0, \quad (50.6)$$

переходящее в $\partial \Phi / \partial t = 0$ при $V = 0$.

При не зависящем от времени электрическом поле интегрирование равенства (50.6) дает

$$\Phi = \Phi^{(0)} - \frac{2e}{\hbar} V t,$$

где $\Phi^{(0)}$ не зависит от времени. Поэтому, если контакту приложена постоянная электрическая разность потенциалов V_{21} , то разность фаз на нем

$$\Phi_{21} = \Phi_{21}^{(0)} - \frac{2e}{\hbar} V_{21} t.$$

Подставив это выражение в (50.3), находим сверхпроводящий ток через контакт

$$j = j_m \sin \left(\Phi_{21}^{(0)} - \frac{2e}{\hbar} V_{21} t \right). \quad (50.7)$$

Мы приходим к замечательному результату: наложение на туннельный контакт постоянной разности потенциалов приводит к появлению сверхпроводящего переменного тока с частотой

$$\omega_j = \frac{2}{\hbar} |e V_{21}|. \quad (50.8)$$

Потребляемая в контакте мощность дается произведением $j V_{21}$; ее среднее (по времени) значение равно нулю, т. е. систематическая затрата энергии от внешнего источника отсутствует — как и должно быть для сверхпроводящего тока, не связанного с диссипацией энергии. Подчеркнем, однако, что при наличии внешней электродвижущей силы через контакт будет протекать также и некоторый нормальный ток (слабый при малом V_{21}), сопровождающийся диссипацией.

Заключение о периодическом с частотой (50.8) изменении сверхпроводящего тока через контакт следует уже из самого факта периодической зависимости j от Φ_{21} и линейной зависимости Φ_{21} от времени; это заключение не связано с какими-либо предположениями о величине разности потенциалов. Конкретная же формула (50.7) справедлива лишь при условии малости частоты ω_j по сравнению с характерной для сверхпроводимости частотой $\Delta / \hbar$:

$$\hbar \omega_j = 2|eV| \ll \Delta(T). \quad (50.9)$$

Задача

Написать уравнение для тока в цепи, состоящей из последовательно соединенных сопротивления R и сверхпроводника с туннельным контактом; в цепи действует электродвижущая сила V_0 .

Решение. Полное падение напряжения в цепи $V_0 = RJ + V_{21}$, где J — текущий по цепи ток, а V_{21} — разность потенциалов на контакте¹). Подставив сюда $J = J_m \sin \Phi_{21}$ и V_{21} из (50.6), получим

$$\frac{\hbar}{2|e|} \frac{\partial \Phi_{21}}{\partial t} = V_0 - RJ_m \sin \Phi_{21}.$$

Отметим, что описываемый этим уравнением переменный ток имеет несинусоидальный характер.

§ 51. Связь тока с магнитным полем в сверхпроводнике

В § 44 были получены формулы, определяющие связь между током и магнитным полем в сверхпроводнике в предельном (лондоновском) случае медленного изменения всех величин вдоль объема тела; при этом поле предполагалось слабым — малым по сравнению с его критическим значением. Теперь мы рассмотрим этот вопрос в общем случае произвольно меняющегося в пространстве статического поля, по-прежнему предполагая его слабым. Слова «произвольно меняющееся» означают здесь, что поле может существенно меняться на расстояниях $\sim \xi_0$ (но, конечно, по-прежнему мало меняется на расстояниях порядка величины постоянной решетки; поэтому неоднородность среды — металла — на атомных расстояниях не существенна).

В общем случае связь между током и магнитным полем в пространственно-неограниченной среде изображается интегральной формулой вида

$$j_i(\mathbf{r}) = - \int Q_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') A_k(\mathbf{r}') d^3x', \quad (51.1)$$

где ядро Q_{ik} зависит только от свойств самой среды²). Линейность зависимости (51.1) отвечает предположению о слабости поля.

Как известно, плотность тока может рассматриваться как вариационная производная от энергии системы по векторному потенциалу: изменение функции Гамильтона системы при

¹) Малым (при малом V_0) нормальным током в сверхпроводнике пренебрегаем.

²) Задача о неограниченной среде имеет в данной связи лишь формальный смысл. Ее реальное значение состоит в дальнейшем применении ее результатов к задаче об ограниченной среде — см. следующий параграф.

варьировании $\mathbf{A}$ есть

$$\delta H = -\frac{1}{c} \int \mathbf{j} \delta \mathbf{A} d^3 x$$

(см. III, (115.1)). Поэтому ядро Q_{ik} в (51.1) является второй вариационной производной, а симметрия относительно порядка двукратного дифференцирования (по $A_i(\mathbf{r})$ и $A_k(\mathbf{r}')$) означает, что

$$Q_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = Q_{ik}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (51.2)$$

Разложив $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ в интегралы Фурье, запишем связь (51.1) для фурье-компонент:

$$j_i(\mathbf{k}) = -Q_{ik}(\mathbf{k}) A_k(\mathbf{k}), \quad (51.3)$$

причем в силу (51.2) $Q_{ik}(\mathbf{k}) = Q_{ki}(-\mathbf{k})$.

Некоторые важные свойства функции $Q_{ik}(\mathbf{k})$ следуют уже из требований калибровочной инвариантности. Ток $\mathbf{j}$ не должен меняться при калибровочном преобразовании $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \nabla \chi(\mathbf{r})$ или, для фурье-компонент:

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{k}) + i\mathbf{k}\chi(\mathbf{k}).$$

Это значит, что тензор $Q_{ik}(\mathbf{k})$ должен быть ортогонален волновому вектору

$$Q_{ik}(\mathbf{k}) k_k = 0. \quad (51.4)$$

В частности, в кристалле кубической симметрии тензорная зависимость Q_{ik} сводится к членам вида δ_{ik} и $k_i k_k$; из (51.4) следует тогда, что

$$Q_{ik} = \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) Q(\mathbf{k}), \quad (51.5)$$

где $Q(\mathbf{k})$ — скалярная функция.

Для дальнейшего выберем калибровку потенциала, в которой $\operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$. Для фурье-компонент это значит, что $\mathbf{k} \mathbf{A}(\mathbf{k}) = 0$. Поэтому связь (51.3) между током и потенциалом сведется к равенству

$$\mathbf{j}(\mathbf{k}) = -Q(\mathbf{k}) \mathbf{A}(\mathbf{k}), \quad (51.6)$$

т. е. будет определяться лишь скалярной функцией $Q(\mathbf{k})$.

Лондоновскому случаю отвечает предельное выражение $Q(\mathbf{k})$ при $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Это выражение легко найти, применив к обоим частям уравнения (44.8)

$$\operatorname{rot} \mathbf{j} = -\frac{e^2 n_s}{mc} \operatorname{rot} \mathbf{A}$$

операцию rot и учтя равенство $\text{div} \mathbf{A} = 0$. Заметив, что в силу уравнения непрерывности также и $\text{div} \mathbf{j} = 0$, получим

$$\Delta \mathbf{j} = -\frac{e^2 n_s}{mc} \Delta \mathbf{A}.$$

В неограниченном пространстве для везде конечных функций $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ отсюда следует, что и

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2 n_s}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad (51.7)$$

т. е. значение тока в каждой точке определяется лишь значением потенциала в той же точке. Такое же равенство имеет место между фурье-компонентами $\mathbf{j}(\mathbf{k})$ и $\mathbf{A}(\mathbf{k})$, и сравнение с (51.6) показывает, что $Q(\mathbf{k})$ дается не зависящим от $\mathbf{k}$ выражением¹⁾

$$Q(\mathbf{k}) = \frac{e^2 n_s}{mc} = \frac{c}{4\pi \delta_L^2} \quad \text{при} \quad \mathbf{k} \rightarrow 0. \quad (51.8)$$

Дальнейшее содержание этого параграфа состоит в вычислении $Q(\mathbf{k})$ для модели БКШ, под которой подразумевается, как уже говорилось, изотропный вырожденный ферми-газ со слабым притяжением между частицами (электронами). В то же время предполагается, что эти частицы взаимодействуют с магнитным полем своим зарядом e .

В § 42 были написаны уравнения (42.5) для температурных гриновских функций ферми-газа в отсутствие внешнего поля. Введение магнитного поля осуществляется заменой оператора $\nabla \rightarrow \nabla - ie\mathbf{A}/c$ в гамильтониане $\hat{H}^{(0)}$ (7.7)²⁾. Такое же изменение возникает, следовательно, в уравнении (7.8) для $\hat{\Psi}$ и соответственно замена $\nabla \rightarrow \nabla + ie\mathbf{A}/c$ в аналогичном уравнении для $\hat{\Psi}^+$; то же самое относится, очевидно, и к уравнениям для $\hat{\Psi}^M$ и $\hat{\Psi}^{M\dagger}$. Спиновый же член ($\sim \boldsymbol{\sigma} \mathbf{H}$), отвечающий прямому взаимодействию магнитного момента электрона с полем, мал и им можно пренебречь в гамильтониане и уравнениях. При воздействии оператора ∇ на функции $\mathcal{G}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}')$ и $\mathcal{F}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}')$ дифференцированию подвергаются соответственно операторы $\hat{\Psi}^M(\tau, \mathbf{r})$ и $\hat{\Psi}^{M\dagger}(\tau, \mathbf{r})$. Поэтому и в уравнениях (42.5) введение магнитного поля осуществляется теми же заменами $\nabla \rightarrow \nabla \mp ie\mathbf{A}/c$.

Наличие внешнего поля нарушает пространственную однородность системы, в результате чего зависимость гриновских

¹⁾ В этом и следующих параграфах лондоновская глубина проникновения обозначается как δ_L .

²⁾ Ниже в этом параграфе (в уравнениях (51.9)–(51.19)) полагаем $\hbar = 1$.

функций от аргументов $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ уже не сводится к зависимости от $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$; от аргументов же τ и τ' функции по-прежнему зависят только через разность $\tau - \tau'$. Мы запишем уравнения сразу для фурье-компонент по $\tau - \tau'$:

$$\left\{ i\zeta_s + \frac{1}{2m} \left[\nabla - \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 + \mu \right\} \mathcal{G}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') + g \Xi \bar{\mathcal{F}}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}),$$

$$\left\{ -i\zeta_s + \frac{1}{2m} \left[\nabla + \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 + \mu \right\} \bar{\mathcal{F}}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') - g \Xi^* \mathcal{G}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0.$$

В случае слабого поля, который мы только и будем здесь рассматривать, эти уравнения могут быть линеаризованы; полагаем

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= \mathcal{G}^{(0)} + \mathcal{G}^{(1)}, \\ \bar{\mathcal{F}} &= \bar{\mathcal{F}}^{(0)} + \bar{\mathcal{F}}^{(1)} \end{aligned} \quad (51.10)$$

(где первые члены — значения функций в отсутствие поля, а вторые — малые поправки, линейные по полю) и сохраняем в уравнениях лишь члены первого порядка малости по $\mathbf{A}$.

При этом надо иметь в виду, что наличие поля меняет также и конденсатную волновую функцию Ξ , не сводящуюся в этом случае к постоянной. Это усложнение, однако, отсутствует при выбранной нами калибровке векторного потенциала, в которой

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0 \quad (51.11)$$

Действительно, поправка первого порядка (к постоянному значению $\Xi^{(0)}$) в скалярной функции $\Xi(\mathbf{r})$ могла бы быть лишь пропорциональной $\operatorname{div} \mathbf{A}$ и при условии (51.11) обращается в нуль. Поэтому с требуемой точностью можно положить в линеаризованных уравнениях $g \Xi = g \Xi^{(0)} \equiv \Delta$, где Δ — щель в энергетическом спектре газа в отсутствие поля (вещественная величина).

В результате линеаризованные уравнения (51.9) принимают вид

$$\begin{aligned} \left(i\zeta_s + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) \mathcal{G}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') + \Delta \bar{\mathcal{F}}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \\ &= \frac{ie}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \nabla \mathcal{G}^{(0)}(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}'), \end{aligned} \quad (51.12)$$

$$\begin{aligned} \left(-i\zeta_s + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) \bar{\mathcal{F}}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') - \Delta \mathcal{G}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \\ &= -\frac{ie}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \nabla \bar{\mathcal{F}}^{(0)}(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned}$$

В виду линейности этих уравнений по $\mathbf{A}$ достаточно решить их для одной из фурье-компонент поля, т. е.

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \mathbf{kA}(\mathbf{k}) = 0. \quad (51.13)$$

При таком $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ зависимость функций $\mathcal{G}^{(1)}$ и $\overline{\mathcal{F}}^{(1)}$ от суммы $\mathbf{r} + \mathbf{r}'$ можно сразу отделить, положив

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= g(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}+\mathbf{r}')/2}, \\ \overline{\mathcal{F}}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= f(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}+\mathbf{r}')/2}. \end{aligned} \quad (51.14)$$

Так, первое из уравнений (51.12) принимает после этого вид

$$\begin{aligned} \left[i\zeta_s + t \frac{1}{2m} \left(\nabla + \frac{i}{2} \mathbf{k} \right)^2 + \mu \right] g(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}') + \Delta f(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}') = \\ = \frac{ie}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/2} \nabla \mathcal{G}^{(0)}(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned}$$

и аналогично для второго уравнения. Произведем теперь фурье-преобразование функций g и f по $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Окончательно приходим к следующей системе двух алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} \left[i\zeta_s - \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2} \right)^2 + \mu \right] g(\zeta_s, \mathbf{p}) + \Delta f(\zeta_s, \mathbf{p}) = \\ = -\frac{e}{mc} \mathbf{pA}(\mathbf{k}) \mathcal{G}^{(0)}\left(\zeta_s, \mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2}\right), \end{aligned} \quad (51.15)$$

$$\begin{aligned} \left[-i\zeta_s - \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2} \right)^2 + \mu \right] f(\zeta_s, \mathbf{p}) - \Delta g(\zeta_s, \mathbf{p}) = \\ = \frac{e}{mc} \mathbf{pA}(\mathbf{k}) \overline{\mathcal{F}}^{(0)}\left(\zeta_s, \mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2}\right). \end{aligned}$$

После простых преобразований с использованием выражений (42.7), (42.8) для функций $\mathcal{G}^{(0)}$ и $\overline{\mathcal{F}}^{(0)}$ решение этих уравнений приводится к виду

$$g(\zeta_s, \mathbf{p}) = -\frac{e}{mc} \mathbf{pA}(\mathbf{k}) \frac{(i\zeta_s + \eta_+)(i\zeta_s + \eta_-) + \Delta^2}{(\zeta_s^2 + \varepsilon_+^2)(\zeta_s^2 + \varepsilon_-^2)}, \quad (51.16)$$

где $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon(\mathbf{p} \pm \mathbf{k}/2)$, $\eta_{\pm} = \eta(\mathbf{p} \pm \mathbf{k}/2)$ (функция же $f(\zeta_s, \mathbf{p})$ нам ниже не понадобится).

Перейдем к вычислению тока. Для этого исходим из известного выражения оператора плотности тока в представлении

вторичного квантования¹⁾

$$\hat{\mathbf{j}} = \frac{ie}{2m} \left[(\nabla \hat{\Psi}_\alpha^+) \hat{\Psi}_\alpha - \hat{\Psi}_\alpha^+ (\nabla \hat{\Psi}_\alpha) \right] - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A} \hat{\Psi}_\alpha^+ \hat{\Psi}_\alpha.$$

Для перехода к мацубаровскому представлению этого оператора достаточно заменить гейзенберговские $\hat{\Psi}$, $\hat{\Psi}^+$ на мацубаровские $\hat{\Psi}^M$, $\hat{\Psi}^{M\dagger}$. Вспомнив определение гриновской функции (37.2), найдем, что плотность тока (диагональный матричный элемент оператора $\hat{\mathbf{j}}$, усредненный по распределению Гиббса) может быть записана в виде

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = 2 \frac{ie}{2m} [(\nabla' - \nabla) \mathcal{G}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}')] \Big|_{\substack{\mathbf{r}' = \mathbf{r} \\ \tau' = \tau + 0}} - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}) n, \quad (51.17)$$

где n — плотность числа частиц (множитель 2 возникает от $\mathcal{G}_{\alpha\alpha} = 2\mathcal{G}$).

При подстановке в (51.17) $\mathcal{G} = \mathcal{G}^{(0)} + \mathcal{G}^{(1)}$ член с $\mathcal{G}^{(0)}$ выпадает: для однородной и изотропной системы функция $\mathcal{G}^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ — четная, и ее производная при $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = 0$ обращается в нуль. Перейдя также к разложению Фурье по $\tau - \tau'$, получим

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{ie}{m} T \sum_{s=-\infty}^{\infty} [(\nabla' - \nabla) \mathcal{G}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}')] \Big|_{\mathbf{r}' = \mathbf{r}} - \frac{e^2 n}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}),$$

а после подстановки $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ и $\mathcal{G}^{(1)}$ из (51.13) и (51.14) —

$$\mathbf{j}(\mathbf{k}) = \frac{2eT}{m} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \mathbf{p} g(\zeta_s, \mathbf{p}) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} - \frac{ne^2}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{k}).$$

При подстановке сюда $g(\zeta_s, \mathbf{p})$ из (51.16) удобно сразу учесть поперечность векторов $\mathbf{j}(\mathbf{k})$ и $\mathbf{A}(\mathbf{k})$ и произвести усреднение по направлениям $\mathbf{p}_\perp$ в плоскости, перпендикулярной направлению $\mathbf{k}$, по формуле

$$\overline{p_\perp i p_\perp k} = \frac{p^2}{2} \sin^2 \theta \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right),$$

где θ — угол между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}$. В результате находим следующее

¹⁾ См. III, § 115. Здесь опущен член, представляющий вклад в ток от спина частиц. Для неферромагнитной системы (когда гриновская функция $\mathcal{G}_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \mathcal{G}$) этот член при усреднении обращается в нуль.

выражение для функции $Q(\mathbf{k})$, определяющей связь между $\mathbf{j}(\mathbf{k})$ и $\mathbf{A}(\mathbf{k})$:

$$Q(\mathbf{k}) = \frac{e^2 T}{m^2 c} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int p^2 \sin^2 \theta \frac{(i\zeta_s + \eta_+)(i\zeta_s + \eta_-) + \Delta^2}{(\zeta_s^2 + \varepsilon_+^2)(\zeta_s^2 + \varepsilon_-^2)} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} + \frac{ne^2}{mc},$$

$$\varepsilon_{\pm}^2 = \eta_{\pm}^2 + \Delta^2, \quad \eta_{\pm} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} \pm \frac{\mathbf{k}}{2} \right)^2 - \mu. \quad (51.18)$$

Написанные в таком виде стоящие здесь интегралы и сумма формально расходятся. Хотя эти расходимости в действительности фиктивны, но при вычислении требуется осторожность: до устранения расходимости результат может зависеть даже от порядка, в котором производятся интегрирование и суммирование.

Эту трудность можно обойти, если учесть заранее очевидное обстоятельство, что при $\Delta = 0$ должно быть $Q = 0$ — в нормальном металле сверхпроводящий ток вообще отсутствует. Поэтому мы не изменим ответа, если вычтем из (51.18) такое же выражение с $\Delta = 0$:

$$Q(\mathbf{k}) = \frac{e^2 T}{m^2 c} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int p^2 \sin^2 \theta \left\{ \frac{(i\zeta_s + \eta_+)(i\zeta_s + \eta_-) + \Delta^2}{(\zeta_s^2 + \varepsilon_+^2)(\zeta_s^2 + \varepsilon_-^2)} - \frac{1}{(i\zeta_s - \eta_+)(i\zeta_s - \eta_-)} \right\} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3}. \quad (51.19)$$

Это выражение уже хорошо сходится и интегрирование и суммирование в нем можно производить в любом порядке.

Отметим прежде всего, что интересующие нас значения $\mathbf{k}$ малы в том смысле, что $k \ll p_F$; это равенство выражает собой просто тот факт, что характерные расстояния, на которых в сверхпроводнике меняются поле и ток, велики по сравнению с междоузлиями расстояниями (т. е. по сравнению с $\sim 1/p_F$).

Произведем в (51.19) сначала интегрирование по $d\mathbf{p}$. Этот интеграл сосредоточен в основном в узкой области импульсов вблизи ферми-поверхности — в области $|p - p_F| \sim k$. В этой области

$$\eta_{\pm} \approx \eta \pm \frac{1}{2} v_F k \cos \theta \approx v_F (p - p_F) \pm \frac{1}{2} v_F k \cos \theta,$$

множитель p^2 в подынтегральном выражении можно заменить на p_F^2 , а интегрирование по $d^3 p$ — интегрированием по $2\pi m p_F d\eta d\cos \theta$. После этого интеграл по $d\eta$ от второго члена в фигурных скобках в (51.19) обращается в нуль: путь интегрирования в нем может быть теперь замкнут бесконечно удаленной полуокружностью в плоскости комплексного η , и обращение интеграла в нуль есть следствие того, что оба полюса подынтегрального выражения находятся в одной и той же полуплоскости (верхней или нижней

в зависимости от знака ζ_s). Интегрирование по $d\eta$ в первом члене в (51.19) производится элементарно, после чего остается лишь интеграл по переменной $x = \cos \theta$. Введя также плотность n согласно равенству $p_F^2 = 3\pi^3 n$, получим окончательный результат в виде (в обычных единицах)

$$Q(\mathbf{k}) = \frac{3\pi T n e^2}{4mc} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \frac{\Delta^2(1-x^2) dx}{[\zeta_s^2 + \Delta^2 + (\hbar v_F k x/2)^2](\zeta_s^2 + \Delta^2)^{1/2}},$$

$$\zeta_s = (2s + 1) \pi T \quad (51.20)$$

(*J. Bardeen, N. Cooper, J. R. Schrieffer, 1957*)¹).

В предельном случае малых значений k ($k\xi_0 \ll 1$, где $\xi_0 \sim \hbar v_F / \Delta_0 \sim \hbar v_F / T_c$ — длина когерентности) можно показать, что выражение (51.20) сводится к не зависящему от k лондоновскому выражению (51.8); мы не будем останавливаться здесь на этом.

В обратном предельном случае, когда $k\xi_0 \gg 1$, в интеграле (51.20) существенна область $x \lesssim T_c / (\hbar k v_F) \ll 1$. Поэтому можно пренебречь x^2 по сравнению с 1 в числителе подинтегрального выражения, после чего (ввиду быстрой сходимости) распространить интегрирование от $-\infty$ до ∞ . В результате найдем

$$Q(\mathbf{k}) = \frac{3\pi^2 n e^2 T}{2mc \hbar v_F k} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{\zeta_s^2 + \Delta^2}.$$

Произведя суммирование с помощью (42.10), представим эту формулу в виде²).

$$Q(\mathbf{k}) = \frac{c\beta}{4\pi k}, \quad \beta = \frac{4\pi n e^2}{mc^2} \frac{3\pi^2}{4\hbar v_F} \Delta \operatorname{th} \frac{\Delta}{2T}, \quad k\xi_0 \gg 1. \quad (51.21)$$

При $T \ll T_c$ имеем $n_s \approx n$, $\Delta \approx \Delta_0$ и тогда $\beta \sim 1/\delta_L^2 \xi_0$. При $T_c - T \ll T_c$ щель Δ мала, так что $\operatorname{th}(\Delta/2T) \approx \Delta/2T_c$; с учетом формул (40.4), (40.5), (40.16) находим снова $\beta \sim 1/\delta_L^2 \xi_0$. Таким образом, во всей области температур от 0 до T_c

$$\beta \sim 1/(\delta_L^2 \xi_0). \quad (51.22)$$

¹) Изложенный метод получения этого результата с помощью температурных гриновских функций принадлежит А. А. Абрикосову и Л. П. Горькову (1958).

²) Формула такого вида была предложена Пиппардом (А. В. Pippard, 1953) на основании качественных соображений еще до создания микроскопической теории сверхпроводимости.

Итак, функция $Q(\mathbf{k})$ остается примерно постоянной в области $k \lesssim 1/\xi_0$ (причем вблизи точки $\mathbf{k} = 0$ разлагается регулярно по степеням k^2); вне этой области функция $Q(\mathbf{k})$ убывает, при $k \gg 1/\xi_0$ — по закону $1/k$. Такому поведению функции $Q(\mathbf{k})$ отвечает координатная функция $Q(\mathbf{r})$, убывающая медленно (как $1/r^2$) в области $r \lesssim \xi_0$ и быстро (по экспоненциальному закону) вне этой области. Таким образом, корреляция между полем и током простирается всегда на расстояния $\sim \xi_0$. Подчеркнем, что это утверждение справедливо во всей области температур от нуля до T_c . Тем самым мы пришли к обоснованию сделанного уже в § 44 утверждения об универсальности ξ_0 как характерного для сверхпроводимости параметра длины.

§ 52. Глубина проникновения магнитного поля в сверхпроводник

Применим полученные в предыдущем параграфе результаты к задаче о проникновении внешнего магнитного поля в сверхпроводник (в лондоновском приближении эта задача была рассмотрена в § 44).

Пусть сверхпроводник ограничен плоской поверхностью и занимает полупространство $x > 0$, а внешнее поле $\mathfrak{H}$ (а с ним и индукция $\mathbf{B}$ внутри сверхпроводника) направлено параллельно поверхности, вдоль оси z . Тогда все величины зависят только от координаты x , причем ток $\mathbf{j}$ и векторный потенциал $\mathbf{A}$ (в калибровке с $\text{div } \mathbf{A} = 0$) направлены вдоль оси y . Уравнение Максвелла $\text{rot } \mathbf{B} = -\Delta \mathbf{A} = 4\pi \mathbf{j}/c$ сводится к

$$A''(x) = -\frac{4\pi}{c}j(x), \quad x > 0, \quad (52.1)$$

где $'$ означает дифференцирование по x .

Граничные условия к этому уравнению зависят, однако, от физических свойств поверхности металла по отношению к падающим на нее электронам. Наиболее прост случай зеркального отражения электронов от поверхности. Очевидно, что при таком законе отражения задача о полупространстве эквивалентна задаче о неограниченной среде, в которой поле $A(x)$ распределено симметрично по обе стороны плоскости $x = 0$ ($A(x) = A(-x)$). При этом производная $A'(x)$, как нечетная функция x , будет испытывать при $x = 0$ разрыв, меняя знак при прохождении x через нуль. Другими словами, условию $B = A' = \mathfrak{H}$ на поверхности полупространства в задаче с неограниченной средой отвечает условие

$$A'(+0) - A'(-0) = 2\mathfrak{H}. \quad (52.2)$$

Умножим уравнение (52.1) на e^{-ikx} и проинтегрируем его по dx в пределах от $-\infty$ до ∞ . В левой части уравнения пишем

$$\int_{-\infty}^{\infty} A'' e^{-ikx} dx = \int_{-\infty}^0 (A' e^{-ikx})' dx + \int_0^{\infty} (A' e^{-ikx})' dx + ik \int_{-\infty}^{\infty} A' e^{-ikx} dx.$$

Первые два интеграла дают в сумме $-2\mathfrak{H}$, а в последнем можно интегрировать уже просто по частям, поскольку сама функция $A(x)$ непрерывна при $x = 0$. В результате мы приходим к равенству

$$2\mathfrak{H} + k^2 A(k) = \frac{4\pi}{c} j(k),$$

где $A(k)$ и $j(k)$ — фурье-компоненты функций $A(x)$ и $j(x)$, определенных во всем пространстве. Они связаны, следовательно, соотношением $j(k) = -Q(k) A(k)$, где $Q(k)$ дается формулами, полученными в предыдущем параграфе. Таким образом, для фурье-компонент поля находим

$$A(k) = -\frac{2\mathfrak{H}}{k^2 + 4\pi Q(k)/c}. \quad (52.3)$$

Глубина проникновения δ определяется как ¹⁾.

$$\delta = \frac{1}{\mathfrak{H}} \int_0^{\infty} B(x) dx = -\frac{A(x=0)}{\mathfrak{H}}. \quad (52.4)$$

Выразив $A(x=0)$ через фурье-компоненты $A(k)$ и подставив последние из (52.3), имеем

$$\delta = -\frac{1}{\mathfrak{H}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \frac{dk}{2\pi} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{k^2 + 4\pi Q(|k|)/c}. \quad (52.5)$$

Основную роль в этом интеграле играет область значений k , в которой $k^2 \sim 4\pi Q/c$. В лондоновском случае (когда $\delta_L \gg \xi_0$) эти значения малы в том смысле, что $k\xi_0 \ll 1$. При этом $Q(k)$ дается не зависящим от k выражением (51.8), и интегрирование в (52.5) приводит, естественно, к значению $\delta = \delta_L$.

В обратном, пиппардовском случае (когда $\delta_L \ll \xi_0$) существенные в интеграле значения $k \gg 1/\xi_0$. Здесь $Q(k)$ дается выражением (51.21), и интеграл (52.5) дает

$$\delta = \delta_p = 4/3^{3/2} \beta^{1/3}. \quad (52.6)$$

¹⁾ При экспоненциальном законе затухания поля это определение совпадает с определением в (44.13).

С учетом (51.22) находим, таким образом, что пиппардовская глубина проникновения

$$\delta_p \sim (\delta_L^2 \xi_0)^{1/3}. \quad (52.7)$$

Изложенные вычисления относились к случаю зеркального отражения электронов от поверхности металла. В лондоновском случае, однако, глубина проникновения вообще не зависит от закона отражения, как это ясно из вывода значения δ_L в § 44; при $\delta \gg \xi_0$ детали структуры поверхности не существенны.

Но и в пиппардовском случае зависимость глубины проникновения от закона отражения фактически оказывается весьма незначительной. Так, в обратном, по отношению к зеркальному, случае диффузного отражения (когда направления скоростей отраженных электронов распределены изотропно при любом направлении падения) значение δ_p оказывается всего в 9/8 раз больше, чем при зеркальном отражении.

§ 53. Сверхпроводящие сплавы

Наличие примесей оказывает на свойства сверхпроводников значительно более глубокое влияние, чем на свойства нормальных металлов. Поправки к термодинамическим величинам нормального металла остаются малыми до тех пор, пока мала концентрация x атомов примеси, и становятся значительными лишь при $x \sim 1$, т. е. когда среднее расстояние между атомами примеси становится сравнимым с постоянной решетки a . Подчеркнем, что мы говорим здесь, конечно, об электронных вкладах в термодинамические величины, причем о тех из них, которые определяются средней плотностью распределения квантовых состояний электронов проводимости в импульсном пространстве (таковы, например, теплоемкость и магнитная восприимчивость в слабых полях).

Иная картина в сверхпроводящих металлах. Это связано с существованием характерного параметра длины, большого по сравнению с a , — длины когерентности ξ_0 . Поскольку рассеяние электронов на атомах примеси нарушает корреляцию между электронами, свойства сверхпроводника могут существенно измениться, уже когда длина свободного пробега электронов сравнивается с ξ_0 ; концентрация же x остается при этом еще малой. Мы изложим здесь качественно основные результаты, необходимые для общего понимания свойств таких сплавов малой концентрации¹⁾.

¹⁾ Полная теория сверхпроводящих сплавов, построенная А. А. Абрикосовым и Л. П. Горьковым, довольно сложна и выходит за рамки этой книги. См. оригинальные статьи: ЖЭТФ. 1958. Т. 35. С. 1558; 1959. Т. 36. С. 319.

Пусть атомы примеси не имеют механического, а тем самым и магнитного момента (не парамагнитные примеси). В таком случае они лишь слабо влияют на термодинамические свойства сверхпроводника в отсутствие магнитного поля. Дело в том, что такие примеси не нарушают симметрии относительно обращения времени. Действительно, взаимодействие распределенных некоторым образом примесных атомов с электронами можно описать заданием некоторого потенциального поля $U(\mathbf{r})$. Согласно теореме Крамерса, уровни энергии электронов в таком поле остаются двукратно вырожденными, причем соответствующие этим уровням состояния как раз являются взаимно обращенными по времени, и, следовательно, электроны в них могут образовывать куперовские пары. Это будет по-прежнему происходить вблизи резкой поверхности Ферми с той лишь разницей, что самая эта поверхность ограничивает теперь заполненные состояния не в импульсном пространстве, а в пространстве квантовых чисел в поле $U(\mathbf{r})$; при малой концентрации примеси плотность квантовых состояний вблизи ферми-поверхности изменяется мало.

Ясно поэтому, что после усреднения по положениям атомов примесей должны получиться формулы, отличающиеся от формул теории чистых сверхпроводников лишь поправками порядка малости x . В пренебрежении этими несущественными поправками не изменятся, в частности, температура точки перехода T_c и величина скачка теплоемкости в ней. Поэтому не изменится и отношение α^2/b коэффициентов в уравнении Гинзбурга–Ландау (см. (45.8)); самый же вид этого уравнения вообще не зависит от отсутствия или наличия примесей, уравнение справедливо в равной степени как для чистых сверхпроводников, так и для сверхпроводящих сплавов.

С другой стороны, магнитные свойства сверхпроводника, в частности глубина проникновения магнитного поля, существенно меняются уже при $l \sim \xi_0$. Оценим глубину проникновения, предполагая, что хотя концентрация $x \ll 1$, но уже длина пробега $l \ll \xi_0$ (A. B. Pippard, 1953).

Столкновения электронов с атомами примеси уничтожают корреляцию в движении электронов на расстояниях $r \gtrsim l$. Это значит, что ядро $Q(r)$ в интегральной связи между током и полем в сверхпроводнике будет экспоненциально затухать уже на расстояниях $r \sim l \ll \xi_0$. Соответственно в импульсном представлении функция $Q(k)$ будет теперь оставаться постоянной в области $k \lesssim 1/l$. Значение этой постоянной можно определить путем «сшивки» при $kl \sim 1$ с формулой (51.21) (остающейся справедливой при $k \gg 1/l \gg 1/\xi_0$). Таким образом, находим, что

$$Q(k) \sim \frac{ne^2}{mc} \frac{l\Delta}{\hbar v_F} \operatorname{th} \frac{\Delta}{2T} \quad \text{при } kl \lesssim 1. \quad (53.1)$$

Глубина проникновения δ определяется соотношением $k^2 \sim Q(k)/c$ при $k \sim 1/\delta$ (см. § 52). Используя (53.1), найдем

$$\delta \sim \delta_L^{(\text{чист})}(T=0) \left[\frac{\xi_0}{l \operatorname{th}(\Delta/2T)} \right]^{1/2} \sim \delta_L^{(\text{чист})}(T) \left(\frac{\xi_0}{l} \right)^{1/2}, \quad (53.2)$$

причем для справедливости этой формулы должно выполняться неравенство $\delta \gg l$, оправдывающее использование (53.1); индекс «чист» означает значение величины в отсутствие примесей, значение для чистого сверхпроводника подразумевается также и для ξ_0 . Выражение (53.2) можно представить также и лондонской формулой, понимая в ней под плотностью числа сверхпроводящих электронов величину

$$n_s \sim n_s^{(\text{чист})} \xi_0/l. \quad (53.3)$$

В терминах коэффициентов α и b уравнения Гинзбурга–Ландау соотношение (53.2) означает (см. (45.16)), что

$$\frac{b}{\alpha} \sim \left(\frac{b}{\alpha} \right)_{\text{чист}} \frac{\xi_0}{l}.$$

Учитывая также отмеченную выше независимость от наличия примесей отношения α^2/b , находим, что

$$\alpha \sim \alpha_{\text{чист}} \xi_0/l, \quad b \sim b_{\text{чист}} (\xi_0/l)^2. \quad (53.4)$$

Согласно (45.17) имеем отсюда для корреляционного радиуса

$$\xi(T) \sim \xi(T)_{\text{чист}} (l/\xi_0)^{1/2} \quad (53.5)$$

и для параметра κ (45.18)

$$\kappa \sim \kappa_{\text{чист}} \xi_0/l \gg \kappa_{\text{чист}}. \quad (53.6)$$

При достаточно малой длине пробега становится $\kappa > 1/\sqrt{2}$, так что достаточно «грязные» сверхпроводники относятся ко второму роду.

Область применимости уравнений Гинзбурга–Ландау к «грязным» сверхпроводникам со стороны низких температур ограничивается фактически только условием $T_c - T \ll T_c$. Необходимое неравенство $\delta(T) \gg l$ эквивалентно в этом случае более слабому условию

$$\frac{T_c - T}{T_c} \ll \kappa_{\text{чист}}^2 \left(\frac{\xi_0}{l} \right)^3 \sim \kappa^2 \frac{\xi_0}{l}.$$

Наконец, скажем несколько слов о свойствах сверхпроводников с парамагнитными примесями. Такие примеси нарушают симметрию системы относительно обращения времени и тем самым нарушают самое явление спаривания электронов (при

наличии магнитных моментов обращение времени требует также и изменения знаков моментов, т. е. по существу означает замену одной физической системы другой). Количественной мерой влияния этих примесей на свойства сверхпроводника является длина пробега l_s по отношению к рассеянию с изменением направления спина (вызванного обменным взаимодействием с атомами примеси). Сверхпроводимость исчезает при достижении концентрации x критического значения, при котором $l_s \sim \xi_0$.

В действительности, однако, имеется две критические концентрации, обе одного порядка величины. При меньшей из них (x_1) обращается в нуль щель Δ в энергетическом спектре; конденсатная же волновая функция Ξ обращается в нуль лишь при некоторой концентрации $x_2 > x_1$. В области же концентраций между x_1 и x_2 имеет место *бесщелевая* сверхпроводимость. Поскольку при выводе уравнения Лондонов в § 44 использовались лишь самый факт существования конденсатной функции и соображения калибровочной инвариантности, то ясно, что основные свойства сверхпроводника — существование сверхпроводящего тока, эффект Мейсснера — сохраняются и в этой области. Отсутствие же щели в спектре проявляется (в равновесных свойствах сверхпроводника) в неэкспоненциальном температурном ходе теплоемкости. Отметим, что противоречия с критерием сверхтекучести Ландау (§ 23) здесь не возникает, так как к неупорядоченным системам (типа рассматриваемых сплавов) этот критерий вообще неприменим, поскольку элементарные возбуждения не характеризуются определенным импульсом¹⁾.

§ 54. Эффект Купера при отличных от нуля орбитальных моментах пары

Уже неоднократно говорилось о том, что в основе возникновения сверхтекучести в ферми-системе лежит эффект Купера — образование связанных состояний (спаривание) притягивающимися частицами на ферми-поверхности. Для ферми-газа условие притяжения формулируется как требование отрицательности длины рассеяния $a = \int U d^3x$, т. е. положительность амплитуды рассеяния двух частиц в состоянии с нулевым орбитальным моментом относительного движения, $l = 0$ (именно это состояние дает главный вклад в рассеяние при малых энергиях).

Справедливо, однако, и гораздо более сильное утверждение: спаривание (и, как следствие, возникновение сверхтекучести)

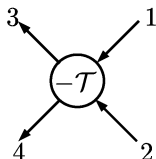
¹⁾ Изложение теории бесщелевой сверхпроводимости см. в оригинальной статье: А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков // ЖЭТФ. 1960. Т. 39. С. 1781.

происходит, если взаимодействие имеет характер притяжения хотя бы при одном каком-либо значении момента l (Л. Д. Ландау, 1959). Подчеркнем, что речь идет об изотропной системе (жидкость или газ), где можно классифицировать состояния по значениям l .

Докажем это утверждение для ферми-газа с помощью метода, позволяющего, в принципе, определить температуру T_c перехода в сверхтекучее состояние исходя только из свойств системы (нормального ферми-газа) при температурах $T > T_c$.

В §18 было упомянуто, что в математическом аппарате гриновских функций нормальной ферми-системы энергия связанного состояния пары частиц проявляется как полюс вершинной функции Γ ; то же самое относится (при $T \neq 0$) и к температурной вершинной функции, которую обозначим через $\mathcal{T}$. После появления такого полюса весь этот аппарат становится в действительности неприменимым, но он еще применим в первый момент, когда (при понижении температуры) при $T = T_c$ впервые появляется полюс, причем энергия связи пары в этот момент должна равняться нулю; состояния сверхтекучей и нормальной фаз при этом совпадают.

На скелетной диаграмме



кружок изображает $-\mathcal{T}$. Точка перехода T_c определяется, согласно сказанному выше, как температура, при которой $\mathcal{T}$ имеет полюс при

$$\zeta_{s1} = \zeta_{s2} = 0, \quad \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_1 = 0. \quad (54.1)$$

Первое равенство выражает, что спаривающиеся частицы находятся на ферми-поверхности, а энергия связи пары равна нулю; второе равенство означает, что спаривающиеся частицы имеют противоположные импульсы.

Спаривание частиц возникает уже при сколь угодно слабом их притяжении. Ясно, что для возникновения полюса необходимо, чтобы в ряде теории возмущений для вершинной функции имелись бы члены, содержащие интегралы, расходящиеся при условии (54.1) и при $T_c \rightarrow 0$ (T_c мало при слабом притяжении); в противном случае все поправки к (конечному) члену первого приближения были бы заведомо малы по сравнению с последним при всех температурах, и полюс не мог бы появиться.

Этому требованию удовлетворяет ряд «лестничных» диаграмм

$$\begin{array}{c} 3 \\ \swarrow \\ \text{---} \ominus \text{---} \mathcal{T \\ \swarrow \searrow \\ 4 \quad 2 \end{array} = \begin{array}{c} 3 \longleftarrow 1 \\ \vdots \\ 4 \longleftarrow 2 \end{array} + \begin{array}{c} 3 \longleftarrow \longleftarrow 1 \\ \vdots \\ 4 \longleftarrow \longleftarrow 2 \end{array} + \begin{array}{c} 3 \longleftarrow \longleftarrow \longleftarrow 1 \\ \vdots \\ 4 \longleftarrow \longleftarrow \longleftarrow 2 \end{array} + \dots \quad (54.2)$$

Как будет видно из последующего, во всех этих диаграммах (начиная со второй) малость по взаимодействию (от прибавления штриховых линий) компенсируется, в указанном смысле, расходимостью интегралов¹⁾.

Применив к этому ряду прием, который был уже использован при переходе от (17.3) к (17.4), найдем, что равенство (54.2) эквивалентно диаграммному уравнению

$$\begin{array}{c} P_3 \quad P_1 \\ \swarrow \quad \swarrow \\ \text{---} \ominus \text{---} \\ \swarrow \quad \swarrow \\ -P_3 \quad -P_1 \end{array} - \begin{array}{c} P_3 \quad P_1 \\ \swarrow \quad \swarrow \\ \text{---} \ominus \text{---} \\ \swarrow \quad \swarrow \\ -P_3 \quad -P_1 \end{array} = \begin{array}{c} P_3 \longleftarrow \longleftarrow P_1 \\ \vdots \\ -P_3 \longleftarrow \longleftarrow -P_1 \end{array} . \quad (54.3)$$

Свободным концам и внутренним линиям диаграмм отвечают аргументы, которые указаны в (54.3) уже с учетом условий (54.1):

$$P_1 = (0, \mathbf{p}_1), \quad P_3 = (0, \mathbf{p}_3), \quad Q = (i\zeta_s, \mathbf{q}).$$

Спиновая зависимость гриновских функций идеального газа отделяется в виде $\mathcal{G}_{\alpha\beta}^{(0)} = \delta_{\alpha\beta} \mathcal{G}^{(0)}$, а спиновая зависимость вершинной функции (без антисимметризации!) — в виде

$$\mathcal{T}_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2) = \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} \mathcal{T}(P_3, P_4; P_1, P_2).$$

Раскрыв диаграммы (54.3) по указанным в § 38 правилам и сократив спиновые множители, получим для функции $\mathcal{T}$

¹⁾ К диаграммам (54.2) надо было бы добавить еще такой же ряд диаграмм с переставленными концами 3 и 4, что приводит к антисимметризации вершинной функции по ее спиновым и орбитальным аргументам. Однако для поставленной здесь цели определения $\mathcal{T}_c$ этого можно не делать, так как в обеих этих частях вершинной функции полюс появляется одновременно.

интегральное уравнение

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(\mathbf{p}_3, -\mathbf{p}_3; \mathbf{p}_1, -\mathbf{p}_1) + T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int U(\mathbf{p}_3 - \mathbf{q}) \mathcal{G}^{(0)}(\zeta_s, \mathbf{q}) \mathcal{G}^{(0)}(-\zeta_s, -\mathbf{q}) \times \\ \times \mathcal{T}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; \mathbf{p}_1, -\mathbf{p}_1) \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} = U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3). \end{aligned} \quad (54.4)$$

В стоящих здесь сумме и интегралах существенны малые значения дискретной переменной ζ_s и значения $\mathbf{q}$ вблизи ферми-поверхности (см. ниже). Поэтому в множителях U и $\mathcal{T}$ под знаком интеграла можно положить $\zeta_s = 0$ и $q = p_F$. На ферми-поверхности лежат также и векторы $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_3$. Таким образом, все функции $\mathcal{T}$ и U в уравнении (54.4) будут зависеть каждая лишь от одной независимой переменной — угла между какими-либо двумя из трех векторов $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{p}_3$, $\mathbf{q}$ на ферми-поверхности.

Уравнение (54.4) можно теперь решить, разделив U и $\mathcal{T}$ в ряды по полиномам Лежандра:

$$\begin{aligned} U(\vartheta) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \vartheta), \\ \mathcal{T}(\vartheta) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \mathcal{F}_l P_l(\cos \vartheta), \end{aligned} \quad (54.5)$$

где ϑ — какой-либо из указанных углов. Подставив эти разложения в (54.4) и произведя интегрирование по направлениям с помощью теоремы сложения сферических функций, получим

$$\mathcal{T}_l(1 + a_l \Pi) = a_l, \quad (54.6)$$

где

$$\Pi = T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int |\mathcal{G}^{(0)}(\zeta_s, \mathbf{q})|^2 \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} = \frac{T}{(2\pi)^3} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 q}{\zeta_s^2 + \eta_{\mathbf{q}}^2}; \quad (54.7)$$

функция $\mathcal{G}^{(0)}$ взята из (37.13), а $\eta_{\mathbf{q}} = q^2/2m - \mu \approx v_F(q - p_F)$. Согласно формуле суммирования (42.10), имеем

$$\Pi = \frac{1}{2(2\pi)^3} \int \text{th} \frac{\eta_{\mathbf{q}}}{2T} \frac{d^3 q}{\eta_{\mathbf{q}}}. \quad (54.8)$$

Расходимость интеграла по $dq = d\eta/v_F$ на верхнем пределе фиктивна (ср. примечание на с. 207) и интеграл должен быть

обрезан при некотором $\eta \approx \tilde{\varepsilon}_l^{-1}$). Но при $T \rightarrow 0$ интеграл расходуется логарифмически также и на нижнем пределе, т. е. ведет себя как $\ln(1/T)$.

Из (54.6) видно, что $\mathcal{T}_l$ обращается в бесконечность (т. е. $\mathcal{T}$ имеет полюс) при условии

$$1 + a_l \Pi = 0. \quad (54.9)$$

Но это уравнение совпадает по форме с уравнением, определяющим точку перехода при спаривании с $l = 0$, отличаясь от него лишь заменой «константы связи» g на $-a_l$ (ср. (42.11)); понимая эту формулу как уравнение для определения T_c , надо положить в ней $\Delta = 0$, после чего $\varepsilon(p)$ совпадает с η_p . Мы видим, следовательно, что вершинная функция имеет полюс, если хотя бы одна из величин a_l отрицательна; при этом температура перехода

$$T_c^{(l)} = \frac{\gamma}{\pi} \tilde{\varepsilon}_l \exp\left(-\frac{2}{|a_l| \nu_F}\right) \quad (54.10)$$

(ср. (40.4) и (39.19)). Если $a_l < 0$ при ряде различных значений l , то переход происходит при температуре $T_c^{(l)}$, отвечающей максимальному $|a_l|^2$.

Можно показать, что во всяком ферми-газе (или жидкости), состоящем из электрически нейтральных атомов, величины a_l во всяком случае должны стать отрицательными при достаточно больших значениях l (*Л. П. Питаевский*, 1959). Причина заключается в том, что во взаимодействии нейтральных атомов всегда есть область расстояний (больших), на которых оно имеет характер притяжения — так называемое ван-дер-ваальсово притяжение.

В реально существующей жидкости такого рода — жидком изотопе ^3He — возникновение сверхтекучести происходит, по-видимому, за счет спаривания с $l = 1^3$). Мы не будем останавливаться на структуре сверхтекучей фазы и обсудим лишь кратко вопрос о выборе параметра порядка, отличающего эту фазу

¹) В виду быстрой сходимости суммы по s в (54.7) в ней действительно существенны лишь малые ζ_s , а логарифмический характер интеграла по dq оправдывает предположение о близости q к p_F .

²) Отметим, что если бы были все $a_l > 0$, то переход отсутствовал бы и формула (54.6) для $\mathcal{T}_l$ была бы справедлива при всех температурах вплоть до $T = 0$. При этом все $\mathcal{T}_l$ стремились бы при $T \rightarrow 0$ к нулю по закону $\mathcal{T}_l \propto 1/|\ln T|$. Это является проявлением упомянутого в примечании на с. 42 факта обращения при $T = 0$ в нуль функции $\mathcal{T}$ (а с нею и функции взаимодействия квазичастиц f) для частиц с противоположными импульсами.

³) Переход происходит при температуре $\sim 10^{-3}$. Заметим, что малость T_c обеспечивает существование области применимости теории нормальной ферми-жидкости к жидкому ^3He .

от нормальной. Величиной, равной нулю выше точки перехода и отличной от нуля ниже нее, является аномальная гриновская функция $F_{\alpha\beta}(t, \mathbf{r}_1; t, \mathbf{r}_2) \equiv F_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$; как было уже указано в § 41, она играет роль волновой функции связанных пар частиц. Ее фурье-компонента $F_{\alpha\beta}(\mathbf{p})$, взятая на ферми-поверхности (т. е. при $\mathbf{p} = 2p_F\mathbf{n}$), является функцией направления $\mathbf{n}$ (а не константой, как при спаривании с $l = 0$). В силу антикоммутации ψ -операторов функция $F_{\alpha\beta}(\mathbf{n})$ антисимметрична, как и следовало, по отношению к перестановке частиц: $F_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) = -F_{\beta\alpha}(-\mathbf{n})$.

При спаривании с $l = 1$ (как и с любым нечетным моментом) $F_{\alpha\beta}$ — нечетная функция $\mathbf{n}$, так что $F_{\alpha\beta}$ — симметричный спинор. Это значит, что спин пары равен единице, как и должно быть для состояния двух одинаковых фермионов с нечетным l . Симметричный спинор второго ранга эквивалентен вектору, который обозначим через $\mathbf{d}$. В случае $l = 1$ зависимость $\mathbf{d}$ от $\mathbf{n}$ должна отвечать полиному Лежандра $P_1(\cos\theta)$, т. е. быть линейной: $d_i = \psi_{ik}n_k$. Комплексный тензор второго ранга ψ_{ik} (не обязательно симметричный!) и описывает сверхтекучую фазу. Реально существуют две различные сверхтекучие фазы жидкого ^3He , различающиеся видом тензора ψ_{ik} .

ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

§ 55. Электрон в периодическом поле

Электронные оболочки атомов в кристалле сильно взаимодействуют друг с другом, в результате чего уже нельзя говорить об уровнях энергии отдельных атомов, а лишь об уровнях для совокупности электронных оболочек всех атомов тела в целом. Характер электронного энергетического спектра различен для разных типов твердых тел. В качестве предварительного шага для изучения этих спектров необходимо, однако, рассмотреть более формальную задачу о поведении отдельного электрона во внешнем пространственно-периодическом электрическом поле, которое служит моделью кристаллической решетки. Этому посвящены § 55–60.

Периодичность поля означает, что оно не меняется при параллельном переносе на любой вектор вида $\mathbf{a} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ (где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ — основные периоды решетки; n_1, n_2, n_3 — целые числа):

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = U(\mathbf{r}). \quad (55.1)$$

Поэтому и уравнение Шредингера, описывающее движение электрона в таком поле, инвариантно относительно любого преобразования $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$. Отсюда следует, что если $\psi(\mathbf{r})$ есть волновая функция некоторого стационарного состояния, то $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ тоже есть решение уравнения Шредингера, описывающее то же самое состояние электрона. Это означает, что обе функции должны совпадать с точностью до постоянного множителя: $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \text{const} \cdot \psi(\mathbf{r})$. Очевидно, что const должна быть равна по модулю единице; в противном случае при неограниченном повторении смещения на $\mathbf{a}$ (или на $-\mathbf{a}$) волновая функция стремилась бы к бесконечности. Общий вид функции, обладающей таким свойством, следующий:

$$\psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (55.2)$$

где $\mathbf{k}$ — произвольный (вещественный) постоянный вектор, а $u_{s\mathbf{k}}$ — периодическая функция

$$u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (55.3)$$

Этот результат был впервые получен *Ф. Блохом* (*F. Bloch*, 1929); волновые функции вида (55.2) называют *функциями Блоха*, и в этой связи об электроны в периодическом поле часто говорят как о блоховском электроны.

При заданном значении $\mathbf{k}$ уравнение Шредингера имеет, вообще говоря, бесконечный ряд различных решений, отвечающих бесконечному ряду различных дискретных значений энергии электрона $\varepsilon(\mathbf{k})$; индекс s в $\psi_{s\mathbf{k}}$ нумерует эти решения. Такой же индекс (номер *энергетической зоны*) надо приписать и различным ветвям функции $\varepsilon = \varepsilon_s(\mathbf{k})$ — закону дисперсии электрона в периодическом поле. В каждой зоне энергия пробегает значения в некотором конечном интервале.

Для различных зон эти интервалы разделены «энергетическими щелями» или же частично перекрываются; в последнем случае в области перекрытия каждому значению энергии отвечают различные (в каждой зоне) значения $\mathbf{k}$. Геометрически это означает, что изоэнергетические поверхности, отвечающие двум перекрывающимся зонам s и s' , находятся в различных областях $\mathbf{k}$ -пространства. Формально перекрытие зон означает вырождение — различные состояния обладают одинаковой энергией, но поскольку этим состояниям отвечают различные значения $\mathbf{k}$, то это не приводит к каким-либо особенностям в спектре. От общего случая перекрытия надо отличать пересечение зон, когда значения $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ и $\varepsilon_{s'}(\mathbf{k})$ совпадают в одних и тех же точках $\mathbf{k}$ (изоэнергетические поверхности пересекаются). Обычно под вырождением понимают только такой случай; пересечение приводит к появлению определенных особенностей в спектре.

Все функции $\psi_{s\mathbf{k}}$ с различными s или $\mathbf{k}$, разумеется, взаимно ортогональны. В частности, из ортогональности $\psi_{s\mathbf{k}}$ с различными s и одинаковыми $\mathbf{k}$ следует ортогональность функций $u_{s\mathbf{k}}$. При этом ввиду их периодичности достаточно производить интегрирование по объему v одной элементарной ячейки решетки; при соответствующей нормировке

$$\int u_{s'\mathbf{k}}^* u_{s\mathbf{k}} dv = \delta_{ss'}. \quad (55.4)$$

Смысл вектора $\mathbf{k}$ состоит в том, что определяет поведение волновой функции при трансляциях: преобразование $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$ умножает ее на $e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}$,

$$\psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}} \psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (55.5)$$

Отсюда сразу следует, что величина $\mathbf{k}$ по самому своему определению неоднозначна: значения, отличающиеся на любой вектор $\mathbf{b}$ обратной решетки, приводят к одинаковому поведению волновой функции (множитель $\exp\{i(\mathbf{k} + \mathbf{b})\mathbf{a}\} = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a})$). Другими

словами, такие значения $\mathbf{k}$ физически эквивалентны; они соответствуют одному и тому же состоянию электрона, т. е. одной и той же волновой функции. Можно сказать, что функции $\psi_{s\mathbf{k}}$ периодичны (в обратной решетке) относительно индекса $\mathbf{k}$:

$$\psi_{s, \mathbf{k}+\mathbf{b}}(\mathbf{r}) = \psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (55.6)$$

Периодична также и энергия:

$$\varepsilon_s(\mathbf{k} + \mathbf{b}) = \varepsilon_s(\mathbf{k}). \quad (55.7)$$

Функции (55.2) обнаруживают определенное сходство с волновыми функциями свободного электрона — плоскими волнами $\psi = \text{const} \cdot \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar)$; при этом роль сохраняющегося импульса играет постоянный вектор $\hbar\mathbf{k}$. Мы снова (как и для фонона — см. V, § 71) приходим к понятию о *квазиимпульсе* электрона в периодическом поле. Подчеркнем, что истинного сохраняющегося импульса в этом случае вообще нет, так как во внешнем поле закон сохранения импульса не имеет места. Замечательно, однако, что в периодическом поле электрон тем не менее характеризуется некоторым постоянным вектором.

В стационарном состоянии с заданным квазиимпульсом $\hbar\mathbf{k}$ истинный импульс может иметь, с различными вероятностями, бесконечное число значений вида $\hbar(\mathbf{k} + \mathbf{b})$. Это следует из того, что разложение периодической в пространстве функции в ряд Фурье содержит члены вида $e^{i\mathbf{b}\mathbf{r}}$:

$$u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{b}} a_{s, \mathbf{k}+\mathbf{b}} e^{i\mathbf{b}\mathbf{r}},$$

и потому разложение волновой функции (55.2) на плоские волны

$$\psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{b}} a_{s, \mathbf{k}+\mathbf{b}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{b})\mathbf{r}}. \quad (55.8)$$

Тот факт, что коэффициенты разложения зависят только от сумм $\mathbf{k} + \mathbf{b}$, выражает собой свойство периодичности в обратной решетке (55.6). Подчеркнем, что этот факт, как и свойство (55.6), не есть дополнительное условие, налагаемое на волновую функцию, а является автоматическим следствием периодичности поля $U(\mathbf{r})$.

Все физически различные значения вектора $\mathbf{k}$ лежат в одной элементарной ячейке обратной решетки. «Объем» этой ячейки равен $(2\pi)^3/v$, где v — объем элементарной ячейки самой решетки кристалла. С другой стороны, объем $\mathbf{k}/2\pi$ -пространства определяет число соответствующих ему состояний (приходящихся на единичный объем тела). Таким образом, число таких состояний, заключенных в каждой энергетической зоне, равно $1/v$, т. е. числу элементарных ячеек в единице объема кристалла.

Помимо своей периодичности в $\mathbf{k}$ -пространстве функции $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ обладают также и симметрией по отношению к поворотам и отражениям, отвечающим симметрии направлений (кристаллическому классу) решетки. При этом, независимо от наличия или отсутствия центра симметрии в данном кристаллическом классе, всегда

$$\varepsilon_s(-\mathbf{k}) = \varepsilon_s(\mathbf{k}). \quad (55.9)$$

Это свойство — следствие симметрии относительно обращения времени. Действительно, в силу этой симметрии, если $\psi_{s\mathbf{k}}$ — волновая функция стационарного состояния электрона, то и комплексно-сопряженная функция $\psi_{s\mathbf{k}}^*$ описывает некоторое состояние с той же энергией. Но $\psi_{s\mathbf{k}}^*$ умножается при трансляциях на $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}}$, т. е. ей отвечает квазиимпульс $-\mathbf{k}^1$.

Рассмотрим, далее, два электрона в периодическом поле. Рассматривая их вместе как одну систему с волновой функцией $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, мы найдем, что при параллельном переносе эта функция должна умножиться на множитель вида $e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}$, где $\mathbf{k}$ можно назвать квазиимпульсом системы. С другой стороны, на больших расстояниях между электронами $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ сводится к произведению волновых функций отдельных электронов и при трансляции умножится на $e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{a}}e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{a}}$. Из требования совпадения обоих видов записи этого множителя находим, что

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{b}. \quad (55.10)$$

В частности, отсюда следует, что при столкновении двух электронов, движущихся в периодическом поле, сумма их квазиимпульсов сохраняется с точностью до вектора обратной решетки:

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2 + \mathbf{b}. \quad (55.11)$$

Дальнейшая аналогия между квазиимпульсом и истинным импульсом выясняется при определении средней скорости электрона. Вычисление ее требует знания оператора скорости $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{r}}$ в $\mathbf{k}$ -представлении. Операторы в этом представлении действуют на коэффициенты $c_{s\mathbf{k}}$ разложения произвольной волновой функции по собственным функциям $\psi_{s\mathbf{k}}$:

$$\psi = \sum_s \int c_{s\mathbf{k}} \psi_{s\mathbf{k}} d^3k. \quad (55.12)$$

¹⁾ При наличии перекрытия зон из этих рассуждений следует, строго говоря, лишь что $\varepsilon_s(-\mathbf{k}) = \varepsilon_{s'}(\mathbf{k})$, где s и s' — номера каких-либо зон. Равенства (55.9) можно, однако, всегда добиться путем надлежащего определения номеров различных ветвей функции $\varepsilon(\mathbf{k})$.

Найдем сначала оператор $\hat{\mathbf{r}}$. Имеем тождественно

$$\mathbf{r}\psi = \sum_s \int c_{s\mathbf{k}} \mathbf{r} \psi_{s\mathbf{k}} d^3k = \sum_s \int c_{s\mathbf{k}} \left(-i \frac{\partial \psi_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{\partial u_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \right) d^3k.$$

В первом члене производим интегрирование по частям, а во втором разложим периодическую (как и сама $u_{s\mathbf{k}}$) функцию $\partial u_{s\mathbf{k}}/\partial \mathbf{k}$ по системе взаимно ортогональных функций $u_{s\mathbf{k}}$ с тем же $\mathbf{k}$:

$$\frac{\partial u_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} = -i \sum_{s'} \langle s\mathbf{k} | \Omega | s'\mathbf{k} \rangle u_{s'\mathbf{k}}, \quad (55.13)$$

где $\langle s\mathbf{k} | \Omega | s'\mathbf{k} \rangle$ — постоянные коэффициенты. Тогда получим

$$\begin{aligned} \mathbf{r}\psi &= \sum_s \int i \psi_{s\mathbf{k}} \frac{\partial c_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} d^3k + \sum_{ss'} \int c_{s\mathbf{k}} \langle s\mathbf{k} | \Omega | s'\mathbf{k} \rangle \psi_{s'\mathbf{k}} d^3k = \\ &= \sum_s \int \left\{ i \frac{\partial c_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + \sum_{s'} \langle s'\mathbf{k} | \Omega | s\mathbf{k} \rangle c_{s'\mathbf{k}} \right\} \psi_{s\mathbf{k}} d^3k. \end{aligned}$$

С другой стороны, по определению оператора $\hat{\mathbf{r}}$, должно быть

$$\mathbf{r}\psi = \sum_s \int (\hat{\mathbf{r}} c_{s\mathbf{k}}) \psi_{s\mathbf{k}} d^3k.$$

Сравнив с полученным выражением, находим

$$\hat{\mathbf{r}} = i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} + \hat{\Omega}, \quad (55.14)$$

где оператор (эрмитов) $\hat{\Omega}$ задается своей матрицей $\langle s'\mathbf{k} | \Omega | s\mathbf{k} \rangle$. Существенно, что эта матрица диагональна по индексу $\mathbf{k}$, и поэтому оператор $\hat{\Omega}$ коммутативен с оператором $\hat{\mathbf{k}} \equiv \mathbf{k}$.

Оператор скорости получается, по общим правилам, путем коммутирования оператора $\hat{\mathbf{r}}$ с гамильтонианом электрона. В $\mathbf{k}$ -представлении гамильтониан $\hat{H}$ является диагональной по $\mathbf{k}$ и номерам зон s матрицей с элементами $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ ¹⁾. Оператор же $\partial/\partial \mathbf{k}$, действующий только на переменную $\mathbf{k}$, диагонален по номерам s . Поэтому в выражении

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}} \hat{H}) = -\frac{1}{\hbar} \left(\hat{H} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \hat{H} \right) + \hat{\Omega}$$

¹⁾ Точнее, надо говорить о $\mathbf{k}s$ -представлении. Напомним, что волновые функции в этом представлении, $c_{s\mathbf{k}}$, не вполне произвольны — они должны быть периодичны по $\mathbf{k}$.

первый член является диагональной матрицей с элементами

$$-\frac{1}{\hbar} \left(\varepsilon_s(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \varepsilon_s(\mathbf{k}) \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_s(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}.$$

Матричные же элементы $\dot{\Omega}$ связаны с матричными элементами Ω соотношением

$$\langle s\mathbf{k} | \dot{\Omega} | s'\mathbf{k} \rangle = \frac{i}{\hbar} [\varepsilon_s(\mathbf{k}) - \varepsilon_{s'}(\mathbf{k})] \langle s\mathbf{k} | \Omega | s'\mathbf{k} \rangle;$$

это выражение обращается в нуль при $s = s'$, т. е. $\dot{\Omega}$ не имеет элементов, диагональных по номеру зоны. Таким образом, окончательно находим для матричных элементов скорости электрона

$$\langle s\mathbf{k} | \mathbf{v} | s\mathbf{k} \rangle = \frac{\partial \varepsilon_s(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}}, \quad \langle s\mathbf{k} | \mathbf{v} | s'\mathbf{k} \rangle = \langle s\mathbf{k} | \dot{\Omega} | s'\mathbf{k} \rangle \quad (s \neq s'). \quad (55.15)$$

Диагональные элементы этой матрицы представляют собой средние значения скорости в соответствующих состояниях. Эти значения, следовательно, как функции квазиимпульса даются выражением

$$\bar{\mathbf{v}}_s = \frac{\partial \varepsilon_s(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}}, \quad (55.16)$$

полностью аналогичным обычному классическому соотношению.

До сих пор мы вели изложение, отвлекаясь от наличия у электронов спина. В пренебрежении релятивистскими эффектами (спин-орбитальным взаимодействием) учет спина приводит просто к двукратному вырождению каждого уровня энергии с заданным значением квазиимпульса $\mathbf{k}$ — по двум значениям проекции спина на какое-либо фиксированное направление в пространстве. С учетом же спин-орбитального взаимодействия ситуация различна в зависимости от того, имеет ли или нет кристаллическая решетка центр инверсии.

Спин-орбитальное взаимодействие для электрона в периодическом поле описывается оператором

$$\hat{H}_{sl} = \frac{i\hbar^2}{4m^2c^2} [\boldsymbol{\sigma} \nabla U] \nabla, \quad (55.17)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ — матрица Паули (см. IV, § 33). Волновые функции, на которые действует этот оператор, — спиноры первого ранга $\psi_{s\mathbf{k}\alpha}$, где α — спинорный индекс. Согласно теореме Крамерса (см. III, § 60), относящийся к любому (в том числе периодическому) электрическому полю, комплексно-сопряженные спиноры $\psi_{s\mathbf{k}\alpha}$ и $\psi_{s\mathbf{k}\alpha}^*$ всегда описывают два различных состояния с одной и той же энергией. Поскольку в то же время функция

$\psi_{s\mathbf{k}\alpha}^*$ отвечает квазиимпульсу $-\mathbf{k}$, то мы снова (теперь уже и с учетом спин-орбитального взаимодействия) приходим к соотношению типа (55.9):

$$\varepsilon_{s\sigma}(-\mathbf{k}) = \varepsilon_{s\sigma'}(\mathbf{k}), \quad (55.18)$$

где индексы σ и σ' отличают два различных (обращенных по времени) спиновых состояния¹⁾.

Равенство (55.18) не означает, конечно, вырождения в том смысле, о котором говорилось выше, поскольку энергии в обеих сторонах равенства относятся к различным значениям $\mathbf{k}$. Но если решетка обладает центром инверсии, то состояния с $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$ имеют одинаковую энергию. Тогда мы приходим к равенству $\varepsilon_{s\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{s\sigma'}(\mathbf{k})$, снова означающему двукратное вырождение каждого уровня с заданным квазиимпульсом.

Наряду с вырождением, связанным с симметрией относительно обращения времени, для электрона в периодическом поле может существовать также и вырождение, обязанное пространственной симметрии решетки. Этим вопросам посвящен ниже § 68.

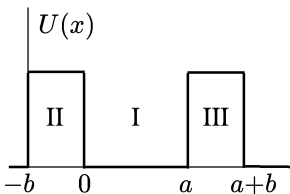


Рис. 10.

Задачи

1. Найти закон дисперсии для одномерного движения электрона в периодическом поле, изображенном на рис. 10 (*R. Kronig, W. G. Penney, 1930*).

Решение. Волновая функция в области ямы I ($0 < x < a$) имеет вид

$$\psi = c_1 e^{i\kappa_1 x} + c_2 e^{-i\kappa_1 x}, \quad \kappa_1 = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar, \quad (1)$$

а в области барьера II ($-b < x < 0$):

$$\psi = c_3 e^{i\kappa_2 x} + c_4 e^{-i\kappa_2 x}, \quad \kappa_2 = \sqrt{2m(\varepsilon - U_0)}/\hbar. \quad (2)$$

В области следующего барьера III волновая функция должна отличаться от (2) лишь фазовым множителем $e^{ik(a+b)}$ ($a+b$ — период поля):

$$\psi = e^{ik(a+b)} (c_3 e^{i\kappa_2(x-a-b)} + c_4 e^{-i\kappa_2(x-a-b)}). \quad (3)$$

Условия непрерывности ψ и ψ' в точках $x = 0$ и $x = a$ дают четыре уравнения для $c_1, \dots, c_4$; условие совместности этих уравнений приводит к дисперсионному уравнению

$$\cos k(a+b) = \cos \kappa_1 a \cdot \cos \kappa_2 b - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa_1}{\kappa_2} + \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \right) \sin \kappa_1 a \cdot \sin \kappa_2 b, \quad (4)$$

¹⁾ С учетом спин-орбитального взаимодействия оператор проекции спина уже не коммутативен с гамильтонианом, так что эта проекция не сохраняется и спиновые состояния не могут, строго говоря, характеризоваться этим числом.

определяющему в неявном виде искомую зависимость $\varepsilon(k)$. При $\varepsilon < U_0$ величина $\varkappa_2$ мнимая, и тогда уравнение надо записать в виде

$$\cos k(a+b) = \cos \varkappa_1 a \cdot \operatorname{ch} |\varkappa_2 b| + \frac{1}{2} \left(\frac{|\varkappa_2|}{\varkappa_1} - \frac{\varkappa_1}{|\varkappa_2|} \right) \sin \varkappa_1 a \cdot \operatorname{sh} |\varkappa_2 b|. \quad (5)$$

Если в (5) перейти к пределу $U_0 \rightarrow \infty$, $b \rightarrow 0$ при $U_0 b = \text{const} \equiv Pa$, получим дисперсионное уравнение

$$\cos ka = \cos \varkappa_1 a + \frac{Pma^2}{\hbar^2} \frac{\sin \varkappa_1 a}{\varkappa_1 a}. \quad (6)$$

Оно решает задачу об уровнях энергии в периодическом поле, составленном из δ -функционных пиков:

$$U(x) = aP \sum_n \delta(x - an).$$

На рис. 11 дано графическое построение, иллюстрирующее распределение корней уравнения (6). Здесь изображена правая часть уравнения как функция от $\varkappa_1 a$; когда она пробегает значения между ± 1 , корни уравнения пробегают значения в интервалах, указанных жирными отрезками на оси абсцисс.

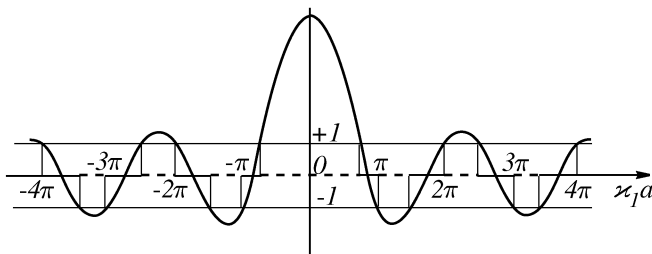


Рис. 11.

2. Найти закон дисперсии для одномерного движения частицы в слабом периодическом поле $U(x)$.

Решение. Рассматривая поле как малое возмущение, исходим из нулевого приближения, в котором частица совершает свободное движение, описываемое плоской волной

$$\psi^{(0)}(x) = (Na)^{-1/2} e^{ikx}$$

(нормировка на 1 частицу на длине Na ; a — период поля); энергия частицы $\varepsilon^{(0)} = \hbar^2 k^2 / 2m$. Представим периодическую функцию $U(x)$ в виде ряда Фурье

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_n e^{2\pi i n x / a}.$$

Матричные элементы этого поля по отношению к плоским волнам отличны от нуля только для переходов между состояниями с волновыми векторами k и $k' = k + 2\pi n/a$ и в этих случаях равны $U_{k'k} = U_n$.

В первом приближении теории возмущений поправка к энергии дается диагональным матричным элементом $\varepsilon^{(1)} = U_{kk} = U_0$, т. е. не зависящей от k постоянной, лишь смещающей начало отсчета энергий. Исключение составляют, однако, уровни энергии в окрестности значений $k = \pi n/a$ ($n = \pm 1, \pm 2, \dots$). В этих точках k отличается лишь знаком от значения $k' = k - 2\pi n/a$, так что энергии $\varepsilon^{(0)}(k)$ и $\varepsilon^{(0)}(k')$ совпадают. В окрестности этих значений, следовательно, отличны от нуля матричные элементы для переходов между состояниями с близкими энергиями, и для определения поправки должен быть использован метод теории возмущений, относящийся к случаю близких собственных значений (см. III, § 79). Ответ дается формулой (79.4) (см. III), согласно которой в данном случае

$$\varepsilon_n(k) = \frac{1}{2}[\varepsilon^{(0)}(k) + \varepsilon^{(0)}(k - K_n)] \pm \left\{ \frac{1}{4}[\varepsilon^{(0)}(k) - \varepsilon^{(0)}(k - K_n)]^2 + |U_n|^2 \right\}^{1/2},$$

где $K_n = 2\pi n/a$, а аддитивная постоянная U_0 опущена; выбор знака перед корнем определяется требованием, чтобы вдали от значения $k = \pm K_n/2$ функция $\varepsilon(k)$ переходила бы в $\varepsilon^{(0)}(k)$: знаки + и - относятся соответственно к областям $|k| > |K_n/2|$ и $|k| < |K_n/2|$. В самих точках $k = \pm K_n/2$ функция $\varepsilon(k)$ испытывает скачок, равный $2|U_n|$. На рис. 12 а энергия $\varepsilon(k)$ изображена как функция переменной k , пробегающей значения от $-\infty$ до ∞ . Если же привести значения k (квазиимпульса) к интервалу между $\pm\pi/a$, то мы приходим к рис. 12 б, где изображены две первые энергетические зоны.

Обратим внимание на то, что зоны на рис. 12 (как и на рис. 11) не перекрываются. Это общее свойство одномерного движения в периодическом поле. Каждый уровень энергии двукратно вырожден (по знаку k), а большая кратность вырождения при одномерном движении вообще невозможна. Отметим, что в одномерном случае границы каждой зоны (минимальные и максимальные значения $\varepsilon(k)$) соответствуют значениям $k = 0$ и $k = \pi/a$. Дело в том, что волновые функции, соответствующие энергиям в запрещенном интервале, умножаются при смещении на период a на некоторый вещественный множитель (в силу чего и возрастают неограниченно на бесконечности). Волновые же функции в разрешенных интервалах энергии при таком переносе умножаются на e^{ika} . На границе между запрещенным и разрешенным интервалами этот множитель, следовательно, должен быть одновременно вещественным и равным по модулю единице, откуда и следует равенство ka нулю или π .

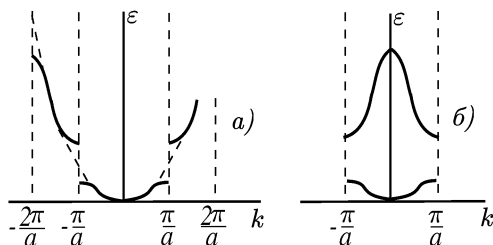


Рис. 12.

3. Найти закон дисперсии частицы в одномерном периодическом поле, представляющем собой последовательность симметричных потенциальных ям, удовлетворяющих условию квазиклассичности (ввиду чего вероятность проникновения частицы через барьер между ямами мала).

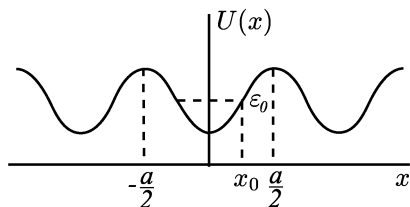


Рис. 13.

Решение аналогично ходу решения задачи о расщеплении уровней в двойной яме (см. III, § 50, задача 3). Пусть $\psi_0(x)$ — нормированная волновая функция, описывающая движение (с некоторой энергией ε_0 , рис. 13) в одной из ям, т. е. экспоненциально затухающая в обе стороны от границ этой ямы; эта функция вещественна и может быть четной или нечетной по переменной x . Правильная же волновая функция нулевого приближения для

движения частицы в периодическом поле представляет собой сумму

$$\psi_k(x) = C \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ikan} \psi_0(x - an), \quad (1)$$

где C — нормировочная постоянная (при сдвиге $x \rightarrow x + a$ эта функция умножается, как и следовало, на e^{ika}).

Пишем уравнения Шредингера

$$\psi_k'' + \frac{2m}{\hbar^2} [\varepsilon(k) - U(x)] \psi_0 = 0, \quad \psi_0'' + \frac{2m}{\hbar^2} [\varepsilon_0 - U(x)] \psi_0 = 0,$$

умножаем первое на ψ_0 , второе на ψ_k , вычитаем почленно и интегрируем по dx в пределах от $-a/2$ до $a/2$ (рис. 13). Замечаем, что поскольку произведения $\psi_0(x)\psi_0(x - an)$ с $n \neq 0$ исчезающе малы везде, то

$$\int_{-a/2}^{a/2} \psi_k(x) \psi_0(x) dx \approx C.$$

Находим

$$\varepsilon(k) - \varepsilon_0 = \frac{\hbar}{2mC} [\psi_0' \psi_k - \psi_0 \psi_k']_{-a/2}^{a/2}.$$

При $x = a/2$ в сумме (1) должны быть сохранены лишь члены с $n = 0$ и $n = 1$, причем $\psi_0(-a/2) = \pm \psi_0(a/2)$ в зависимости от четности или нечетности функции $\psi_0(x)$:

$$\begin{aligned} \psi_k(a/2) &= C \psi_0(a/2) (1 \pm e^{ika}), \\ \psi_k'(a/2) &= C \psi_0'(a/2) (1 \mp e^{ika}); \end{aligned}$$

аналогичным образом, при $x = -a/2$ должны быть сохранены лишь члены с $n = 0$ и $n = -1$. В результате получим

$$\varepsilon(k) - \varepsilon_0 = \pm \frac{2\hbar^2}{m} \psi_0\left(\frac{a}{2}\right) \psi_0'\left(\frac{a}{2}\right) \cos ka.$$

Сюда надо подставить значения

$$\begin{aligned} \psi_0\left(\frac{a}{2}\right) &= \left[\frac{m\omega}{2\pi p(a/2)} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{a/2} |p(x)| dx \right], \\ \psi_0'\left(\frac{a}{2}\right) &= \frac{p(a/2)}{\hbar} \psi_0\left(\frac{a}{2}\right), \end{aligned}$$

где ω — классическая частота колебаний частицы в яме; x_0 — точка поворота, отвечающая энергии ε_0 . Окончательно:

$$\varepsilon(k) - \varepsilon_0 = \pm \frac{\hbar\omega}{\pi} \sqrt{D} \cos ka, \quad D = \exp \left[-\frac{4}{\hbar} \int_{x_0}^{a/2} |p(x)| dx \right].$$

Таким образом, каждый уровень энергии ε_0 , отвечающий движению частицы в изолированной яме, расширяется в узкую полосу (зону) с шириной $2\hbar\omega D^{1/2}/\pi$, определяемой коэффициентом проницаемости D потенциально-го барьера, разделяющего две ямы.

§ 56. Влияние внешнего поля на движение электрона в решетке

Рассмотрим движение электрона при наложении на решетку постоянного магнитного поля **H**. Если исходить из гамильтониана электрона в периодическом поле $U(\mathbf{r})$ в координатном представлении:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}), \quad (56.1)$$

(где $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ — оператор истинного импульса), то введение внешнего магнитного поля осуществляется обычным образом:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r}), \quad (56.2)$$

где $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ — векторный потенциал поля. Задача, однако, радикально упрощается — в случае достаточно слабого поля — путем перехода к квазиимпульсному представлению.

Ввиду большого разнообразия в возможных видах зонной структуры энергетического спектра электрона в решетке условие малости внешнего поля может быть сформулировано в общем виде лишь довольно грубым образом. Пусть электрон до включения поля находится в некоторой определенной (s -й) зоне. Обозначим через ε_0 наименьшую из энергетических величин, характеризующих эту зону, — ее характерную ширину или расстояние до соседних зон (т. е. разностей $\varepsilon_s(\mathbf{k}) - \varepsilon_{s'}(\mathbf{k})$ при заданных $\mathbf{k}$). Для того чтобы магнитное поле можно было считать слабым, во всяком случае должно выполняться условие

$$\hbar\omega_H \ll \varepsilon_0, \quad (56.3)$$

где «ларморова частота» $\omega_H \sim |e| H / m^* c$, а $m^* \sim \hbar k / v$ — эффективная масса электрона¹⁾.

В отсутствие внешнего поля гамильтониан электрона в решетке в $\mathbf{k}$ -представлении есть, как уже указывалось, диагональная матрица с элементами $\varepsilon_s(\mathbf{k})$. В присутствии поля гамильтониан будет содержать также и потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ и его производные по координатам — напряженность $\mathbf{H}$ (а в неоднородном поле — также и дальнейшие производные от напряженности); в $\mathbf{k}$ -представлении функция $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ заменяется оператором $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})$, где $\hat{\mathbf{r}}$ — оператор (55.14).

Потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ есть возрастающая (для однородного поля — по линейному закону) функция координат. Ввиду этого возрастания потенциал, даже для слабого поля, отнюдь не является малым возмущением в гамильтониане неограниченной системы (электрон в решетке). Именно поэтому уже слабое магнитное поле существенно меняет свойства протяженной системы — превращает непрерывный спектр в дискретный (квантует уровни, см. § 58). Напряженность же слабого поля (в отличие от потенциала) приводит к малым поправкам.

Покажем, что в пренебрежении этими поправками зависимость гамильтониана от потенциала поля можно выяснить в общем виде исходя из одних только требований калибровочной инвариантности. Поскольку мы рассматриваем постоянные поля, то достаточно использовать инвариантность уравнений относительно не зависящих от времени преобразований потенциала и волновых функций вида

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f, \quad \psi \rightarrow \psi \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} f\right), \quad (56.4)$$

где $f(\mathbf{r})$ — произвольная функция координат (см. III, (111.8), (111.9)).

В слабом поле потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ — медленно меняющаяся функция координат. Имея в виду выяснение роли этой медленности, рассмотрим сначала предельный случай постоянного потенциала: $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \text{const} \equiv \mathbf{A}$ (разумеется, постоянный потенциал фиктивен — реальное поле при этом отсутствует, так что речь идет о формальном преобразовании). Переход от $\mathbf{A} = 0$ к $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0$ эквивалентен преобразованию (56.4) с $f = \mathbf{A}_0 \mathbf{r}$; поэтому вместо

¹⁾ Более точное определение частоты дается ниже формулой (57.7). Для электронов проводимости в металле (см. ниже § 61) характерные значения $k \sim 1/a$ (a — постоянная решетки); положив также $\varepsilon_0 \sim \hbar^2 / m^* a^2$, найдем, что условие (56.3) эквивалентно неравенству $r_H \gg a$, где «радиус орбиты» $r_H \sim v / \omega_H$.

исходных (при $\mathbf{A} = 0$) собственных функций

$$\psi_{s\mathbf{k}} = u_{s\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (56.5)$$

собственными функциями нового гамильтониана будут

$$u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp \left\{ i \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_0 \right) \mathbf{r} \right\}.$$

Отсюда видно, что для придания квазиимпульсу прежнего смысла (величины, определяющей изменение фазы волновой функции при трансляциях) надо положить $\mathbf{k} + e\mathbf{A}_0/\hbar c = \mathbf{K}$; определенную таким образом величину $\mathbf{K}$ можно назвать *обобщенным квазиимпульсом*. Тогда новые собственные функции запишутся в виде

$$\psi_{s\mathbf{K}} = u_{s, \mathbf{K} - e\mathbf{A}_0/\hbar c}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}},$$

а соответствующие им значения энергии электрона: $\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \varepsilon_s(\mathbf{K} - e\mathbf{A}_0/\hbar c)$. Мы можем теперь утверждать, что при не постоянном, но медленно меняющемся в пространстве потенциале $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ волновые функции «нулевого» (по напряженности поля) приближения будут

$$\psi_{s\mathbf{K}} = u_{s, \mathbf{K} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})/\hbar c} e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}}, \quad (56.6)$$

(причем функции u , благодаря переменности $\mathbf{A}$, уже не являются строго периодическими)¹⁾. Энергии же $\varepsilon_s(\mathbf{K} - e\mathbf{A}/\hbar c)$ надо рассматривать теперь как операторы, образующие гамильтониан в $\mathbf{K}$ -представлении. При этом, в том же приближении, под $\hat{\mathbf{r}}$ надо понимать оператор $\hat{\mathbf{r}} = i\partial/\partial\mathbf{K}$, опустив второй член ($\hat{\Omega}$) в определении (55.14). Действительно, при воздействии на волновую функцию оператор $i\partial/\partial\mathbf{K}$, по порядку величины, умножает ее на «размер орбиты» r_H , возрастающий при уменьшении поля; результат же воздействия оператора $\hat{\Omega}$ на волновую функцию такого возрастающего множителя не содержит. В этом смысле в слабом поле оператор $\hat{\Omega}$ мал по сравнению с $i\partial/\partial\mathbf{K}$. Поскольку, с другой стороны, оператор $\partial/\partial\mathbf{K}$ диагонален по номерам зон, то оказывается диагональным и гамильтониан.

¹⁾ Если разложить функции (56.6) по функциям $\psi_{s\mathbf{k}}$, то в разложение войдут, вообще говоря, функции с различными s . Подчеркнем, однако, что это отнюдь не означает реального перехода в другую зону, а выражает лишь изменение волновой функции под влиянием постоянного поля; напомним в этой связи, что постоянное поле вообще не может вызвать реальный переход с изменением энергии. Для уяснения ситуации следует заметить, что хотя поле слабо, но связанное с ним изменение классификации состояний (в том числе соответствия между квазиимпульсом и энергией) значительно.

Таким образом, мы приходим к результату, что движение электрона в решетке в слабом магнитном поле описывается гамильтонианом (в $\mathbf{K}$ -представлении)

$$\hat{H}_s = \varepsilon_s \left(\mathbf{K} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) \right), \quad \hat{\mathbf{r}} = i \frac{\partial}{\partial \mathbf{K}} \quad (56.7)$$

(*R. Peierls*, 1933). В этом приближении, следовательно, имеется полная аналогия со способом введения магнитного поля в гамильтониан свободной частицы в импульсном представлении.

Выражение (56.7) еще не вполне определено, так как не установлен порядок действия некоммутативных операторов — компонент вектора $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{K} - e\hat{\mathbf{A}}/\hbar c$. Он должен быть определен так, чтобы обеспечить эрмитовость гамильтониана. Этого можно, в принципе, всегда достичь, представив периодическую (в обратной решетке) функцию $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ в виде ряда Фурье

$$\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{a}} A_{s\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}} \quad (56.8)$$

(суммирование по всем векторам $\mathbf{a}$ прямой решетки). После замены $\mathbf{k} \rightarrow \hat{\mathbf{k}}$ в показателе каждого члена этого ряда будет стоять только один оператор (проекция вектора $\hat{\mathbf{A}}$ на $\mathbf{a}$), так что вопрос о порядке действия не возникает — все сводится к степеням этого одного оператора. Такой способ «эрмитизации», конечно, не единствен. Существенно, однако, что разница между различными способами лежит за пределами рассматриваемого приближения, поскольку коммутаторы операторов $\hat{k}_x$, $\hat{k}_y$, $\hat{k}_z$, в этом приближении представляют собой малые величины. Так, для однородного поля оператор

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2} [\mathbf{H}\hat{\mathbf{r}}] = \frac{i}{2} \left[\mathbf{H} \frac{\partial}{\partial \mathbf{K}} \right]; \quad (56.9)$$

прямым вычислением легко найти, что коммутаторы

$$\hat{k}_x \hat{k}_y - \hat{k}_y \hat{k}_x = i \frac{e}{\hbar c} H_z, \dots \quad (56.10)$$

пропорциональны малой напряженности $\mathbf{H}$.

Операторы $\hat{\mathbf{r}} = i\partial/\partial\mathbf{K}$ и $\hat{\mathbf{K}} \equiv \mathbf{K}$ имеют те же правила коммутации, что и координаты и обобщенные импульсы «свободной» (без решетки) частицы. Естественно поэтому, что вычисление коммутаторов операторов $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{K}}$ с гамильтонианом приводит к операторным уравнениям

$$\hbar \hat{\mathbf{K}} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{\mathbf{r}}}, \quad \hat{\mathbf{r}} = \frac{\partial \hat{H}}{\hbar \partial \mathbf{K}}, \quad (56.11)$$

имеющим вид обычных уравнений Гамильтона (для вычисления — см. формулы (16.4), (16.5) (см. III)).

Снова повторим, что гамильтониан (56.7) является приближенным в том смысле, что в нем отброшены все члены, зависящие от напряженности $\mathbf{H}$ и не содержащие больших множителей — порядка величины размеров орбиты r_H . В следующих приближениях ответ тоже может быть представлен в виде некоторого эффективного гамильтониана $\hat{H}_s(\mathbf{K} - e\hat{\mathbf{A}}/\hbar c, \mathbf{H})$, диагонального по номерам зон, но уже не выражающегося через одни только функции $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ ¹.

В пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием, учет спина электрона приводит в гамильтониане к появлению обычного члена, описывающего взаимодействие магнитного момента с полем: $-\beta\sigma\mathbf{H}$, где σ — матрицы Паули, а $\beta = |e|\hbar/2mc$ — магнетон Бора. Если кристалл обладает центром инверсии, спин-орбитальное взаимодействие только меняет магнитный момент электрона, так что взаимодействие спина с магнитным полем приобретает вид

$$-\beta\sigma_i H_k \xi_{ik}(\mathbf{k}). \quad (56.12)$$

Действительно, в этом случае гамильтониан должен быть инвариантен по отношению к одновременным операциям обращения времени и инверсии. При этом преобразовании надо заменить $\mathbf{H} \rightarrow -\mathbf{H}$ и $\sigma \rightarrow -\sigma$ при неизменном $\mathbf{k}$; (56.12) является общим выражением, удовлетворяющим поставленному требованию. Тензор $\xi_{ik}(\mathbf{k})$, разумеется, нельзя вычислить в общем виде.

Наконец, остановимся на поведении электрона при наложении на решетку слабого электрического поля $\mathbf{E}$. Условие слабости означает, что энергия, приобретаемая электроном в поле на расстоянии $\sim a$, мала по сравнению с характерной энергией $\varepsilon_0 : |e|Ea \ll \varepsilon_0$.

Как и в случае магнитного поля, наиболее важную роль играют члены, содержащие возрастающую функцию координат — скалярный потенциал электрического поля $\varphi(\mathbf{r})$. Зависимость гамильтониана от φ можно снова выяснить в общем виде исходя из соображений, аналогичных использованным выше. Действительно, включение фиктивного постоянного потенциала $\varphi = \varphi_0$ эквивалентно в уравнении Шредингера добавлению к энергии

¹) Простой пример вычисления поправочного члена будет дан в § 59. Изложение регулярного метода получения гамильтониана в виде ряда по степеням $\mathbf{H}$, а также общие выражения первых членов этого ряда даны в статьях: *E. I. Blount // Phys. Rev. 1962. V. 126. P. 1636; Solid Stste Physics. 1963. V. 13. P. 306*. Отметим, что если кристалл обладает центром инверсии, ряд начинается с членов порядка $\mathbf{H}^2$ (см. § 59).

постоянного слагаемого $e\varphi_0$; такое слагаемое добавится и ко всем собственным значениям $\varepsilon_s(\mathbf{k})$. При непостоянном же, но медленно меняющемся в пространстве потенциале $\varphi(\mathbf{r})$ аналогичный операторный член добавляется к эффективному гамильтониану в $\mathbf{k}$ -представлении:

$$\hat{H}_s = \varepsilon_s(\mathbf{k}) + e\varphi(\hat{\mathbf{r}}). \quad (56.13)$$

§ 57. Квазиклассические траектории

Применим полученные в предыдущем параграфе результаты к важному случаю, когда движение электрона в магнитном поле квазиклассично. Условие квазиклассичности состоит, как известно, в малости изменения де-Бройлевской длины волны частицы на расстояниях порядка ее самой. В данном случае это условие эквивалентно неравенству

$$r_H \gg \lambda \quad (57.1)$$

— радиус кривизны орбиты велик по сравнению с длиной волны $\lambda \sim 1/k^1$.

В квазиклассическом случае имеет смысл понятие траектории частицы. Она определяется уравнениями движения, получающимися из (56.11) заменой операторов соответствующими классическими величинами:

$$\hbar \dot{\mathbf{K}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}, \quad \mathbf{v} = \frac{\partial H}{\hbar \partial \mathbf{K}}, \quad H = \varepsilon \left(\mathbf{K} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)$$

(индекс s для краткости опускаем). Раскроем эти уравнения, введя вместо обобщенного квазиимпульса $\mathbf{K}$ «кинетический квазиимпульс»

$$\mathbf{k} = \mathbf{K} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}).$$

Имеем

$$\frac{\hbar dk}{dt} + \frac{e}{c} \frac{d\mathbf{A}(\mathbf{r})}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = \frac{e}{c} v_i \frac{\partial A_i}{\partial \mathbf{r}}.$$

Написав здесь $d\mathbf{A}/dt = (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{A}$ и заметив, что

$$(v_i \nabla) A_i - (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{A} = [\mathbf{v} \text{ rot } \mathbf{A}] = [\mathbf{v} \mathbf{H}],$$

¹) Это условие, вообще говоря, более сильное, чем условие (56.3). Но если $k \sim 1/a$ (как это имеет место для электронов проводимости в металле), то оба условия совпадают и фактически всегда выполняются: при $r_H \sim \hbar k / |e| H \sim \hbar / a |e| H$ условие $r_H \gg a$ приводит к требованию $H \ll \hbar / |e| a^2 \sim 10^8 - 10^9$ Э.

получим уравнение движения

$$\frac{\hbar d\mathbf{k}}{dt} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{H}], \quad \mathbf{v} = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}}. \quad (57.2)$$

Это уравнение отличается от обычного классического уравнения Лоренца лишь другой зависимостью $\varepsilon(\mathbf{k})$: вместо простой квадратичной функции мы имеем дело со сложной периодической функцией; соответственно сложной периодической функцией является и зависимость $\mathbf{v}(\mathbf{k})$. Это обстоятельство приводит, естественно, к существенному изменению характера движения электрона.

Рассмотрим движение электрона в однородном магнитном поле. Умножив уравнение (57.2) на $\mathbf{v}$, найдем обычным образом: $\hbar \mathbf{v} d\mathbf{k}/dt = d\varepsilon/dt = 0$. Умножив же уравнение (57.2) на $\mathbf{H}$, найдем, что $d(\mathbf{H}\mathbf{k})/dt = 0$. Таким образом, при движении электрона в решетке, как и при движении свободного электрона в магнитном поле:

$$\varepsilon = \text{const}, \quad k_z = \text{const} \quad (57.3)$$

(ось z — в направлении поля $\mathbf{H}$). Равенства (57.3) определяют траекторию электрона в $\mathbf{k}$ -пространстве. Геометрически эта траектория представляет собой контур сечения изоэнергетической поверхности $\varepsilon(\mathbf{k}) = \text{const}$ плоскостью, перпендикулярной магнитному полю.

Изоэнергетические поверхности могут иметь самую разнообразную форму. Они могут содержать (в каждой ячейке обратной решетки) несколько не связанных друг с другом листов. Эти листы могут быть односвязными или многосвязными, закрытыми или открытыми. Для уяснения последнего различия удобно рассматривать изоэнергетическую поверхность, периодически продолженную по всей обратной решетке. В каждой ячейке будут находиться одинаковые замкнутые полости, а открытые поверхности проходят непрерывным образом через всю решетку, уходя на бесконечность¹⁾.

Сечения изоэнергетической поверхности складываются из бесконечного множества контуров. Сюда относятся как контуры сечения различных листов изоэнергетической поверхности в пределах одной ячейки обратной решетки, так и контуры сечения листов, повторяющихся в различных ячейках. Если лист изоэнергетической поверхности замкнут, то и все его сечения

¹⁾ Отметим, во избежание недоразумений, что может оказаться невозможным выбрать ячейку обратной решетки таким образом, чтобы все существенно различные (т. е. не являющиеся периодическими повторениями) замкнутые полости были расположены внутри одной ячейки без того, чтобы быть рассеянными ее гранями.

представляют собой замкнутые кривые. Если же лист открытый, то его сечения могут быть как замкнутыми, так и открытыми (т. е. непрерывно продолжающимися через всю обратную решетку).

Квазиклассичность движения подразумевает также и малость вероятности *магнитного пробоя* — скачкообразного изменения квазиимпульса электрона с переходом его с одного контура на другой (к условию этой малости мы вернемся в конце параграфа). В пренебрежении этой вероятностью, следовательно, электрон движется лишь по одному контуру сечения изоэнергетической поверхности.

Рассмотрим более подробно движение по замкнутым траекториям в квазиимпульсном пространстве. Такое движение, очевидно, периодически во времени; определим его период.

Проецируя уравнение (57.2) на перпендикулярную полю плоскость k_x, k_y , получим

$$\frac{dl_k}{dt} = \frac{|e|H}{c\hbar} v_{\perp}, \quad v_{\perp} = \sqrt{v_x^2 + v_y^2},$$

где $dl_k = \sqrt{dk_x^2 + dk_y^2}$ — элемент длины $\mathbf{k}$ -орбиты. Отсюда

$$t = \frac{c\hbar}{|e|H} \int \frac{dl_k}{v_{\perp}}.$$

Если траектория замкнута, то период движения дается интегралом

$$T = \frac{c\hbar}{|e|H} \oint \frac{dl_k}{v_{\perp}}, \quad (57.4)$$

взятым по всему ее контуру. Это выражение можно преобразовать к более наглядному виду следующим образом.

Введем площадь $S(\varepsilon, k_z)$ сечения изоэнергетической поверхности $\varepsilon = \text{const}$ плоскостью $k_z = \text{const}$. Ширина кольца в этой плоскости между контурами $\varepsilon = \text{const}$ и $\varepsilon + d\varepsilon = \text{const}$ составляет в каждой его точке

$$\frac{d\varepsilon}{|\partial\varepsilon/\partial\mathbf{k}_{\perp}|} = \frac{d\varepsilon}{\hbar v_{\perp}},$$

так что площадь этого кольца

$$dS = d\varepsilon \oint \frac{dl_k}{\hbar v_{\perp}}.$$

Отсюда видно, что интеграл в (57.4) представляет собой не что иное, как частную производную $\partial S/\partial\varepsilon$. Таким образом, период движения

$$T = \frac{c\hbar^2}{|e|H} \frac{\partial S(\varepsilon, k_z)}{\partial\varepsilon} \quad (57.5)$$

(*W. Shockley*, 1950). Здесь естественно ввести величину

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon}, \quad (57.6)$$

которую называют *циклотронной массой* электрона в решетке. Частота обращения электрона по орбите выражается через эту величину согласно формуле

$$\omega_H = |e| \hbar / m^* c, \quad (57.7)$$

отличающейся от известной формулы для ларморовой частоты свободных электронов заменой их массы на m^* ¹⁾.

Подчеркнем, однако, что в случае электронов в решетке циклотронная масса — не постоянная величина, а функция ε и k_z , так что она различна для разных электронов. Отметим также, что эта величина может быть как положительной, так и отрицательной; в первом случае электрон движется по орбите как отрицательно заряженная, а во втором — как положительно заряженная частица — дырка. Соответственно этому говорят об *электронных* и *дырочных траекториях*.

До сих пор мы говорили о траектории электрона в **k**-пространстве. Легко видеть, однако, что существует тесная связь между траекториями в квазиимпульсном и обычном пространствах. Уравнение движения (57.2), переписанное в виде

$$\hbar d\mathbf{k} = -\frac{|e|\hbar}{c} [d\mathbf{r} \mathbf{H}],$$

после интегрирования (и надлежащего выбора начала отсчета координат **r** и квазиимпульсов **k**), дает

$$\hbar \mathbf{k} = -\frac{|e|\hbar}{c} [\mathbf{r} \mathbf{H}]. \quad (57.8)$$

Отсюда видно, что *xy*-проекция орбиты в обычном пространстве по существу повторяет **k**-траекторию, отличаясь от нее лишь ориентацией и масштабом: первая получается из второй заменой

$$k_x \rightarrow -\frac{|e|\hbar}{\hbar c} y, \quad k_y \rightarrow -\frac{|e|\hbar}{\hbar c} x.$$

Кроме того, в обычном пространстве имеется движение вдоль оси *z* со скоростью $v_z = \partial \varepsilon / \hbar \partial k_z$. Если траектория в **k**-пространстве замкнута, то в обычном пространстве она представляет собой спираль с осью вдоль направления поля. Если же траектория

¹⁾ Для свободного электрона изоэнергетическая поверхность — сфера $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$. Ее сечения — круги с площадью $S = \pi(2m\varepsilon \hbar^{-2} - k_z^2)$, так что производная $\partial S / \partial \varepsilon = 2\pi m / \hbar^2$ и $m^* = m$.

открытая, то открыта также и проекция траектории на плоскости xy в обычном пространстве, т. е. движение в этой плоскости инфинитно.

Скажем еще несколько слов о квазиклассическом движении электрона при наложении на решетку постоянного однородного электрического поля $\mathbf{E}$. Из квазиклассического уравнения $\hbar \dot{\mathbf{k}} = e\mathbf{E}$ имеем

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \frac{e\mathbf{E}}{\hbar}t. \quad (57.9)$$

Из закона же сохранения энергии имеем

$$\varepsilon(\mathbf{k}) - e\mathbf{E}\mathbf{r} = \text{const.} \quad (57.10)$$

Но энергия $\varepsilon(\mathbf{k})$ пробегает значения в конечном интервале $\Delta\varepsilon$ (ширина зоны); поэтому из (57.10) следует, что движение электрона в однородном электрическом поле финитно вдоль поля: электрон совершает в этом направлении колебания с амплитудой $\Delta\varepsilon/|e|E$. Если поле параллельно какому-либо периоду $\mathbf{b}$ обратной решетки, то движение периодически с частотой $\omega = 2\pi|e|E/\hbar b$; при $b \sim 1/a$ имеем $\hbar\omega_E \sim |e|Ea$. В общем случае произвольного направления поля движение квазипериодично.

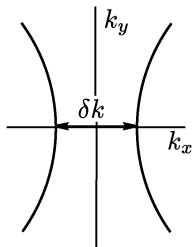


Рис. 14.

Наконец, остановимся на условии возможности пренебречь упомянутым выше явлением магнитного пробыа. Вероятность перехода с одной траектории (в $\mathbf{k}$ -пространстве) на другую, естественно, велика, если эти траектории где-либо подходят anomalously близко друг к другу. Такая ситуация возникает в случае, когда траектория близка к траектории с самопересечением, либо если траектория проходит вблизи пересечения двух листов изоэнергетической поверхности (т. е. вблизи точки вырождения). Типичная картина траекторий в таких случаях изображена на рис. 14; разрыв δk между траекториями мал по сравнению с характерными размерами орбит в целом, а радиус кривизны R_k траекторий вблизи точек их максимального сближения по порядку величины совпадает, вообще говоря, с δk . Переход с одной орбиты на другую происходит путем квантового туннелирования. Вероятность этого процесса мала (экспоненциально), если δk велико по сравнению с расстоянием Δk_x , на котором затухает волновая функция в классически недоступной области между траекториями.

Оценку Δk_x можно получить, воспользовавшись аналогией между движением электрона в магнитном поле и одномерным движением в некотором потенциальном поле $U(x)$. Эта

аналогия основана на том, что согласно (56.10), операторы $\hat{q} \equiv \hat{k}_x \hbar c / |e| H$ и $\hat{p} \equiv \hbar \hat{k}_y$ удовлетворяют правилу коммутации, совпадающему с правилом коммутации координаты и импульса. Вблизи точек максимального сближения траектории параболические; им аналогична параболическая фазовая (x, p) траектория одномерного движения в однородном поле ($U = -Fx$), уравнение которой $p^2/2m = Fx$ (если координата x отсчитывается от точки остановки). В последнем случае волновая функция затухает за точкой поворота на расстоянии $\Delta x \sim (\hbar^2/mF)^{1/3}$ (см. III, § 24); введя радиус кривизны фазовой траектории $R \sim (d^2x/dp^2)^{-1} \sim mF$, напомним $\Delta x \sim (\hbar^2/R)^{1/3}$. По указанной аналогии искомое Δk_x можно получить путем замены $\Delta x \rightarrow \hbar c \Delta k_x / |e| H$, $R \rightarrow R_k \hbar |e| H / c$. Таким образом, находим $\Delta k_x \sim (|e| H / \hbar c)^{2/3} (\delta k)^{-1/3}$, и условие $\Delta k \ll \delta k$ принимает вид

$$|e| H / \hbar c \ll (\delta k)^2. \quad (57.11)$$

§ 58. Квазиклассические уровни энергии

Мы видели, что классическому движению электрона в решетке в магнитном поле по замкнутой траектории в $\mathbf{k}$ -пространстве отвечает в обычном пространстве движение, финитное в плоскости, перпендикулярной направлению поля $\mathbf{H}$. При переходе к квантовой механике это приводит к возникновению дискретных уровней энергии при каждом фиксированном значении продольного квазиимпульса k_z . Эти уровни определяются общими правилами квазиклассического квантования.

Выберем векторный потенциал однородного магнитного поля (направленного вдоль оси z) в виде $A_x = -Hy$, $A_y = A_z = 0$. Тогда компоненты обобщенного квазиимпульса

$$K_x = k_x + \frac{|e|}{c\hbar} Hy, \quad K_y = k_y, \quad K_z = k_z. \quad (58.1)$$

Координата x является циклической переменной, и поэтому x -компонента обобщенного квазиимпульса сохраняется:

$$K_x = k_x + \frac{|e|}{c\hbar} Hy = \text{const.} \quad (58.2)$$

Согласно правилу квантования Бора–Зоммерфельда (см. III, § 48), пишем условие

$$\frac{1}{2\pi} \left| \oint K_y dy \right| = n, \quad (58.3)$$

где интегрирование распространено по периоду движения, а n — целое положительное число, предполагаемое большим¹⁾. Подставив сюда, согласно (58.1), (58.2), $K_y = k_y$ и $dy = -(c\hbar/|e|H) dk_x$, получим

$$\frac{c\hbar}{2\pi|e|H} \left| \oint k_y dk_x \right| = n, \quad (58.4)$$

где теперь интеграл берется по замкнутой траектории в $\mathbf{k}$ -пространстве. Этот интеграл — не что иное, как охватываемая траекторией площадь, т. е. введенная в предыдущем параграфе площадь $S(\varepsilon, k_z)$ сечения изоэнергетической поверхности плоскостью $k_z = \text{const}$.

Таким образом, окончательно находим

$$S(\varepsilon, k_z) = 2\pi \frac{|e|H}{c\hbar} n \quad (58.5)$$

(И. М. Лифшиц, 1951; L. Onsager, 1952). Этим условием и определяются в неявном виде уровни энергии $\varepsilon_n(k_z)$. Таким образом, энергетическая зона (номер s которой мы для краткости не выписываем) распадается на дискретный ряд *подзон Ландау*, каждая из которых представляет собой полосу уровней энергии, отличающихся значением непрерывной переменной k_z .

Как известно, квазиклассическое условие квантования может быть уточнено введением поправки, сводящейся к прибавлению к большому квантовому числу n числа порядка единицы. Определение этой поправки требует рассмотрения движения вблизи «точек остановки», ограничивающих область интегрирования в (58.3).

Зависимость $K_y = k_y$ от y на траектории электрона определяется уравнением

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon \left(K_x - \frac{|e|H}{c\hbar} y, k_y, k_z \right) = \text{const} \quad (58.6)$$

при заданном значении k_z и при $K_x = \text{const}$; точка остановки $y = y_0$ определяется условием обращения в нуль скорости $v_y = \partial\varepsilon/\hbar\partial k_y$. Вблизи этой точки разложение уравнения (58.6)

¹⁾ При движении в однородном магнитном поле адиабатическим инвариантом, не зависящим от выбора векторного потенциала, является интеграл $\frac{1}{2\pi} \oint \mathbf{K}_t d\mathbf{r}$, где $\mathbf{K}_t$ — проекция обобщенного квазиимпульса на плоскость, перпендикулярную полю (ср. II, § 21). При сделанном выборе $\mathbf{A}$ интеграл $\oint K_x dx = K_x \oint dx = 0$, так что адиабатический инвариант совпадает с интегралом в (58.3).

по степеням $y - y_0$ дает

$$-\frac{|e|H}{c\hbar} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_x} \right)_0 (y - y_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_y^2} \right)_0 (k_y - k_{y0})^2 = 0,$$

где $k_{y0} = k_y(y_0)$. Отсюда видно, что приближение к точке остановки происходит по корневому закону

$$k_y - k_{y0} = \pm A \sqrt{y - y_0}$$

(для определенности считаем, что классически недоступная область лежит при $y < y_0$). Но это — тот самый закон, к которому относится обычный вывод поправки в квазиклассическом квантовании (см. III, § 47, 48). Уточненное правило (58.5) имеет, следовательно, вид

$$S(\varepsilon, k_z) = 2\pi \frac{|e|H}{c\hbar} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (58.7)$$

Как это ясно из вывода (основанного на разложении функции (58.6)), для справедливости уточненного правила квантования необходимо, чтобы траектория проходила в достаточном удалении от особых точек функции $\varepsilon(\mathbf{k})$ (в том числе от комплексных точек ветвления). Необходимо также, чтобы нигде вблизи траектории не нарушалось условие квазиклассичности (в частности — не обращалась в нуль x, y -проекция скорости $\partial \varepsilon / \partial \mathbf{k}$)¹). Наконец, надо иметь в виду приближенность самого гамильтониана (56.7), на котором основаны все выводы. Если решетка обладает центром инверсии, то поправки к гамильтониану квадратичны по напряженности поля и не отражаются на условии (58.7). Но если центр инверсии отсутствует, то поправки к гамильтониану линейны по $\mathbf{H}$; в этом случае поправочный член $1/2$ в (58.7) теряет смысл, так как погрешность того же порядка дает и приближенность гамильтониана²).

Интервал $\Delta \varepsilon$ между двумя последовательными уровнями отвечает изменению большого числа n на единицу. Он определяется, следовательно, равенством

$$\Delta S = \frac{\partial S}{\partial \varepsilon} \Delta \varepsilon = \frac{2\pi |e| H}{\hbar c}. \quad (58.8)$$

¹) Вблизи точек аномального сближения двух траекторий эти условия совпадают с требованием малости вероятности магнитного пробоя.

²) Для свободных электронов (см. примечание на с. 305) условие (58.7) дает

$$\varepsilon = \hbar \omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right) + \hbar^2 k_z^2 / 2m, \quad \omega_H = |e| H / mc$$

в согласии с известным выражением Ландау для свободного электрона в магнитном поле (III, § 112).

Введя классическую частоту периодического движения ω_H , согласно (57.7), получим

$$\Delta\varepsilon = \hbar\omega_H. \quad (58.9)$$

Подчеркнем, что частота ω_H сама есть функция ε (и k_z). Поэтому последовательные уровни энергии ε_n (при заданном k_z) не являются строго эквидистантными, как это было бы в случае свободных электронов, где ω_H есть постоянная величина.

Независимость уровней энергии от сохраняющейся величины K_x означает (как и для свободных электронов в магнитном поле — см. III, § 112) их вырождение. Если представлять себе решетку, обладающей большим, но конечным объемом V , то кратность этого вырождения будет конечной. Число состояний в интервале dk_z и с заданным значением n определяется как $V\Delta S \cdot dk_z / (2\pi)^3$, где ΔS — площадь в плоскости $k_z = \text{const}$, заключенная между траекториями с квантовыми числами n и $n+1$. Эта площадь дается выражением (58.8), и, таким образом, находим для искомого числа состояний выражение

$$\frac{V dk_z}{(2\pi)^2} \frac{|e|H}{c\hbar} \quad (58.10)$$

— то же самое, что и в случае свободных электронов.

Наглядная причина вырождения уровней в магнитном поле заключается в независимости энергии от положения в пространстве «центра ларморовской орбиты» электрона. Для свободного электрона это вырождение является точным. Для электрона же в решетке оно может быть лишь приближенным: в виду наличия неоднородного (периодического) электрического поля различные положения «центра орбиты» в элементарной ячейке решетки уже не эквивалентны. Это обстоятельство должно приводить к некоторому расщеплению уровней Ландау.

Учет спина электрона приводит к расщеплению каждого уровня на две компоненты; в пренебрежении спин-орбитальной связью эти компоненты разделены (как и для свободного электрона) постоянным интервалом $2\beta H$, где β — магнетон Бора:

$$\varepsilon_{n\sigma}(k_z) = \varepsilon_n(k_z) + \sigma\beta H, \quad \sigma = \pm 1. \quad (58.11)$$

Такая ситуация остается и при учете спин-орбитального взаимодействия, если кристалл обладает центром инверсии. В этом случае состояния электрона в отсутствие поля вырождены по спину, а магнитное поле снимает это вырождение. В результате получается та же формула (58.11) с заменой β на $\beta\xi_n(k_z)$, где $\xi_n(k_z)$ характеризует изменение магнитного момента электрона.

§ 59. Тензор эффективных масс электрона в решетке

Рассмотрим точку $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ в $\mathbf{k}$ -пространстве, в которой энергия электрона $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ имеет экстремум; таковы, в частности, точки, отвечающие верху и низу зоны. Если в этой точке нет вырождения (за исключением лишь возможного крамеровского вырождения по спину — см. конец § 55), то в ее окрестности функция $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ может быть подвергнута регулярному разложению по степеням разности $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$. Первые члены такого разложения квадратичны:

$$\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \varepsilon_s(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} m_{ik}^{-1} q_i q_k. \quad (59.1)$$

Тензор m_{ik} , обратный тензору коэффициентов m_{ik}^{-1} в (59.1), называют *тензором эффективных масс* электрона в решетке. Покажем, каким образом можно выразить этот тензор через матричные элементы по отношению к блоховским функциям $\psi_{s\mathbf{k}_0}$ в точке $\mathbf{k}_0$.

В пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием гамильтониан электрона имеет вид (56.1). Подставим в уравнение Шредингера с этим гамильтонианом волновую функцию в виде

$$\psi_{s\mathbf{k}} = e^{i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{q})\mathbf{r}} u_{s\mathbf{k}} \equiv e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \varphi_{s\mathbf{k}}. \quad (59.2)$$

Тогда уравнение примет вид

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) + \left[\frac{\hbar}{m} \mathbf{q} \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right] \right\} \varphi_{s\mathbf{k}} = \varepsilon_s(\mathbf{k}) \varphi_{s\mathbf{k}}, \quad (59.3)$$

где $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ — оператор истинного импульса.

В окрестности точки $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ вектор $\mathbf{q}$ является малой величиной, и выражение в квадратной скобке в (59.3) можно рассматривать как оператор возмущения. В нулевом приближении, при $\mathbf{q} = 0$, функции $\varphi_{s\mathbf{k}}$ совпадают с функциями $\psi_{s\mathbf{k}_0}$. Поэтому обычная теория возмущений позволяет выразить поправку к энергии через матричные элементы по отношению к этим функциям.

Так как $\mathbf{k}_0$ — точка экстремума, то линейная по $\mathbf{q}$ поправка отсутствует. Это значит, что диагональные матричные элементы

$$\langle s\mathbf{k}_0 | \mathbf{p} | s\mathbf{k}_0 \rangle = 0. \quad (59.4)$$

Для определения квадратичной по $\mathbf{q}$ поправки надо учесть член с q^2 в операторе возмущения в первом, а член с $\mathbf{q}$ — во втором

порядке теории возмущений. В результате получим для $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ формулу (59.1), где

$$m_{ik}^{-1} = \frac{\delta_{ik}}{m} + \frac{1}{m^2} \sum'_{s'} \frac{(p_i)_{ss'}(p_k)_{s's} + (p_k)_{ss'}(p_i)_{s's}}{\varepsilon_{s'}(\mathbf{k}_0) - \varepsilon_s(\mathbf{k}_0)}; \quad (59.5)$$

суммирование производится по всем $s' \neq s$ ¹⁾. Для упрощения записи в обозначении матричных элементов здесь и ниже опускаем диагональный индекс $\mathbf{k}_0$: $\mathbf{p}_{ss'} \equiv \langle s\mathbf{k}_0 | \mathbf{p} | s'\mathbf{k}_0 \rangle$. Отметим, что при наличии близко расположенных зон (т. е. малых разностей $\varepsilon_{s'} - \varepsilon_s$) второй член в (59.5) может оказаться большим по сравнению с первым, в результате чего эффективные массы будут малы по сравнению с m .

Пусть теперь на кристалл наложено однородное магнитное поле $\mathbf{H}$. Тогда, согласно (56.7), гамильтониан, действующий на функции обобщенного квазиимпульса $\mathbf{Q}$, получается из (59.1) заменой $\mathbf{q}$ на оператор

$$\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{Q} - \frac{e}{\hbar c} \hat{\mathbf{A}}, \quad \hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2} \left[\mathbf{H} \cdot \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \right]. \quad (59.6)$$

Получающийся таким образом гамильтониан

$$\hat{H}_s^{(0)} = \varepsilon_s(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} m_{ik}^{-1} \hat{q}_i \hat{q}_k \quad (59.7)$$

пригоден, разумеется, лишь в той же области энергий, что и исходная формула (59.1). Это значит, что (помимо условия слабости поля (56.3)) предполагается, что рассматриваемые уровни Ландау расположены не слишком высоко. В этом смысле величины $\mathbf{q}$ и $\mathbf{Q}$ должны рассматриваться как малые (возрастающий же характер потенциала $\mathbf{A}$ проявляется в том, что даже в слабом поле нельзя считать, что $\mathbf{A}$ мало по сравнению с $\mathbf{Q}$).

Следующие после (59.7) члены в гамильтониане содержат поле $\mathbf{H}$ в «чистом» (т. е. без сопровождающих операторов $\partial/\partial \mathbf{Q}$) виде. Такие члены уже нельзя найти из одних лишь соображений калибровочной инвариантности. Определим первый из этих членов, линейный по $\mathbf{H}$. При этом можно в силу относительной малости этой поправки при ее вычислении положить $\mathbf{Q} = 0$.

Рассмотрим сначала поставленный вопрос без учета спин-орбитального взаимодействия. Интересующий нас линейный по $\mathbf{H}$ член может возникнуть только из линейного по $\mathbf{A}$ члена

¹⁾ Суммирование же по $\mathbf{k}'$ отсутствует, так как, согласно (55.15), импульс $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ не имеет матричных элементов, недиагональных по $\mathbf{k}$, так что все промежуточные состояния относятся к тому же квазиимпульсу $\mathbf{k}_0$.

в исходном точном гамильтониане электрона (56.2), т. е. путем усреднения по волновой функции $\psi_{s\mathbf{k}_0}$ выражения

$$-\frac{e}{2mc}(\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) = -\frac{e}{mc}\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} \quad (59.8)$$

(равенство связано с выбранной уже калибровкой с $\text{div}\mathbf{A} = 0$). Это приводит к добавлению к гамильтониану (59.7) члена

$$H_s^{(1)} = -\mathbf{M}\mathbf{H}, \quad (59.9)$$

где

$$\mathbf{M} = \frac{e}{2mc} \langle s\mathbf{k}_0 | [\mathbf{r}\mathbf{p}] | s\mathbf{k}_0 \rangle \quad (59.10)$$

есть просто среднее значение магнитного момента электрона в состоянии $s\mathbf{k}_0$. Подчеркнем, что поправку (59.9) можно добавить к гамильтониану (59.7), не опасаясь, что этот эффект уже частично учтен заменой (59.6); действительно, линейные по $\mathbf{H}$ члены в (59.7) при $\mathbf{Q} = 0$ вообще отсутствуют.

Распишем выражение (59.10) по правилу матричного умножения, учтя, что в силу (59.4) $\mathbf{p}$ не имеет диагональных матричных элементов

$$M_x = \frac{e}{2mc} \sum_{s'} [(\Omega_y)_{ss'}(p_z)_{s's} - (\Omega_z)_{ss'}(p_y)_{s's}]$$

(и аналогично для M_y, M_z); как и должно было быть, поправка к гамильтониану (59.7) выражается через матричные элементы оператора $\mathbf{\Omega}$. С помощью соотношения

$$\Omega_{s's} = \frac{\mathbf{p}_{s's}}{i(\varepsilon_{s'} - \varepsilon_s)}$$

можно переписать $\mathbf{M}$ в виде

$$M_x = \frac{ie}{2mc} \sum_{s'} \frac{(p_z)_{ss'}(p_y)_{s's} + (p_y)_{ss'}(p_z)_{s's}}{\varepsilon_{s'}(\mathbf{k}_0) - \varepsilon_s(\mathbf{k}_0)}, \dots \quad (59.11)$$

Отметим, что $\mathbf{M}$, а тем самым и вся поправка (59.9) обращается в нуль, если кристалл обладает центром инверсии. Действительно, при одновременном обращении времени и инверсии состояние электрона (без учета его спина) не изменяется, а потому не изменится и правая сторона равенства (59.11); между тем магнитный момент при этом преобразовании должен изменить знак.

Учтем теперь спин-орбитальное взаимодействие в кристалле, добавив к гамильтониану (56.1) спин-орбитальный член $\hat{H}_{sl}$ из

(55.17). Это приведет к изменению линейного по $\mathbf{q}$ члена в уравнении (59.3): оператор $\hat{\mathbf{p}}$ в этом члене заменится на

$$\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4mc^2} [\boldsymbol{\sigma} \nabla U]. \quad (59.12)$$

Оператор $\hat{\pi}$ имеет простой физический смысл: непосредственно коммутируя гамильтониан (с учетом $\hat{H}_{sl}$) с $\mathbf{r}$, найдем, что (в отсутствие магнитного поля)

$$\hat{\mathbf{r}} = \hat{\pi}/m. \quad (59.13)$$

Аналогично, произведя при наличии магнитного поля обычную замену $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c$ в исходном гамильтониане (в том числе в $\hat{H}_{sl}$), мы найдем, что и линейный по $\mathbf{A}$ член имеет вид $-\epsilon\hat{\pi}\mathbf{A}/mc$, отличающийся от (59.8) той же заменой $\hat{\mathbf{p}}$ на $\hat{\pi}$. К магнитному же моменту (59.11) надо прибавить еще и спиновый магнитный момент свободного электрона, так что будет

$$M_x = \beta \langle s\mathbf{k}_0 | \sigma_x | s\mathbf{k}_0 \rangle + \frac{ie}{2mc} \sum_{s'}' \frac{(\pi_z)_{ss'}(\pi_y)_{s's} - (\pi_y)_{ss'}(\pi_z)_{s's}}{\epsilon_{s'} - \epsilon_s}. \quad (59.14)$$

С учетом спин-орбитального взаимодействия второй член в этом выражении отнюдь не равен нулю даже в кристалле с центром инверсии. Действительно, одновременное изменение знака времени и инверсия приводят к состоянию, отличающемуся направлением спина, так что все выражение (59.14), чтобы изменить знак при этом преобразовании, должно лишь сводиться к среднему от оператора $\beta\sigma_i\xi_{ix}(\mathbf{k})$ (ср. (56.12)).

Вычислим тензор ξ_{ik} в случае, когда спин-орбитальное взаимодействие может рассматриваться как возмущение¹⁾. Перепишем (55.17) в виде

$$\hat{H}_{sl} = \boldsymbol{\sigma} \hat{\chi}, \quad \hat{\chi} = \frac{i\hbar^2}{4m^2c^2} [\nabla U \cdot \nabla]. \quad (59.15)$$

Рассматривая (59.9) и (59.15) как возмущение, найдем поправку к энергии во втором порядке теории возмущений, оставив при этом только перекрестные (по (59.9) и (59.15)) члены. Эта

¹⁾ Выражение $\hat{H}_{sl}$ (55.17) представляет собой первый член разложения по релятивистскому отношению $(v/c)^2$ и потому в определенном смысле всегда мало. Эта малость, однако, не имеет отношения к применимости теории возмущений в данной конкретной зоне. Поэтому $\hat{H}_{sl}$ в рассматриваемой задаче не всегда может рассматриваться как малое возмущение.

поправка (все еще остающаяся оператором — матрицей — по спиновым переменным) имеет вид (56.12) с тензором ξ_{ik} , равным

$$\xi_{ik} = \delta_{ik} + \frac{1}{2} \sum'_{s'} \frac{(\chi_i)_{ss'}(L_k)_{s's} + (L_k)_{ss'}(\chi_i)_{s's}}{\varepsilon_{s'} - \varepsilon_s}, \quad (59.16)$$

где $\hbar \hat{\mathbf{L}} = [\mathbf{r} \hat{\mathbf{p}}]$.

Все сказанное относилось к невырожденным (кроме как по спину) состояниям. Если же при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ имеется вырождение, то для определения энергии надо составить секулярное уравнение, учитывающее возмущение (квадратные скобки в уравнении (59.3)) вплоть до членов второго порядка (т. е. по формуле (39.4) (см. III)). Свойства получающегося таким образом секулярного уравнения зависят от симметрии в точке $\mathbf{k}_0$. Мы вернемся еще к этому вопросу в § 68.

Задача

Найти квазиклассические уровни энергии для частицы с квадратичным законом дисперсии (59.1) в магнитном поле произвольного направления.

Решение. Приведем тензор m_{ik} к диагональному виду и будем отсчитывать энергию и импульс от точки экстремума (для определенности — минимума). Тогда

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2}{m_1} + \frac{k_2^2}{m_2} + \frac{k_3^2}{m_3} \right), \quad (1)$$

где m_1, m_2, m_3 — главные значения тензора m_{ik} (положительные величины). Обозначив через $\mathbf{n}$ единичный вектор в направлении поля $\mathbf{H}$, имеем

$$k_z = \mathbf{n}\mathbf{k} = n_1 k_1 + n_2 k_2 + n_3 k_3 \quad (2)$$

(n_1, n_2, n_3 — направляющие косинусы поля относительно главных осей тензора m_{ik}). Нам надо найти площадь S той части плоскости (2), которая лежит внутри эллипсоида (1); она может быть представлена в виде интеграла

$$S = \int \delta(\mathbf{n}\mathbf{k} - k_z) d^3k, \quad (3)$$

взятого по объему эллипсоида (1)¹). Заменой переменных $\hbar k_i = (2\varepsilon m_i)^{1/2} q_i$

¹) Пусть $f(x, y, z) = \text{const}$ — семейство поверхностей, заполняющих некоторый объем. Расстояние dl между двумя бесконечно близкими поверхностями семейства: $dl = df/|\nabla f|$, а объем между этими поверхностями: $dV = S(f) dl$, где $S(f)$ — площадь поверхности с заданным значением f . Умножив равенство $S(f) df = |\nabla f| dV$ на δ -функцию $\delta(f)$ и проинтегрировав по объему и по df , получим площадь поверхности $f(x, y, z) = 0$ в виде $S(0) = \int |\nabla f| \delta(f) d^3x$. В нашем случае $|\nabla f| = 1$, откуда и получается выражение (3).

интеграл приводится к виду

$$S = (2\varepsilon)^{3/2} \hbar^{-3} (m_1 m_2 m_3)^{1/2} \int \delta(\nu \mathbf{q} - k_z) d^3 q,$$

где вектор ν в $\mathbf{q}$ -пространстве имеет компоненты $\nu_i = (2\varepsilon m_i)^{1/2} n_i / \hbar$, а интегрирование производится по объему сферы $\mathbf{q}^2 = 1$. Интегрирование легко выполняется в цилиндрических координатах с осью вдоль ν и дает

$$S(\varepsilon, k_z) = \frac{2\pi}{\hbar^2} m_{\perp} \left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{\parallel}} \right),$$

где

$$\begin{aligned} m_{\parallel} &= m_1 n_1^2 + m_2 n_2^2 + m_3 n_3^2, \\ m_{\perp} &= (m_1 m_2 m_3 / m_{\parallel})^{1/2}. \end{aligned} \quad (4)$$

Подставив в (58.7), найдем уровни энергии

$$\varepsilon_n(k_z) = \frac{|e| \hbar H}{m_{\perp} c} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{\parallel}}. \quad (5)$$

§ 60. Симметрия состояний электрона в решетке в магнитном поле

В этом параграфе мы рассмотрим точные общие свойства трансляционной симметрии волновых функций блоховского электрона в магнитном поле, не связанные с каким-либо приближением (вроде условия слабости поля или условия квазиклассичности).

Наложение однородного магнитного поля не меняет физической трансляционной симметрии системы: она остается периодической в пространстве. Своеобразие ситуации состоит, однако, в том, что в то же время гамильтониан электрона (56.2) теряет свою симметрию. Это связано с тем, что в гамильтониан входит не постоянная напряженность $\mathbf{H}$, а векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, зависящий от координат и не обладающий периодичностью.

Неинвариантность гамильтониана приводит, естественно, к усложнению закона преобразования волновых функций при трансляциях. Выберем для векторного потенциала однородного поля калибровку

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathbf{H} \mathbf{r}], \quad (60.1)$$

и пусть $\psi(\mathbf{r})$ — некоторая собственная функция гамильтониана $\hat{H}(\mathbf{r})$. При трансляции $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$ ($\mathbf{a}$ — какой-либо из периодов

решетки) эта функция переходит в $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$, но это будет уже собственная функция гамильтониана $\hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$, не совпадающего с $\hat{H}(\mathbf{r})$, поскольку произошла замена векторного потенциала

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} [\mathbf{H}\mathbf{a}].$$

Для нахождения искомого закона преобразования надо вернуться к исходному гамильтониану, что достигается калибровочным преобразованием

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f, \quad f = -\frac{1}{2} [\mathbf{H}\mathbf{a}]\mathbf{r}.$$

При этом волновая функция преобразуется согласно (56.4):

$$\psi \rightarrow \psi \exp(ief/\hbar c).$$

Обозначив результат всех этих операций как $\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r})$, находим, таким образом,

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) \exp\left(\frac{i}{2} \mathbf{r}[\mathbf{h}\mathbf{a}]\right), \quad (60.2)$$

где $\mathbf{h} = |e| \mathbf{H}/\hbar c$, а $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ назовем оператором магнитной трансляции. Если $\psi(\mathbf{r})$ — решение уравнения Шредингера $\hat{H}(\mathbf{r})\psi = \varepsilon\psi$, то и (60.2) есть решение того же уравнения, относящееся к той же энергии ε (*R. Peierls*, 1933).

Из определения (60.2) легко сделать вывод, что

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\mathbf{a}}\hat{T}_{\mathbf{a}'} &= \hat{T}_{\mathbf{a}+\mathbf{a}'}\omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}'), \\ \omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}') &= \exp\left(-\frac{i}{2} \mathbf{h}[\mathbf{a}\mathbf{a}']\right). \end{aligned} \quad (60.3)$$

При перестановке $\mathbf{a}$ и $\mathbf{a}'$ показатель степени в множителе $\omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}')$ меняет знак; поэтому операторы $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ и $\hat{T}_{\mathbf{a}'}$, вообще говоря, не коммутативны:

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\hat{T}_{\mathbf{a}'} = \hat{T}_{\mathbf{a}'}\hat{T}_{\mathbf{a}} \exp(-i\mathbf{h}[\mathbf{a}\mathbf{a}']). \quad (60.4)$$

Таким образом, произведение двух операторов $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ и $\hat{T}_{\mathbf{a}'}$ отличается, вообще говоря, фазовым множителем от оператора $\hat{T}_{\mathbf{a}+\mathbf{a}'}$. По математической терминологии это означает, что операторы $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ осуществляют не обычное, а проективное представление группы трансляций; базисом этих представлений являются волновые функции стационарных состояний блоховского электрона

в магнитном поле¹⁾). Классификация уровней энергии должна производиться, следовательно, по неприводимым проективным представлениям группы трансляций, подобно тому как в отсутствие поля она производится по неприводимым обычным представлениям этой группы.

Напомним в этой связи, что группа трансляций — абелева (все ее элементы коммутативны), а потому все ее неприводимые обычные представления одномерны. Функция ψ базиса каждого такого представления при трансляции лишь умножается на некоторый фазовый множитель, причем для двух последовательных трансляций этот множитель должен быть равен произведению множителей для каждой трансляции в отдельности. Это значит, что

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}\psi,$$

где $\mathbf{k}$ — постоянный вектор; этот вектор (квазиимпульс электрона) оказывается параметром, классифицирующим неприводимые представления.

Полная классификация неприводимых проективных представлений группы трансляции может быть произведена (*E. Brown*, 1964; *J. Zak*, 1964) в случае, когда магнитное поле удовлетворяет условию

$$\mathbf{h} = 4\pi \frac{p}{q} \frac{\mathbf{a}_3}{v}, \quad (60.5)$$

где p и q — любые два взаимно простых целых числа; $\mathbf{a}_3$ — один из трех произвольно выбранных основных периодов решетки $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$; $v = [\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2] \mathbf{a}_3$ — объем элементарной ячейки решетки. Другими словами, магнитное поле должно быть направлено вдоль какого-либо периода решетки, а величина $h\nu/(4\pi a_3)$ должна быть рациональным числом. Умножив равенство (60.5) на $[\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2]$, можно представить это условие также и в виде

$$\mathbf{h}[\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2] = 4\pi p/q, \quad (60.6)$$

Для классификации неприводимых проективных представлений группы трансляций существенно, что из этой группы можно выделить подгруппу (будем называть ее *магнитной*), по отношению к которой представление является не проективным, а обычным. При соблюдении условия (60.6) такой подгруппой является

¹⁾ С понятием о проективных представлениях групп мы встречались уже в V, § 134. Напомним, что проективными представлениями группы $\mathbf{G}$ называются вообще представления, осуществляемые операторами $\hat{G}$, соотношения между которыми совпадают с соотношениями между соответствующими элементами группы $\mathbf{G}$ лишь с точностью до фазовых множителей: если $G_1 G_2 = G_3$, то для операторов имеем $\hat{G}_1 \hat{G}_2 = \omega_{12} \hat{G}_3$, где ω_{12} должно быть равно единице только по модулю.

совокупность трансляций вида

$$\mathbf{a}_m = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 q \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (60.7)$$

с целочисленными коэффициентами n_1, n_2, n_3 . Действительно, когда вектор $\mathbf{h}$ направлен вдоль $\mathbf{a}_3$ и удовлетворяет условию (60.6), для всех трансляций такого вида показатель экспоненты в (60.3) обращается в нуль или в кратное от 2π , так что все множители $\omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}') = 1^1$. Совокупность трансляций (60.7) образует решетку с основными периодами $\mathbf{a}_1, q\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ (назовем ее магнитной). Магнитная же обратная решетка соответственно имеет периоды $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2/q, \mathbf{b}_3$, где $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ — периоды основной обратной решетки. Обычные неприводимые представления магнитной подгруппы, как и группы трансляций в целом, одномерны; они характеризуются волновыми векторами (квазиимпульсами) $\mathbf{K}$, все неэквивалентные значения которого заключены в одной ячейке магнитной обратной решетки.

Пусть $\psi^{(1)}$ — функция базиса одного из таких представлений с квазиимпульсом $\mathbf{k}^{(1)} \equiv \mathbf{K}$. Для нее

$$\hat{T}_{\mathbf{a}_m} \psi^{(1)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}^{(1)} \cdot \mathbf{a}_m} \psi^{(1)}(\mathbf{r}). \quad (60.8)$$

При трансляции же на период $\mathbf{a}_2$ (не входящий в магнитную подгруппу) получим из $\psi^{(1)}$ функцию $\psi^{(2)}$ с другим квазиимпульсом. Для его определения, используя (60.4) и (60.8), имеем

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\mathbf{a}_m} \psi^{(2)} &= \hat{T}_{\mathbf{a}_m} \hat{T}_{\mathbf{a}_2} \psi^{(1)}(\mathbf{r}) = \exp(-i\mathbf{h}[\mathbf{a}_m \mathbf{a}_2]) \hat{T}_{\mathbf{a}_2} \hat{T}_{\mathbf{a}_m} \psi^{(1)}(\mathbf{r}) = \\ &= \exp\{-i\mathbf{a}_m[\mathbf{a}_2 \mathbf{h}] + i\mathbf{a}_m \mathbf{k}^{(1)}\} \hat{T}_{\mathbf{a}_2} \psi^{(1)}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

или окончательно

$$\hat{T}_{\mathbf{a}_m} \psi^{(2)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}^{(2)} \cdot \mathbf{a}_m} \psi^{(2)}(\mathbf{r}),$$

где

$$\mathbf{k}^{(2)} = \mathbf{k}^{(1)} - [\mathbf{a}_2 \mathbf{h}] = \mathbf{K} - 2\frac{p}{q} \mathbf{b}_1$$

(в последнем равенстве подставлено (60.5) и введен период обратной решетки $2\pi[\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3]/v = \mathbf{b}_1$). Далее надо различать случаи нечетных и четных значений q^2).

¹⁾ Выбор магнитной подгруппы, вообще говоря, неоднозначен: вместо (60.7) можно выбрать любую совокупность трансляций вида $\mathbf{a}_m = n_1 q_1 \mathbf{a}_1 + n_2 q_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$, где q_1, q_2 — целые числа такие, что $q_1 q_2 = q$.

²⁾ При $q = 1$ магнитная подгруппа совпадает с полной группой трансляций. Таким образом, если $\mathbf{h}$ — целое кратное от $4\pi \mathbf{a}_3/v$, то проективные неприводимые представления группы трансляций совпадают с обычными неприводимыми представлениями и состояния электрона классифицируются так же, как и в отсутствие поля.

Пусть q — нечетное число. Повторив трансляцию на $\mathbf{a}_2$ еще $q - 2$ раз, получим всего q различных функций с квазиимпульсами

$$\mathbf{k}^{(1)} = \mathbf{K}, \quad \mathbf{k}^{(2)} = \mathbf{K} - 2 \frac{p}{q} \mathbf{b}_1, \dots, \quad \mathbf{k}^{(q)} = \mathbf{K} - 2 \frac{p(q-1)}{q} \mathbf{b}_1. \quad (60.9)$$

Вычитанием надлежащего целого кратного вектора $\mathbf{b}_1$ эти значения приводятся (в той или иной последовательности) к значениям

$$\mathbf{k} = \mathbf{K}, \quad \mathbf{K} + \frac{1}{q} \mathbf{b}_1, \quad \mathbf{K} + \frac{2}{q} \mathbf{b}_1, \dots, \quad \mathbf{K} + \frac{q-1}{q} \mathbf{b}_1. \quad (60.10)$$

Эти q функций и осуществляют q -мерное неприводимое проективное представление группы трансляций. Мы получим все неэквивалентные представления, когда $\mathbf{K}$ пробегает значения в ячейке со сторонами $\mathbf{b}_1/q$, $\mathbf{b}_2/q$, $\mathbf{b}_3$ (квазиимпульсы же $\mathbf{k}^{(1)}$, $\mathbf{k}^{(2)}$, ... пробегают при этом значения в ячейке со сторонами $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2/q$, $\mathbf{b}_3$).

Пусть теперь q — четное число. Тогда в последовательности (60.9) уже $(q/2 + 1)$ -е значение, равное $\mathbf{K} - p \mathbf{b}_1$, отличается от $\mathbf{K}$ лишь целым кратным периодов обратной решетки $\mathbf{b}_1$. Другими словами, имеется всего $q/2$ неэквивалентных значений $\mathbf{k}$; они даются выражением (60.10) с $q/2$ вместо q . Таким образом, в этом случае неприводимые представления $q/2$ -мерны, причем $\mathbf{K}$ пробегает значения в ячейке со сторонами $2\mathbf{b}_1/q$, $\mathbf{b}_2/q$, $\mathbf{b}_3$.

Эти результаты позволяют сформулировать следующее заключение о характере изменения энергетического спектра электрона в решетке при наложении на нее магнитного поля (удовлетворяющего условию (60.5)). В отсутствие поля спектр состоит из дискретных энергетических зон, в каждой из которых энергия $\varepsilon(\mathbf{k})$ является функцией квазиимпульса, пробегающего значения в одной ячейке обратной решетки. При наложении поля такая зона расщепляется на q подзон, в каждой из которых все уровни энергии вырождены с кратностью q при нечетном или $q/2$ при четном q . Энергия в подзоне может быть выражена как функция $\varepsilon(\mathbf{K})$ вектора $\mathbf{K}$, пробегающего значения в $1/q^2$ -й (при нечетном q) или $2/q^2$ -й (при четном q) части ячейки обратной решетки.

Описанная картина в определенном смысле крайне чувствительна к величине и направлению магнитного поля. Действительно, сколь угодно близко к значению $\mathbf{H}$, удовлетворяющему условию (60.5) с некоторыми p и q , лежат значения, удовлетворяющие такому же условию, но с гораздо большими q , так что путем сколь угодно малого изменения поля число подзон мож-

но сделать сколь угодно большим. Подчеркнем, однако, что это отнюдь не означает такой же неустойчивости в наблюдаемых физических свойствах. Последние определяются не столько конкретной зонной структурой, сколько распределением числа состояний по малым, но конечным интервалам энергий; это распределение мало меняется при малом изменении поля. Дело в том, что сильно меняется не энергия состояний, а лишь их классификация ввиду изменения области определения квазиимпульса.

§ 61. Электронный спектр нормальных металлов

В реальных кристаллах нормальных (несверхпроводящих) металлов электроны образуют квантовую ферми-жидкость, относящуюся к описанному в гл. I типу. Ряд отличий возникает, однако, в связи с тем, что здесь мы имеем дело не со «свободной» изотропной жидкостью, а с жидкостью в анизотропном периодическом поле решетки.

Подобно тому как энергетический спектр свободной ферми-жидкости строится аналогично спектру идеального ферми-газа, так спектр электронной ферми-жидкости в металле строится аналогично спектру идеального «газа в решетке». Появление квазиимпульса как сохраняющейся величины связано только с пространственной периодичностью системы (подобно тому как сохранение истинного импульса является следствием полной пространственной однородности). Естественно поэтому, что перечисленные в § 55 свойства переносятся и на характер классификации уровней в спектре электронной жидкости в металле, причем роль частиц (электронов) переходит к квазичастицам.

При температуре абсолютного нуля частицы идеального ферми-газа в периодическом поле займут все нижние уровни с энергиями ϵ вплоть до некоторого граничного значения ϵ_F (совпадающего со значением химического потенциала μ при $T = 0$), определяемого условием, что число состояний с $\epsilon \leq \epsilon_F$ совпадает с полным числом электронов. При этом энергетические зоны, для которых $\epsilon_s(\mathbf{k}) < \epsilon_F$ при всех значениях $\mathbf{k}$, окажутся полностью заполненными, зоны с $\epsilon_s(\mathbf{k}) > \epsilon_F$ — пустыми, а зоны, для которых уравнение

$$\epsilon_s(\mathbf{k}) = \epsilon_F \quad (61.1)$$

имеет решение, — будут заполнены частично. Уравнения (61.1) определяют в $\mathbf{k}$ -пространстве граничную поверхность Ферми, отделяющую (для каждой зоны) заполненные состояния от пустых.

Аналогично, в реальном металле существует поверхность в $\mathbf{k}$ -пространстве, отделяющая область заполненных (при $T = 0$) состояний квазичастиц от свободных состояний; по одну сторону этой поверхности энергии квазичастиц $\epsilon > \epsilon_F$, а по другую

$\varepsilon < \varepsilon_F$. Напомним, однако (см. § 1), что понятие квазичастиц в ферми-жидкости имеет реальный физический смысл лишь вблизи ферми-поверхности, где затухание элементарных возбуждений сравнительно мало. Поэтому представление о заполненных энергетических зонах (возникающее при описании спектра идеального ферми-газа) в реальной электронной жидкости теряет свой буквальный смысл.

Квазичастицы вблизи ферми-поверхности называют *электро-нами проводимости*. Их энергия является, в общем случае, линейной функцией квазиимпульса; аналогично (1.12), имеем

$$\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon_F \approx \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_F)\mathbf{v}_F, \quad (61.2)$$

где $\mathbf{k}_F$ — точка на ферми-поверхности, а

$$\hbar\mathbf{v}_F = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}} \right)_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_F} \quad (61.3)$$

— скорость электронов проводимости в этих точках¹⁾.

Вблизи ферми-поверхности должна лежать и «область размытости» распределения электронов проводимости при различных от нуля температурах. Отсюда возникает условие применимости теории ферми-жидкости: $T \ll \hbar k_F v_F$, где k_F и v_F — характерные величины размеров ферми-поверхности и скорости на ней. Обычно размеры k_F совпадают по порядку величины с размерами ячейки обратной решетки, так что $k_F \sim 1/a$ (исключения составляют так называемые полуметаллы — см. ниже). Положив также для оценки $v_F \sim \hbar k_F / m$, приходим к условию $T \ll 10^4 - 10^5 K$, практически всегда выполняющемуся.

Фактически все металлы имеют кристаллические решетки с центром инверсии. Согласно сказанному в конце § 55, все уровни энергии электронов проводимости (с заданными $\mathbf{k}$) двукратно вырождены по спину (речь идет о металлах не ферро- и не антиферромагнитных).

Форма и расположение ферми-поверхности являются важной характеристикой каждого конкретного металла. У различных металлов они имеют самую разнообразную, вообще говоря сложную, форму. Ферми-поверхность может состоять из нескольких не связанных между собой листов, которые могут быть односвязными или многосвязными, закрытыми или открытыми (ср. сказанное в § 55 об изоэнергетических поверхностях вообще).

¹⁾ Формулы же типа (2.11) для эффективной массы, полученные в § 2 для «свободной» ферми-жидкости из соображений галилеевой инвариантности, к электронной жидкости в кристаллической решетке, разумеется, не относятся.

Замкнутые листы ферми-поверхности можно разделить на две категории в зависимости от того, ограничивают ли они области заполненных (при $T = 0$) или свободных состояний квазичастиц (в первом случае внутри полости $\varepsilon < \varepsilon_F$, а во втором $\varepsilon > \varepsilon_F$). Оба случая можно, однако, описывать аналогичным образом, если считать во втором случае, что «пустая» полость заполнена «квазидырками»; переход системы в возбужденное состояние описывается тогда как переход квазидырок изнутри ферми-поверхности наружу. Самую ферми-поверхность называют тогда *дырочной*, в отличие от *электронной* в первом случае¹). Физическое различие между двумя типами квазичастиц — электронами и дырками — ясно проявляется при их движении во внешних полях. Так, все сечения дырочной (или электронной) ферми-поверхности, определяющие квазиклассические траектории при движении в магнитном поле, относятся к дырочному (или электронному) типу в указанном в § 57 смысле.

В изотропной «свободной» ферми-жидкости, о которой шла речь в § 1, ферми-поверхность представляла собой сферу, радиус которой определялся плотностью жидкости согласно теореме Ландау (1.1). Аналогичная связь имеется и для электронной жидкости в металле, но специфика свойств, связанных с периодичностью решетки, приводит к некоторому изменению в формулировке этой связи.

Число электронов в металле удобно относить к одной элементарной ячейке его решетки; пусть n — полное число электронов в атомах одной ячейки. Обозначим через τ_F суммарный объем в одной ячейке обратной решетки, лежащий с заполненной стороны ферми-поверхности (т. е. со стороны, где $\varepsilon < \varepsilon_F$). Слово суммарный означает здесь, что если заполненные области, соответствующие различным листам ферми-поверхности, частично перекрываются, то они все равно должны складываться независимо. Объем τ_F условимся измерять в единицах объема самой ячейки обратной решетки; сделанное замечание о перекрытии областей означает, что определенная таким образом величина τ_F может превышать единицу.

Интересующее нас утверждение (*теорема Латтинжера*), заменяющее для металла теорему Ландау, выражается равенством

$$n_c \cong 2\tau_F = n - 2l \quad (61.4)$$

где l — некоторое целое число ($l \geq 0$). В модели идеального газа

¹) Подчеркнем, однако, во избежание недоразумений, что смысл термина «дырка» не совпадает здесь со смыслом, в котором он применялся в описанном в конце § 1 альтернативном способе описания спектра ферми-жидкости (там назывались дырками лишь пустые места, образовавшиеся в заполненной области при возбуждении системы).

в решетке это число имеет простой смысл: полному заполнению каждой зоны соответствует два электрона в ячейке обратной решетки (удвоение связано с двумя спиновыми состояниями), так что $2l$ есть число электронов, заполняющих l нижних зон, а разность $n - 2l$ — число электронов в частично заполненных зонах. Формула (61.4) выражает тот — отнюдь не тривиальный — факт, что аналогичная ситуация продолжает иметь место и при учете взаимодействия между электронами¹⁾. По определению металла, целое число n_c отлично от нуля.

Пусть в металле имеются только замкнутые листы ферми-поверхности — электронные и дырочные. Обозначим посредством $\tau_{-}^{(s)}$ и $\tau_{+}^{(s)}$ вклады в τ_F от отдельных электронных и дырочных полостей:

$$\tau_F = \sum_s \tau_{-}^{(s)} + \sum_s \tau_{+}^{(s)}$$

(суммирования соответственно по всем электронным и всем дырочным листам). Величина $\tau_{-}^{(s)}$ совпадает с объемом электронной полости, а объем дырочной полости есть $1 - \tau_{+}^{(s)}$. Введем числа электронных и дырочных квазичастиц

$$n_{-} = 2 \sum_s \tau_{-}^{(s)}, \quad n_{+} = 2 \sum_s (1 - \tau_{+}^{(s)}).$$

При четном n (а потому и четном n_c) возможны случаи, когда n_c совпадает с удвоенным числом дырочных полостей. Тогда равенство (61.4) сведется, как легко убедиться, к равенству

$$n_{-} = n_{+}. \quad (61.5)$$

Такие металлы с равными числами квазичастиц и квазидырок называют *компенсированными*.

Обратим внимание на то обстоятельство, что при точно выполняющемся равенстве (61.5) сами величины n_{-} и n_{+} могут быть произвольными, в том числе сколь угодно малыми. В таких случаях, когда объемы всех полостей ферми-поверхности очень малы (по сравнению с объемом одной ячейки обратной решетки), говорят о *полуметаллах*²⁾. Существует, однако, нижняя граница для числа электронов проводимости, за которой электронный спектр металлического типа становится неустойчивым и существовать не может (см. об этом ниже, в конце § 66).

¹⁾ Строгий вывод этого утверждения см. *J. M. Luttinger* // Phys. Rev. 1960. V. 119. P. 1153.

²⁾ Так, у висмута $n_{-} = n_{+} \sim 10^{-5}$.

Термодинамические величины металла складываются из решеточных и электронных частей. Температурная зависимость последних определяется квазичастицами в окрестности ферми-поверхности (закон дисперсии (61.2)). Характер этой зависимости, естественно, тот же, что и у идеального ферми-газа или у изотропной ферми-поверхности (ср. § 1); отличие в формулах возникает лишь от другого числа состояний квазичастиц вблизи ферми-поверхности, не являющейся теперь сферой.

Обозначим число состояний (отнесенное к единице объема металла), приходящееся на интервал энергий $d\varepsilon$, через $\nu d\varepsilon$. Элемент объема $\mathbf{k}$ -пространства между бесконечно близкими изоэнергетическими поверхностями, отвечающими энергиям ε_F и $\varepsilon_F + d\varepsilon$, равен $df d\varepsilon / \hbar v_F$, где df — элемент площади ферми-поверхности, а v_F — величина нормального к ней вектора $\mathbf{v}_F = \partial\varepsilon / \hbar \partial \mathbf{k}$. Поэтому

$$\nu_F = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \frac{df}{\hbar v_F}, \quad (61.6)$$

где интегрирование производится по всем листам ферми-поверхности, расположенным внутри одной ячейки обратной решетки (при открытой ферми-поверхности грани самой ячейки в область интегрирования, разумеется, не входят).

Величина (61.6) заменяет собой в термодинамических величинах выражение, которое для газа свободных частиц (поверхность Ферми — сфера) имело вид

$$\frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi p_F^2}{p_F/m} = \frac{mp_F}{\pi^2 \hbar^3}.$$

Так, для электронной части термодинамического потенциала Ω металла имеем (ср. V, § 58)

$$\Omega_e = \Omega_{0e} - \frac{\pi^2}{6} \nu_F V T^2, \quad (61.7)$$

где Ω_{0e} — значение потенциала при $T = 0$. Рассматривая второй член в (61.7) как малую добавку к Ω_{0e} , согласно теореме о малых добавках, можно написать такую же формулу и для термодинамического потенциала Φ :

$$\Phi_e = \Phi_{0e} - \frac{\pi^2}{6} \nu_F V T^2, \quad (61.8)$$

где теперь ν_F и V предполагаются выраженными через P (по «нулевому» приближению, т. е. при $T = 0$).

Определяя из (61.8) энтропию, а затем теплоемкость, найдем

$$C_e = \frac{\pi^2}{3} \nu_F V T. \quad (61.9)$$

Решеточная же часть теплоемкости пропорциональна T^3 (при температурах, малых по сравнению с дебаевской Θ); поэтому при достаточно низких температурах электронный вклад в теплоемкость становится преобладающим¹⁾.

По этой же причине становится преобладающим в этой области температур также и электронный вклад в тепловое расширение металла. Определяя из (61.8) объем $V = \partial\Phi/\partial P$, а затем коэффициент теплового расширения α , найдем

$$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = -T \frac{\pi^2}{3V} \frac{\partial(V\nu_F)}{\partial P}. \quad (61.10)$$

Отметим, что здесь (как и в области $T \gg \Theta$ — см. V, § 67) отношение

$$\frac{\alpha V}{C} = - \frac{\partial \ln(V\nu_F)}{\partial P}$$

оказывается не зависящим от температуры.

§ 62. Гриновская функция электронов в металле

Проведенное в § 56–58 рассмотрение относилось к движению одного электрона в решетке, на которую наложено еще внешнее магнитное поле. Покажем теперь, что полученные при этом результаты остаются по существу справедливыми и для квазичастиц (электронов проводимости) в электронной жидкости реального металла, — меняется лишь несколько определение входящих в соотношения величин (Ю. А. Бычков, Л. П. Горьков, 1961; J. M. Luttinger, 1961). Подходящим математическим аппаратом для общего рассмотрения электронной жидкости является аппарат гриновских функций.

В гл. II этот аппарат был развит для «свободной» ферми-жидкости. Выясним, в каких пунктах он должен быть изменен для жидкости в решетке.

Гриновская функция электронной жидкости (при температуре $T = 0$) определяется через гейзенберговские ψ -операторы электронов той же формулой (7.9), где усреднение происходит

¹⁾ Малым параметром разложения в (61.9) является отношение T/ε_F , а в решеточной теплоемкости — отношение T/Θ . Поэтому обе части теплоемкости сравниваются при $T^2 \sim \Theta^3/\varepsilon_F$.

по основному состоянию металла. В силу однородности времени эта функция зависит от аргументов t_1 и t_2 только через их разность $t = t_1 - t_2$. Пространственная же однородность нарушена теперь наличием внешнего по отношению к жидкости поля решетки. Поэтому гриновская функция зависит не только от разности $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Можно лишь утверждать, что она инвариантна относительно одновременного сдвига $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ на один и тот же (любой) период решетки. Ниже мы будем рассматривать гриновскую функцию в ω , $\mathbf{r}$ -представлении, т. е. введем ее фурье-компоненту по t : $G_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Именно эта функция позволяет, в принципе, определить энергетический спектр электронной жидкости в металле. Повторим (не производя вновь всех вычислений) применительно к данному случаю изложенные в § 8 рассуждения.

В § 8 было показано, что однородность системы позволяет полностью определить координатную зависимость матричных элементов ψ -операторов и тем самым позволяет записать общее выражение гриновской функции в пространственно-временном представлении в виде (8.5), (8.6); отсюда можно было затем перейти и к ее импульсному представлению в виде разложения (8.7).

Для электронной жидкости в решетке инвариантность матричных элементов, выражаемая равенством (8.3), имеет место только для трансляций на периоды решетки, т. е. при $\mathbf{r} = \mathbf{a}$. Это приводит, естественно, к меньшей определенности в координатной зависимости: вместо (8.4) можно утверждать лишь, что

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) | m\mathbf{k} \rangle &= \chi_{\alpha m\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega_{m0}(\mathbf{k}) t), \\ \langle m\mathbf{k} | \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) | 0 \rangle &= \chi_{\alpha m, -\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}) \exp(i\omega_{m0}(\mathbf{k}) t), \end{aligned} \quad (62.1)$$

где

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha m\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\alpha m\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \\ \chi_{\alpha m\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} v_{\alpha m\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (62.2)$$

$\mathbf{k}$ — квазиимпульс состояния; m — совокупность остальных характеризующих его квантовых чисел, а u и v — некоторые периодические в решетке функции координат (мы выписали матричные элементы только для переходов из основного состояния — состояния 0). По своим свойствам функции $\chi^{(+)}$ и $\chi^{(-)}$ аналогичны блоховским волновым функциям электрона в периодическом поле. Выразив гриновскую функцию через эти матричные элементы и переходя затем к компонентам Фурье по времени (подобно тому, как это было сделано в § 8), получим

теперь вместо формулы (8.7) разложение

$$G_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{m, \mathbf{k}} \left\{ \frac{\chi_{\alpha m \mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}_1) \chi_{\beta m \mathbf{k}}^{(+)*}(\mathbf{r}_2)}{\omega + \mu - \varepsilon_{m \mathbf{k}}^{(+)} + i0} + \frac{\chi_{\alpha m \mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \chi_{\beta m \mathbf{k}}^{(-)*}(\mathbf{r}_2)}{\omega + \mu - \varepsilon_{m \mathbf{k}}^{(-)} - i0} \right\} \quad (62.3)$$

с прежним смыслом обозначений $\varepsilon^{(+)}$ и $\varepsilon^{(-)}$; во втором члене произведено переобозначение $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$.

Наличие незатухающих одночастичных элементарных возбуждений вблизи ферми-поверхности металла проявляется в том, что при ε вблизи μ энергия состояния зависит только от $\mathbf{k}$. Для таких состояний функция $G_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ имеет полюс при $\omega = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$. Вблизи полюса она имеет вид

$$G_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\chi_{\alpha \mathbf{k}}(\mathbf{r}_1) \chi_{\beta \mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_2)}{\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) + i0 \cdot \text{sign } \omega}. \quad (62.4)$$

При наличии вырождения по спинам должно еще производиться суммирование по двум спиновым состояниям.

Определение энергетического спектра по гриновской функции сводится, в принципе, к задаче о собственных значениях некоторого интегро-дифференциального линейного оператора.

Основные принципы диаграммной техники в координатном пространстве для рассматриваемого случая остаются теми же, что и в обычной ферми-жидкости. В частности, введя собственно-энергетическую функцию $\Sigma_{\alpha\beta}(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ (как сумму определенной в § 14 совокупности диаграмм), можно записать гриновскую функцию $G_{\alpha\beta}(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ в виде ряда (14.3), который суммируется к диаграммному уравнению (14.4). Тонкая сплошная линия на этих диаграммах обозначает гриновскую функцию $G_{\alpha\beta}^{(0)}(t, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ свободных электронов — не взаимодействующих ни с другими электронами, ни с решеткой. Согласно (9.6), эта функция удовлетворяет уравнению

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta_1}{2m} + \mu \right) G_{\alpha\beta}^{(0)}(t, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \delta_{\alpha\beta} \delta(t) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

Применив слева к уравнению (14.4) оператор (...) и перейдя затем к фурье-компонентам по времени, получим искомое уравнение

$$\begin{aligned} \left(\omega + \mu + \frac{\Delta_1}{2m} \right) G_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \int \Sigma_{\alpha\gamma}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}') G_{\gamma\beta}(\omega; \mathbf{r}', \mathbf{r}_2) d^3x' = \\ = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (62.5)$$

Вблизи полюса G -функции (по переменной ω), правая часть уравнения может быть опущена, и получается однородное интегро-дифференциальное уравнение, собственные значения которого и определяют энергетический спектр системы. При этом индекс β и переменная $\mathbf{r}_2$ не затрагиваются никакими операциями, т. е. играют в уравнении роль несущественных параметров. Для определения спектра можно писать поэтому уравнение вида¹⁾

$$\left(\omega + \mu + \frac{\Delta}{2m}\right) \chi_{\alpha}(\mathbf{r}) - \int \Sigma_{\alpha\gamma}(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \chi_{\gamma}(\mathbf{r}') d^3x' \equiv (\omega - \hat{L}) \chi(\mathbf{r}) = 0. \quad (62.6)$$

Для электронной ферми-жидкости в металле оно заменяет собой обычное уравнение Шредингера. Его собственные значения определяют, как уже сказано, спектр согласно $\omega = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$; соответствующими же собственными функциями являются функции $\chi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ из (62.4) (как это очевидно из прямой подстановки (62.4) в (62.5)). Поскольку затухание возбуждений вблизи ферми-поверхности мало, оператор $\hat{L}$ при малых ω эрмитов (с точностью до членов порядка ω).

Для перехода к случаю наличия слабого внешнего магнитного поля надо заметить, что при калибровочном преобразовании векторного потенциала ψ -операторы преобразуются как волновые функции (ср. (44.3), (44.4)), а потому гриновская функция $G_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ преобразуется как произведение ψ -функций $\psi(\mathbf{r}_1) \psi^*(\mathbf{r}_2)$. Это значит, что и функция $\chi(\mathbf{r})$ в (62.6) должна преобразовываться как обычная ψ -функция. Но, проследив за произведенными в § 56 рассуждениями, легко обнаружить, что в них использованы только периодичность решетки кристалла, общие свойства калибровочного преобразования и тот факт, что энергетический спектр определяется по собственным значениям некоторого гамильтониана; роль последнего играет в данном случае оператор $\hat{L}$ в (62.6)²⁾. Поэтому ясно, что и результат —

¹⁾ Для микроскопически однородной ферми-жидкости это уравнение в импульсном представлении сводится к уравнению (14.13)

$$\omega + \mu = \varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}) + \Sigma(\omega, \mathbf{p}).$$

²⁾ Может показаться существенным отличием в этой связи, что в (62.6) оператор $\hat{L}$ сам зависит от ω . В действительности это означает лишь неявный способ записи гамильтониана. При малых ω (вблизи ферми-поверхности) можно перейти и к явной записи, разложив $\hat{L} \approx L_0 + \omega \hat{L}_1$ и умножив затем уравнение $\hat{L}_0 \chi = \omega(1 - \hat{L}_1) \chi$ слева на оператор $(1 - \hat{L}_1)^{-1}$.

правило перехода от спектра в отсутствие поля к спектру при наличии слабого поля — будет тем же: новый спектр определяется по собственным значениям гамильтониана

$$\varepsilon \left(\mathbf{K} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right), \quad \hat{\mathbf{r}} = i \frac{\partial}{\partial \mathbf{K}}, \quad (62.7)$$

где $\varepsilon(\mathbf{k})$ — спектр в отсутствие поля. Разумеется, смысл самой функции $\varepsilon(\mathbf{k})$ теперь отличается от ее смысла в (56.7) — в ней учитывается коллективное взаимодействие всех электронов в системе.

Далее, поскольку проведенное в § 57, 58 рассмотрение квазиклассического случая целиком основывалось на существовании гамильтониана вида (62.7), то и эти результаты непосредственно переносятся на электронную жидкость. При этом, однако, возникает вопрос о том, что именно следует понимать под напряженностью поля, действующего на электрон проводимости (а тем самым — и под векторным потенциалом $\mathbf{A}$). Строго говоря, это должно быть точное микроскопическое значение поля, создаваемого в данной точке $\mathbf{r}$ всеми электронами (и внешним полем). Но в квазиклассическом случае характерные размеры r_H области, в которой происходит взаимодействие («ларморов радиус орбит»), велики по сравнению с порядком величины межэлектронных расстояний (совпадающим с постоянной решетки a). Это обстоятельство приводит к автоматическому усреднению микроскопического поля. Происхождение этого усреднения можно пояснить следующими рассуждениями.

Представим микроскопическую напряженность в виде суммы ее среднего значения (которое, по принятой в макроскопической электродинамике терминологии, есть магнитная индукция $\mathbf{B}$) и быстро меняющейся части $\tilde{\mathbf{H}}$. Векторный потенциал, отвечающий однородному полю $\mathbf{B}$, возрастает на всем протяжении размеров орбиты, принимая характерные значения $\sim Br_H$. Потенциал же, отвечающий осциллирующему на расстояниях $\sim a$ полю $\tilde{\mathbf{H}}$, не возрастает систематически и набирает лишь значения $\sim Ba$, которыми можно пренебречь по сравнению с Br_H . Между тем, как было объяснено в § 56, именно потенциал поля определяет квантование движения электронов. Таким образом, мы приходим к выводу, что достаточно учитывать лишь потенциал $\mathbf{A}$ однородной индукции $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$, которая и будет играть роль действующего на электрон поля (*D. Shoenberg*, 1962). Мы увидим ниже (конец § 63), что это обстоятельство может привести к некоторым новым явлениям в намагничении металлов.

Таким образом, правило квазиклассического квантования (58.7) для электронной жидкости в металле записывается как

$$S(\varepsilon, k_z) = \frac{2\pi|e|}{\hbar c} B \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (62.8)$$

где теперь $S(\varepsilon, k_z)$ — площадь сечения истинных изоэнергетических поверхностей электронов проводимости металла (близких к его ферми-поверхности).

Как и в задаче об одном электроне в решетке с центром инверсии¹⁾, учет спина электронов проводимости приводит к расщеплению уровней в магнитном поле на две компоненты:

$$\varepsilon_{n\sigma}(k_z) = \varepsilon_n(k_z) + \sigma\beta\xi(k_z)B, \quad \sigma = \pm 1. \quad (62.9)$$

Величина $\xi(k_z)$ представляет собой результат усреднения некоторой функции $\xi(\mathbf{k})$ по квазиклассической траектории. При этом, с достаточной точностью, все траектории можно считать лежащими на самой ферми-поверхности, так что результат усреднения зависит только от k_z . Подчеркнем, что для электронной ферми-жидкости отличие величины $\xi(k_z)$ от единицы (ее значения для свободных электронов) связано не только со спин-орбитальным взаимодействием, но и с обменным взаимодействием электронов друг с другом.

§ 63. Эффект де Гааза–ван Альвена

Магнитная восприимчивость металла в слабых магнитных полях ($\beta B \ll T$, β — магнетон Бора, B — магнитная индукция) не может быть вычислена в общем виде. Дело в том, что в рамках теории ферми-жидкости можно рассматривать только парамагнитную (спиновую) часть восприимчивости: эта часть определяется электронами проводимости вблизи ферми-поверхности, поскольку спины электронов в глубине распределения взаимно скомпенсированы. В диамагнитную же (орбитальную) часть восприимчивости вносят вклад все электроны, в том числе из глубины распределения, где понятие квазичастиц в теории ферми-жидкости уже теряет смысл. Между тем обе части восприимчивости, вообще говоря, одного порядка величины, а реальный физический смысл имеет только их сумма.

Обратимся к «сильным» полям, когда

$$T \lesssim \beta B \ll \mu, \quad (63.1)$$

¹⁾ Фактически кристаллические решетки всех металлов обладают центром инверсии.

т. е. интервалы между уровнями Ландау сравнимы с температурой, но все еще малы по сравнению с химическим потенциалом. В этом случае пара- и диамагнитная части намагниченности вообще не могут быть разделены, но здесь ситуация меняется в том отношении, что в намагниченности металла появляется осцилляционная зависимость от напряженности поля (*эффект де Гааза-ван Альвена*)¹⁾. Монотонная часть намагниченности и здесь зависит от всех электронов в металле и не может быть вычислена в рамках теории ферми-жидкости. Осциллирующая же часть намагниченности определяется, как мы увидим, лишь электронами проводимости в окрестности ферми-поверхности и может быть рассмотрена в общем виде (И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, 1955). Именно эта часть и будет интересовать нас здесь.

Осцилляционная зависимость намагниченности от поля является следствием квантования уровней энергии орбитального движения электронов. Но квантованию подвергаются только состояния, отвечающие движению электронов по замкнутым (в $\mathbf{k}$ -пространстве) траекториям. Поэтому вклад в осцилляционную часть термодинамических величин возникает только от электронов проводимости на замкнутых сечениях изоэнергетических поверхностей плоскостями, перпендикулярными заданному направлению поля. Мы будем считать, что на этих сечениях выполняется условие квазиклассичности, т. е. что определяемые равенством (62.8) числа n велики:

$$\hbar c S / |e| B \gg 1. \quad (63.2)$$

Для типичных ферми-поверхностей в металлах линейные размеры сечений $\sim 1/a$, так что $S \sim a^{-2}$, и тогда условие (63.2) заведомо выполняется (ср. примечание на с. 302).

Квазиклассические уровни даются (с учетом спина) выражением (62.9), где $\varepsilon_n(k_z)$ — решения уравнения (62.8); каждому уровню отвечает число состояний, даваемое формулой (58.10). Поэтому статистическая сумма, определяющая термодинамический потенциал Ω (функция μ , T и объема V системы), имеет вид

$$\Omega = -T \frac{|e| B V}{4\pi^2 \hbar c} \sum_n \int \sum_{s, \sigma} \ln \left\{ 1 + \exp \frac{\mu - \varepsilon_{n\sigma}^{(s)}(k_z)}{T} \right\} dk_z. \quad (63.3)$$

Индекс s нумерует отдельные листы изоэнергетической поверхности; этот индекс и знак суммирования по нему ниже для краткости опускаем. Интегрирование по dk_z производится по такому

¹⁾ Ср. V, § 60, где этот эффект рассматривался для идеального электронного газа.

интервалу, чтобы в него были включены все различные (т. е. за исключением их периодических повторений) сечения всех листов изоэнергетических поверхностей.

Прежде всего выделим из Ω осциллирующую с полем часть (обозначим ее через $\tilde{\Omega}$), преобразовав сумму (63.3) с помощью формулы Пуассона¹⁾:

$$\frac{1}{2} F(0) + \sum_{n=1}^{\infty} F(n) = \int_0^{\infty} F(x) dx + 2 \operatorname{Re} \sum_{l=1}^{\infty} \int_0^{\infty} F(x) e^{2\pi i l x} dx. \quad (63.4)$$

Первый член этой формулы, примененной к (63.3), дает неосциллирующий вклад в Ω ; опустив его, пишем

$$\tilde{\Omega} = -\frac{|e| B V T}{4\pi^2 c \hbar} 2 \operatorname{Re} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{\sigma=\pm 1} \tilde{\mathbf{I}}_{l\sigma}, \quad (63.5)$$

где $\tilde{\mathbf{I}}_{l\sigma}$ — осциллирующая часть интеграла

$$\mathbf{I}_{l\sigma} = \int_0^{\infty} dn \int \ln \left\{ 1 + \exp \frac{\mu_{\sigma} - \varepsilon_n(k_z)}{T} \right\} e^{2\pi i l n} dk_z \quad (63.6)$$

и введено также обозначение $\mu_{\sigma} = \mu - \sigma \beta \xi B$.

Для дальнейшего преобразования введем функцию

$$n(\varepsilon, k_z) = \frac{c \hbar S(\varepsilon, k_z)}{2\pi |e| B} - \frac{1}{2} \quad (63.7)$$

(ср. (62.8)) и перейдем от интегрирования по dn в (63.6) к интегрированию по $d\varepsilon$:

$$\mathbf{I}_l = \int_0^{\infty} \int \ln \left\{ 1 + \exp \frac{\mu_{\sigma} - \varepsilon}{T} \right\} e^{2\pi i l n} \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} dk_z d\varepsilon; \quad (63.8)$$

выбор нижнего предела интегрирования по $d\varepsilon$ (условно положенного равным нулю) безразличен, так как в интеграле все равно будет существенна лишь окрестность значения $\varepsilon = \mu_{\sigma}$.

Поскольку функция $n(\varepsilon, k_z)$ велика, экспоненциальный множитель в подынтегральном выражении в (63.8) — быстро осциллирующая функция k_z . Эти осцилляции погашают интеграл

¹⁾ См. V, § 60. Тот факт, что в (63.4) член суммы $F(0)$ стоит с коэффициентом $1/2$, неважен, так как в сумме (63.3) все равно существенны лишь члены с большими n .

по dk_z , и потому основной вклад в него возникает от тех областей переменной k_z , в которых функция $n(\varepsilon, k_z)$ меняется наиболее медленно (так что и осцилляции наименее медленны). Другими словами, основной вклад в интегралы дают области вблизи точек экстремумов n как функции от k_z (при каждом заданном ε). Пусть $k_{z\text{ex}}(\varepsilon)$ — одна из таких точек; вблизи нее вычисляем интеграл методом перевала: в показателе экспоненты пишем

$$n(\varepsilon, k_z) \approx n_{\text{ex}}(\varepsilon) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 n}{\partial k_z^2} \right)_{\text{ex}} (k_z - k_{z\text{ex}})^2, \quad n_{\text{ex}}(\varepsilon) = n(\varepsilon, k_{z\text{ex}}(\varepsilon)),$$

а в неэкспоненциальных множителях берем их значение при $k_z = k_{z\text{ex}}$. В результате найдем, что каждая из экстремальных точек дает в интеграл вклад

$$\int_0^\infty \ln \left\{ 1 + \exp \frac{\mu_\sigma - \varepsilon}{T} \right\} \frac{dn_{\text{ex}}}{d\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{l}} \left| \frac{\partial^2 n}{\partial k_z^2} \right|_{\text{ex}}^{-1/2} \exp \left\{ 2\pi i l n_{\text{ex}} \pm \frac{i\pi}{4} \right\} d\varepsilon,$$

замена $\partial n(\varepsilon, k_z)/\partial \varepsilon$ на $dn_{\text{ex}}/d\varepsilon$ допустима, поскольку в точке экстремума $\partial n/\partial k_z = 0$. Знаки $+$ или $-$ в показателе экспоненты относятся соответственно к случаям, когда $k_{z\text{ex}}$ является точкой минимума или максимума функции $n(\varepsilon, k_z)$ ¹⁾. Преобразуем это выражение интегрированием по частям, написав

$$\frac{dn_{\text{ex}}}{d\varepsilon} \exp(2\pi i l n_{\text{ex}}) d\varepsilon = \frac{1}{2\pi i l} d \exp(2\pi i l n_{\text{ex}}(\varepsilon))$$

и учитывая, что медленно меняющуюся функцию $|\partial^2 n/\partial k_z^2|_{\text{ex}}$ можно не дифференцировать. Проинтегрированный член не приводит к осцилляционной зависимости от поля; опустив его, имеем

$$\tilde{\mathbf{I}}_{l\sigma} = \sum_{\text{ex}} \frac{e^{\pm i\pi/4}}{2\pi i T l^{3/2}} \int_0^\infty \frac{\exp(2\pi i l n_{\text{ex}}) d\varepsilon}{\left(1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu_\sigma}{T} \right) |\partial^2 n/\partial k_z^2|_{\text{ex}}^{1/2}}, \quad (63.9)$$

где суммирование производится по всем экстремальным точкам (смысл которых будет еще обсужден ниже).

Множитель $\exp(2\pi i l n_{\text{ex}})$ в числителе подынтегрального выражения — быстро осциллирующая функция ε . Эти осцилляции

¹⁾ Перевальный интеграл вида $\int e^{iaz^2} dz$ вычисляется путем замены $z = ue^{i\pi/4}$ или $z = ue^{-i\pi/4}$ при $a > 0$ или $a < 0$, после чего интегрирование по du распространяется от $-\infty$ до ∞ .

погашают интеграл по $d\varepsilon$ везде, за исключением области $\varepsilon - \mu_\sigma \sim T$, в которой быстро меняется знаменатель. Сама же функция $n_{\text{ex}}(\varepsilon)$ в этой области меняется плавно и потому может быть представлена в виде

$$n_{\text{ex}}(\varepsilon) \approx n_{\text{ex}}(\mu_\sigma) + n'_{\text{ex}}(\mu_\sigma)(\varepsilon - \mu_\sigma);$$

множитель же $|\partial^2 n / \partial k_z^2|_{\text{ex}}^{-1/2}$ просто заменяется его значением при $\varepsilon = \mu_\sigma$. После этого, перейдя от интегрирования по ε к интегрированию по $x = (\varepsilon - \mu_\sigma)/T$ и заменив нижний предел $-\mu_\sigma/T$ на $-\infty$ (поскольку $\mu/T \gg 1$), получим¹⁾

$$\tilde{I}_{l\sigma} = - \sum_{\text{ex}} \frac{\exp[2\pi i l n_{\text{ex}}(\mu_\sigma) \pm i\pi/4]}{2 l^{3/2} |\partial^2 n / \partial k_z^2|_{\text{ex}, \mu_\sigma}^{1/2}} \text{sh}^{-1} [2\pi^2 l T n'_{\text{ex}}(\mu_\sigma)].$$

При суммировании этого выражения по $\sigma = \pm 1$ можно везде (кроме экспоненциального множителя) заменить μ_σ на μ , поскольку по предположению (63.1) $\beta B \ll \mu$. В фазовом же (экспоненциальном) множителе такая замена недопустима: ввиду большой величины функции $n_{\text{ex}}(\varepsilon)$ уже относительно малое изменение ее аргумента приводит к заметному изменению фазы; здесь, однако, достаточно разложить $n_{\text{ex}}(\mu \pm \beta B)$ по степеням βB , ограничившись линейными членами. В результате получим

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \tilde{I}_{l\sigma} = & - \sum_{\text{ex}} \frac{\exp[2\pi i l n_{\text{ex}}(\mu) \pm i\pi/4]}{l^{3/2} |\partial^2 n / \partial k_z^2|_{\text{ex}, \mu}^{1/2}} \times \\ & \times \text{sh}^{-1} [2\pi^2 l T n'_{\text{ex}}(\mu)] \cos[2\pi l \beta B \xi_{\text{ex}} n'_{\text{ex}}(\mu)], \quad (63.10) \end{aligned}$$

где $\xi_{\text{ex}} = \xi(k_{z\text{ex}})$. Остается выяснить смысл входящих в это выражение величин и подставить его в (63.5).

¹⁾ Использовано значение интеграла

$$I \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iaz}}{e^z + 1} dz = - \frac{i\pi}{\text{sh} \pi \alpha}.$$

Эту формулу можно получить, рассмотрев интеграл по замкнутому контуру в плоскости комплексного z , составленному из вещественной оси, прямой $\text{Im } z = 2\pi$ и двух бесконечно удаленных «боковых» отрезков (для обеспечения сходимости на последних вещественный параметр α заменяем на $\alpha - i0$). Интеграл по этому контуру определяется в полюсе $z = i\pi$, откуда находим $I - e^{-2\pi\alpha} I = -2\pi i e^{-\pi\alpha}$.

Согласно определению (63.7) функция $n_{\text{ex}}(\varepsilon)$ связана с экстремальным значением $S_{\text{ex}}(\varepsilon)$ площади сечения изоэнергетической поверхности $S(\varepsilon, k_z)$ как функции k_z , а ее значение при $\varepsilon = \mu$ есть площадь экстремального сечения ферми-поверхности. Для иллюстрации на рис. 15 изображены экстремальные (два максимальных и одно минимальное) сечения гантелеобразной ферми-поверхности; они перпендикулярны направлению поля, указанному стрелкой.

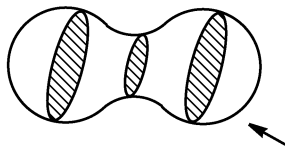


Рис. 15.

Суммирование по ε в (63.10) производится по всем экстремальным замкнутым сечениям всех листов ферми-поверхности. Мы введем также, для упрощения записи формул, циклотронную массу электрона проводимости при его движении по экстремальной замкнутой траектории. Согласно определению (57.6) эта масса

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S(\varepsilon, k_z)}{\partial \varepsilon} \Big|_{\mu, k_{z\text{ex}}} = \frac{\hbar^2}{2\pi} S'_{\text{ex}}(\mu),$$

где $S_{\text{ex}}(\varepsilon) = S(\varepsilon, k_{z\text{ex}}(\varepsilon))$; последнее равенство снова связано с тем, что в точке экстремума $\partial S(\varepsilon, k_z)/\partial k_z = 0$.

В результате приходим к следующей окончательной формуле для осциллирующей части термодинамического потенциала:

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega} &= \sum_{\text{ex}} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l \Omega_l \cos \left(l \frac{\hbar^2 S_{\text{ex}}}{2m\beta B} \pm \frac{\pi}{4} \right), \\ \Omega_l &= \frac{2V(m\beta B)^{5/2}}{\pi^{7/2} \hbar^3 m^* l^{5/2}} \left| \frac{\partial^2 S(\mu, k_z)}{\partial k_z^2} \right|_{\text{ex}}^{-1/2} \frac{\lambda}{\text{sh } \lambda} \cos \left(\pi l \frac{m^*}{m} \xi_{\text{ex}} \right), \\ \lambda &= l\pi^2 T m^* / m\beta B \end{aligned} \quad (63.11)$$

(m — истинная масса электрона, знаки $+$ или $-$ в аргументе косинуса относятся соответственно к случаям минимальных или максимальных сечений)¹⁾.

¹⁾ Для газа свободных электронов ферми-поверхность — сфера радиуса $k_F = \sqrt{2m\mu}/\hbar$, $S_{\text{ex}} = \pi k_F^2$, и формула (63.11) переходит в формулу (60.5) из V, § 60.

Намагниченность $\mathbf{M}$ (магнитный момент единицы объема) вычисляется как производная¹⁾

$$\mathbf{M} = -\frac{1}{V} \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{B}}. \quad (63.12)$$

При этом дифференцированию в (63.11) должны подвергаться лишь наиболее быстро меняющиеся множители — косинусы. Ввиду анизотропии ферми-поверхности (m^* и S_{ex} зависят от направления поля) направление $\mathbf{M}$ не совпадает, вообще говоря, с направлением $\mathbf{B}$. Для осциллирующей части продольной (в направлении поля) намагниченности находим

$$\begin{aligned} \widetilde{M}_z &= \sum_{\text{ex}} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} M_l \sin \left(l \frac{\hbar^2 S_{\text{ex}}}{2m\beta B} \pm \frac{\pi}{4} \right), \\ M_l &= \frac{B^{1/2} (m\beta)^{3/2} S_{\text{ex}}}{\pi^{7/2} m^* l^{3/2} \hbar} \left| \frac{\partial^2 S(\mu, k_z)}{\partial k_z^2} \right|_{\text{ex}}^{-1/2} \frac{\lambda}{\text{sh } \lambda} \cos \left(\pi l \frac{m^*}{m} \xi_{\text{ex}} \right). \end{aligned} \quad (63.13)$$

Выражения (63.11) и (63.13) — сложные осциллирующие функции магнитного поля, причем они содержат, вообще говоря, члены различной периодичности: члены, происходящие от каждого из экстремальных сечений ферми-поверхности имеют свой

¹⁾ Тот факт, что дифференцирование производится по $\mathbf{B}$, требует пояснения. К формуле (63.12) можно прийти следующим образом. Изменение гамильтониана системы при бесконечно малом изменении векторного потенциала поля есть

$$\delta \widehat{H} = -\frac{1}{c} \int \widehat{\mathbf{j}} \delta \mathbf{A} dV,$$

где $\widehat{\mathbf{j}}$ — оператор плотности тока (см. III, (115.1)). Изменение же термодинамического потенциала Ω получается усреднением $\delta \widehat{H}$ (при заданных значениях μ , T , V). Но тот факт, что квантование системы определяется (как было показано в § 62) не точным микроскопическим полем $\mathbf{H}$, а его макроскопическим средним значением $\mathbf{B}$, означает, что и в $\widehat{\delta H}$ под $\mathbf{A}$ надо понимать векторный потенциал среднего поля $\mathbf{B}$. Вариацию $\delta \mathbf{A}$ можно, следовательно, вынести из-под знака усреднения, и тогда

$$\delta \Omega = \langle \delta H \rangle = -\frac{1}{c} \int \langle \mathbf{j} \rangle \delta \mathbf{A} dV.$$

Введя теперь магнитный момент, по определению $\langle \mathbf{j} \rangle = c \text{rot } \mathbf{M}$, и произведя интегрирование по частям, получим

$$\delta \Omega = -\delta \mathbf{B} \int \mathbf{M} dV.$$

период по переменной $1/B$, равный

$$\Delta \frac{1}{B} = \frac{4\pi m\beta}{\hbar^2 S_{\text{ex}}} = \frac{2\pi|e|}{chS_{\text{ex}}}. \quad (63.14)$$

Отметим, что эти периоды не зависят от температуры.

Температурная же зависимость амплитуд осцилляций определяется множителем $\lambda/\text{sh } \lambda$. При $\lambda \gg 1$ амплитуды убывают экспоненциально, и осцилляции фактически исчезают. При $\lambda \lesssim 1$ множитель $\lambda/\text{sh } \lambda \sim 1$, и порядок величины амплитуд определяется остальными множителями в Ω_l и M_l ; к этому случаю и относятся все последующие оценки.

Для грубой оценки положим

$$m^* \sim m, \quad \mu \sim \hbar^2 k_F^2/m, \quad S \sim k_F^2,$$

где $k_F \sim 1/a$ — линейные размеры ферми-поверхности. Тогда получим

$$\tilde{\Omega} \sim V \frac{(m\beta B)^{5/2}}{\hbar^3} \sim V n \mu \left(\frac{\beta B}{\mu} \right)^{5/2}, \quad \tilde{M} \sim n \beta \left(\frac{\beta B}{\mu} \right)^{1/2}, \quad (63.15)$$

где $n \sim k_F^3$ — плотность числа электронов. Что же касается монотонно зависящей от поля части намагниченности (обозначим ее через $\overline{M}$), то ее можно оценить, положив

$$\overline{M} \sim \overline{\chi} B \sim \beta^2 \frac{mk_F}{\hbar^2} B \sim n \beta \frac{\beta B}{\mu}, \quad (63.16)$$

где $\overline{\chi}$ — «монотонная» часть магнитной восприимчивости, оцененная, например, по формуле для восприимчивости электронного газа в слабых полях (см. V, § 59). Соответственно монотонная часть термодинамического потенциала $\overline{\Omega} \sim V \overline{M} B \sim V n \mu (\beta B/\mu)^2$. Сопоставление написанных выражений показывает, что осциллирующая часть термодинамического потенциала мала по сравнению с его монотонной магнитной частью:

$$\tilde{\Omega}/\overline{\Omega} \sim (\beta B/\mu)^{1/2} \ll 1,$$

и тем более — по сравнению с его значением $\Omega_0 \sim V n \mu$ в отсутствие поля; $\tilde{\Omega}/\Omega_0 \sim (\beta B/\mu)^{5/2}$. Осциллирующая же часть намагниченности, напротив, велика по сравнению с ее монотонной частью

$$\tilde{M}/\overline{M} \sim (\mu/\beta B)^{1/2} \gg 1.$$

По поводу всей изложенной теории осцилляций намагниченности следует отметить, что она относится к электронной жидкости в идеальном кристалле, и в ней не учитывается возможное

влияние на эффект процессов рассеяния электронов проводимости на фононах и на дефектах решетки (например, на атомах примесей). Эти процессы приводят к неопределенности в энергии электронов: $\Delta\epsilon \sim \hbar/\tau \sim \hbar v_F/l$ (где τ — время между столкновениями; l — длина свободного пробега; v_F — скорость электронов). Размытие же резких уровней энергии приводит, в свою очередь, к сглаживанию осцилляций намагниченности. Условие допустимости пренебрежения процессами рассеяния состоит в малости неопределенности $\Delta\epsilon$ по сравнению с интервалами между уровнями, т. е. должно быть:

$$\hbar\omega_B \gg \hbar v_F/l. \quad (63.17)$$

При $T \rightarrow 0$ допустимы (условием (63.1)) сколь угодно малые значения B (точнее — ограниченные лишь условием (63.17)). При этом намагниченность $\widetilde{M}$ может, в принципе, стать сравнимой с самой индукцией B (так как $\widetilde{M}/B \sim \bar{\chi}(\mu/\beta B)^{1/2}$), но еще раньше становится большой (по модулю) магнитная восприимчивость $\chi = \delta M/\delta H^1$). Действительно, снова заметив, что дифференцированию должны подвергаться только осциллирующие множители, найдем

$$|\widetilde{\chi}| \sim \bar{\chi}(\mu/\beta B)^{3/2}. \quad (63.18)$$

В такой ситуации осцилляции намагниченности приводят к появлению на кривой зависимости макроскопической напряженности $H = B - 4\pi M(B)$ от индукции B ряда последовательных перегибов, как это показано схематически на рис. 16 (A. B. Pippard, 1963). Но условие термодинамической устойчивости требует, чтобы было ²⁾

$$\left(\frac{\partial H}{\partial B}\right)_{T,\mu} > 0.$$

Поэтому состояния, отвечающие таким участкам кривой, как bc , невозможны. Возникающая ситуация вполне аналогична той,

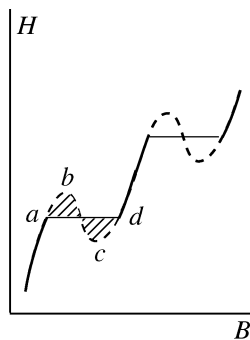


Рис. 16.

¹⁾ Во избежание излишних усложнений в следующем ниже качественном рассмотрении возникающих эффектов мы отвлекаемся от влияния анизотропии.

²⁾ Ср. VIII, § 18, где аналогичное условие выведено для электрического случая.

которая приводит к фазовому переходу в веществе при появлении перегиба на кривой зависимости давления от объема (ср. V, § 84, 152). Равновесной кривой зависимости $H(B)$ будет в действительности соответствовать прямолинейный горизонтальный отрезок ad , проведенный так, чтобы заштрихованные на рисунке две площади были равны; участки же ab и cd отвечают метастабильным состояниям.

Пусть металлический образец представляет собой цилиндр с осью, направленной вдоль внешнего поля $\mathfrak{H}$. Тогда напряженность H внутри цилиндра совпадает с $\mathfrak{H}$ и по мере увеличения последнего тело будет испытывать последовательные фазовые переходы со скачкообразными изменениями индукции: каждый раз при достижении такой точки, как a , индукция меняется скачком от значения B_a к значению B_d ¹⁾. Если же образец представляет собой плоскую пластинку в перпендикулярном ей магнитном поле, то происходит разбиение тела на чередующиеся слои (*диамагнитные домены*) с различной индукцией — вполне аналогично разбиению проводника в промежуточном состоянии на нормальные и сверхпроводящие слои (*J. H. Condon, 1966*). Внешнее поле $\mathfrak{H}$ совпадает в этом случае со значением магнитной индукции, усредненным по всем слоям. Так, в интервале $B_a < \mathfrak{H} < B_d$ пластинка разбивается на слои с индукциями B_a и B_d и, по мере возрастания $\mathfrak{H}$, объем вторых возрастает за счет объема первых.

§ 64. Электрон-фононное взаимодействие

До сих пор мы рассматривали электроны проводимости в кристалле, отвлекаясь от их взаимодействия с колебаниями решетки, т. е. с фононами. Это взаимодействие выражает тот факт, что деформация решетки изменяет поле, в котором движется электрон; это изменение поля называют *деформационным потенциалом*.

Электрон-фононное взаимодействие играет определяющую роль в кинетических явлениях в полупроводниках и металлах, но здесь нас будет интересовать только качественное влияние этого взаимодействия на энергетический спектр электронов. Для его изучения целесообразно отвлечься от усложнений, связанных с анизотропией решетки и ее микроскопической неоднородностью. Другими словами, рассматриваем среду как микроскопически однородную, изотропную жидкость, соответственно чему в ней возможны лишь продольные звуковые колебания.

¹⁾ Предполагается, что поверхностная энергия границы раздела между фазами положительна.

В первом приближении по деформации потенциал, отвечающий такой упрощенной модели, представим в виде

$$U_{\text{деф}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\rho} \int W(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho'(\mathbf{r}') d^3 x', \quad (64.1)$$

где ρ' — переменная часть плотности среды (а ρ — ее постоянное равновесное значение). Функция $W(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ убывает на длинах порядка межатомных расстояний a . Мы упростим выражение (64.1) еще дальше, заметив, что для взаимодействия с фононами с волновыми векторами $k \ll 1/a$ эти расстояния можно считать равными нулю, т. е. положить $W = w\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, где w — постоянная. Тогда $U_{\text{деф}} = \omega \rho'(\mathbf{r})/\rho$. В квантовой теории, в представлении второго квантования, этот потенциал записывается как гамильтониан электрон-фононного взаимодействия

$$\hat{H}_{ep} = \frac{\omega}{\rho} \int \hat{\Psi}_{\alpha}^{+}(t, \mathbf{r}) \hat{\rho}'(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\alpha}(t, \mathbf{r}) d^3 x, \quad (64.2)$$

где операторы $\hat{\Psi}$, $\hat{\Psi}^{+}$ относятся к электронам, а $\hat{\rho}'$ — гейзенберговский оператор плотности, описывающий фононное поле; для свободных (не взаимодействующих с электронами) фононов он дается формулой (24.10).

В математическом аппарате гриновских функций в применении к электрон-фононному взаимодействию появляется наряду с гриновской функцией электронов G еще и фононная гриновская функция, определяемая как

$$D(X_1, X_2) \equiv D(X_1 - X_2) = -i \langle T \hat{\rho}'(X_1) \hat{\rho}'(X_2) \rangle, \quad (64.3)$$

причем хронологическое произведение раскрывается по правилу (31.2), отвечающему случаю бозонов. Для свободных фононов гриновская функция в импульсном представлении

$$D^{(0)}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\rho k}{2u} \left\{ \frac{1}{\omega - uk + i0} - \frac{1}{\omega + uk - i0} \right\} = \frac{\rho k^2}{\omega^2 - u^2 k^2 + i0} \quad (64.4)$$

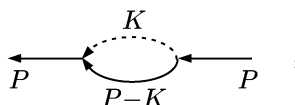
(см. задачу к §31; в промежуточных формулах полагаем $\hbar = 1$).

Рассматривая электрон-фононное взаимодействие как малое возмущение, можно построить основанную на операторе (64.2) диаграммную технику подобно тому, как это было сделано в §13 для парного взаимодействия фермионов. Не повторяя заново всех рассуждений, сформулируем получающиеся правила составления диаграмм (в импульсном представлении)¹⁾.

¹⁾ Структура выражения (64.2) для оператора электрон-фононного взаимодействия аналогична структуре оператора электрон-фотонного взаимодействия в квантовой электродинамике. В связи с этим аналогичны и правила диаграммной техники в обоих случаях.

Основными элементами диаграмм являются электронные (сплошные) и фононные (штриховые) линии, каждой из которых приписывается определенный «4-импульс». Электронной линии с 4-импульсом P ставится в соответствие множитель $iG_{\alpha\beta}^{(0)} = i\delta_{\alpha\beta}G^{(0)}(P)$ — гриновская функция свободных электронов. Фононной линии с 4-импульсом K сопоставляется множитель $iD^{(0)}(K)$ — гриновская функция свободных фононов. В каждой вершинной точке диаграммы сходятся две сплошные и одна штриховая линии; такой точке дополнительно сопоставляется множитель $-\imath\omega/\rho$.

Так, первая поправка к электронной гриновской функции изображается диаграммой¹⁾

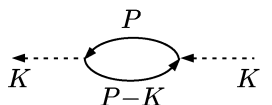


$$(64.5)$$

которой отвечает аналитическое выражение

$$i\delta G(P) = -\frac{\omega^2}{\rho^2} [G^{(0)}(P)]^2 \int G^{(0)}(P-K) D^{(0)}(K) \frac{d^4 K}{(2\pi)^4}. \quad (64.6)$$

Первая поправка к фононной гриновской функции изображается диаграммой



$$(64.7)$$

или в аналитическом виде

$$i\delta D(K) = 2 \frac{\omega^2}{\rho^2} [D^{(0)}(K)]^2 \int G^{(0)}(P) G^{(0)}(P-K) \frac{d^4 P}{(2\pi)^4} \quad (64.8)$$

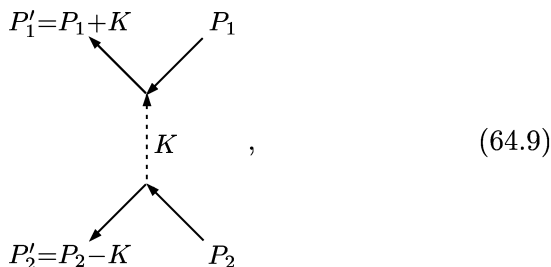
(коэффициент 2 возникает от свертывания спиновых множителей: $\delta_{\alpha\beta}\delta_{\beta\alpha} = 2$; учтен также множитель -1 , связанный с наличием одной замкнутой фермионной петли — ср. § 13).

Покажем, что электрон-фононное взаимодействие в металле приводит к появлению «эффективного притяжения» между

¹⁾ Диаграмма с замкнутой на себя электронной линией (подобная диаграмме (13.13а)) отсутствует ввиду того, что $D^{(0)}(0) = 0$. При этом подразумевается, что переход к пределу $\mathbf{k} \rightarrow 0$ совершается прежде, чем $\omega \rightarrow 0$. Это отражает то обстоятельство, что в координатном пространстве интегрирование по d^3x (как раз и означающее в данном случае переход к $\mathbf{k} \rightarrow 0$) содержится уже в определении гамильтониана (64.2) и потому совершается до интегрирования по времени, возникающего при применении теории возмущений к этому гамильтониану.

электронами вблизи ферми-поверхности. Оно может быть описано наглядно как результат испускания виртуального фонона одним электроном и его поглощения другим (*J. Bardeen, 1950; H. Fröhlich, 1950*).

Рассмотрим диаграмму



$$(64.9)$$

изображающую рассеяние двух электронов, осуществляющееся через обмен виртуальными фононами; 4-импульсы $P = (\varepsilon - \mu, \mathbf{p})$, $K = (\omega, \mathbf{k})$, μ — химический потенциал электронов при $T = 0$, совпадающий с граничной энергией ε_F . Этой диаграмме отвечает вершинная функция

$$\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta} = \Gamma \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}, \quad i\Gamma = \left(-\frac{i\omega}{\rho}\right)^2 iD^{(0)}(K),$$

или

$$\Gamma = -\frac{\omega^2 k^2}{\rho(\omega^2 - u^2 k^2 + i0)}, \quad (64.10)$$

причем $\hbar\omega = \varepsilon'_1 - \varepsilon_1$, $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_1$.

По порядку величины, импульсы электронов вблизи ферми-поверхности $p \sim p_F \sim \hbar/a$. Рассеянию электронов на угол ~ 1 отвечает импульс фонона $\hbar k \sim \hbar/a$ и его энергия $\hbar k u \sim \hbar u/a \sim \hbar\omega_D$, где ω_D — дебаевская частота (для металлов $\hbar\omega_D \ll \varepsilon_F$). С другой стороны, электрон не может отдать энергию большую, чем $\varepsilon - \varepsilon_F$. Поэтому, если для обоих электронов $|\varepsilon - \varepsilon_F| \ll \omega_D$, то заведомо

$$\Gamma \approx \omega^2 / \rho u^2 > 0. \quad (64.11)$$

Учитывая смысл Γ как амплитуды рассеяния (§ 16), мы видим, что ее знак соответствует притяжению между частицами. Подчеркнем, что этот результат относится лишь к электронам в сравнительно узком слое (ширины $\sim \hbar\omega_D$ по энергии) импульсного

пространства вблизи ферми-поверхности. Это обстоятельство было уже использовано в § 43 для установления величины параметра обрезания в теории сверхпроводимости металлов¹⁾.

§ 65. Влияние электрон-фононного взаимодействия на электронный спектр в металле

Рассмотрим вопрос о влиянии, оказываемом электрон-фононным взаимодействием на энергетический спектр электронов в металле²⁾.

В § 14 было показано, что для спектра фермиевского типа поправка к закону дисперсии $\varepsilon(\mathbf{p})$ (по сравнению со спектром системы свободных фермионов) определяется разностью

$$\delta\varepsilon(\mathbf{p}) = \Sigma(\varepsilon - \mu, \mathbf{p}) - \Sigma(0, \mathbf{p}), \quad (65.1)$$

где $\Sigma = G^{(0)-1} - G^{-1}$ — собственно-энергетическая функция. В данном же случае речь идет о поправке, вызванной взаимодействием с фононами, а роль «невозмущенного» играет спектр, учитывающий «прямое» взаимодействие частиц (электронов). Согласно (64.6), имеем³⁾

$$\Sigma(P) = -\delta G^{-1} = \frac{\delta G}{G^{(0)2}} = i \frac{\omega^2}{\rho^2} \int G^{(0)}(P-K) D^{(0)}(K) \frac{d^4 K}{(2\pi)^4}, \quad (65.2)$$

но под $G^{(0)}$ надо понимать теперь гриновскую функцию взаимодействующих друг с другом электронов. Вблизи своего полюса такая функция имеет вид

$$G^{(0)}(\varepsilon - \mu, \mathbf{p}) = Z [\varepsilon - \mu - v_F^{(0)}(p - p_F) + i0 \cdot \text{sign}(\varepsilon - \mu)]^{-1} \quad (65.3)$$

(см. (10.2)); индекс (0) у v_F означает, что в этой величине еще не учтено влияние электрон-фононного взаимодействия.

¹⁾ Что касается постоянной w , то для грубой оценки ее для металлов можно заметить, что изменение энергии электрона должно достигать порядка величины ее самой ($\sim \varepsilon_F$), когда изменение плотности $\rho' \sim \rho$. Отсюда $w \sim \varepsilon_F$.

²⁾ Излагаемые в этом параграфе результаты принадлежат А. Б. Мигдалу (1958).

³⁾ В промежуточных формулах полагаем $\hbar = 1$.

Наша цель состоит теперь в оценке величины (65.1), т. е. интеграла

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon &= \\ &= \frac{i\omega^2}{\rho^2} \int \{G^{(0)}(\varepsilon - \mu - \omega, \mathbf{p} - \mathbf{k}) - G^{(0)}(-\omega, \mathbf{p} - \mathbf{k})\} D^{(0)}(\omega, \mathbf{k}) \} \frac{d^4 K}{(2\pi)^4}. \end{aligned} \quad (65.4)$$

Как видно из последующих вычислений, основной вклад в этот интеграл дает область, в которой импульс $\mathbf{p} - \mathbf{k}$ и энергия $\varepsilon - \omega$ (как и сами $\mathbf{p}$ и ε) лежат вблизи ферми-поверхности, т. е. $k \ll p_F$, $\omega \ll \mu$. По этой причине для функций $G^{(0)}$ можно использовать (65.3).

В сферических координатах в $\mathbf{k}$ -пространстве с осью вдоль $\mathbf{p}$ имеем $d^4 K = 2\pi k^2 dk d\omega d \cos \theta$, где θ — угол между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}$. Вместо $\cos \theta$ введем переменную $p_1 = |\mathbf{p} - \mathbf{k}|$; заметив, что $p_1^2 = p^2 + k^2 - 2pk \cos \theta$, имеем

$$d^4 K = 2\pi k^2 dk d\omega p_1 dp_1 / pk \approx 2\pi k dk d\omega dp_1$$

(мы положили $p_1 \approx p \approx p_F$).

В подынтегральном выражении в (65.4) от p_1 зависит только множитель в фигурных скобках, равный

$$\begin{aligned} \{\dots\} &= -(\varepsilon - \mu)Z[\varepsilon - \mu - \omega - v_F^{(0)}(p_1 - p_F) + i0 \cdot \text{sign}(\varepsilon - \mu - \omega)]^{-1} \times \\ &\quad \times [-\omega - v_F^{(0)}(p - p_F) - i0 \cdot \text{sign} \omega]^{-1}. \end{aligned}$$

Ввиду быстрой сходимости интеграла по $d(p_1 - p_F)$, можно распространить интегрирование до $\pm\infty$; введя переменную $\eta = v_F^{(0)}(p_1 - p_F)$, получим интеграл

$$\begin{aligned} \int \{\dots\} dp_1 &= \\ &= -\frac{(\varepsilon - \mu)Z}{v_F^{(0)}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{[\eta - (\varepsilon - \mu - \omega) - i0 \cdot \text{sign}(\varepsilon - \mu - \omega)][\eta + \omega + i0 \cdot \text{sign} \omega]}. \end{aligned}$$

Если оба полюса подынтегрального выражения находятся по одну сторону от вещественной оси, то интеграл обращается в нуль (в чем убеждаемся, замкнув путь интегрирования в другой полуплоскости). Поэтому интеграл отличен от нуля, лишь если $\varepsilon - \mu > \omega > 0$ или $\varepsilon - \mu < \omega < 0$; в первом случае он равен $-2\pi i Z / v_F^{(0)}$, а во втором $2\pi i Z / v_F^{(0)}$. Учтя также четность

функции $D^{(0)}(\omega, \mathbf{k})$ по переменной ω , находим, таким образом,

$$\delta\varepsilon = \frac{Z\omega^2}{8\pi^2\rho uv_F^{(0)}} \int_0^{|\varepsilon-\mu|} \int \left(\frac{1}{\omega-uk+i0} - \frac{1}{\omega+uk-i0} \right) k^2 d\omega dk. \quad (65.5)$$

Вещественная и мнимая части этого выражения определяют соответственно поправку к спектру квазичастиц (электронов проводимости) и их затухание. Рассмотрим сначала затухание.

Отделяя в (65.5) мнимую часть по правилу (8.11), находим

$$-\text{Im } \delta\varepsilon = \frac{Z\omega^2}{8\pi\rho uv_F^{(0)}} \int k^2 dk; \quad (65.6)$$

интегрирование по k производится по области от 0 до $|\varepsilon - \mu|/u$, в которой полюс $\omega = uk$ подынтегрального выражения в (65.5) лежит в интервале между 0 и $|\varepsilon - \mu|$. Таким образом (в обычных единицах),

$$-\text{Im } \delta\varepsilon = \frac{Z\omega^2|\varepsilon - \mu|^3}{24\pi\hbar^3\rho u^4 v_F^{(0)}}. \quad (65.7)$$

Для грубой оценки этой величины замечаем, что параметры $v_F^{(0)}$ и ω имеют электронное происхождение и выражаются, по порядку величины, лишь через межатомные расстояния a и массу электрона m : $v_F^{(0)} \sim p_F/m \sim \hbar/am$, $\omega \sim \varepsilon_F \sim \hbar^2/ma^2$ (см. примечание на с. 344). Плотность же ρ и скорость звука u зависят еще и от массы ионов M , причем $\rho \propto M$, $u \propto M^{1/2}$, так что $\rho u^4 \propto 1/M$. Поэтому оценку затухания можно записать в виде

$$-\text{Im } \delta\varepsilon \sim |\varepsilon - \mu|^3 (\hbar\omega_D)^{-2}, \quad (65.8)$$

где дебаевская частота $\omega_D \sim u/a \propto M^{-1/2}$.

Строго говоря, оценка (65.8) относится к значениям $|\varepsilon - \mu| \ll \ll \hbar\omega_D$, при которых интегрирование в (65.6) производится по области $k < |\varepsilon - \mu|/u\hbar \ll \omega_D/u$, где действительно применим используемый нами закон дисперсии фононов $\omega = ku$. Но для грубой оценки по порядку величины можно применить (65.8) и на краю области при $\varepsilon - \mu \sim \hbar\omega_D$, где она дает

$$-\text{Im } \delta\varepsilon \sim \hbar\omega_D \sim \varepsilon - \mu. \quad (65.9)$$

Наконец, при $\varepsilon - \mu \gg \hbar\omega_D$ область интегрирования в (65.6) не зависит от $\varepsilon - \mu$, так как полюс $\omega = uk \lesssim \omega_D$ всегда лежит

в интервале между 0 и $\varepsilon - \mu$. В этом случае $\int k^2 dk \sim (\omega_D/u)^3$, и затухание

$$-\text{Im } \delta\varepsilon \sim \hbar\omega_D \ll \varepsilon - \mu. \quad (65.10)$$

Выражения (65.8)–(65.10) определяют специфическое затухание, связанное с испусканием фононов электронами¹⁾. Мы видим, что в непосредственной близости к ферми-поверхности при $|\varepsilon - \mu| \ll \hbar\omega_D$, согласно (65.8), затухание мало ($|\text{Im}(\varepsilon - \mu)| \ll |\varepsilon - \mu|$), так что понятие о квазичастицах — электронах проводимости — имеет вполне четкий смысл. В области же $\varepsilon - \mu \sim \hbar\omega_D$ затухание квазичастицы становится сравнимым с самой ее энергией, спектр размывается и в значительной степени теряет смысл. Однако на еще больших расстояниях над ферми-поверхностью при $\varepsilon - \mu \gg \hbar\omega_D$ (но, разумеется, по-прежнему $\varepsilon - \mu \ll \mu$), согласно (65.10), затухание, оставаясь тем же по абсолютной величине, снова становится малым по сравнению с энергией $\varepsilon - \mu$, и квазичастицы снова приобретают определенный смысл. Разумеется, наряду с фоновым затуханием электронов проводимости всегда имеется также и затухание от электрон-электронных столкновений. Это затухание, характерное для всякой нормальной ферми-жидкости (§ 1), пропорционально $(\varepsilon - \mu)^2$ и по порядку величины $\sim (\varepsilon - \mu)^2/\mu$, т. е. всегда мало в области применимости теории.

Оценим теперь поправку к вещественной части ε , т. е. к самому спектру.

Вещественная часть интеграла по $d\omega$ в (65.5) дается его главным значением

$$\begin{aligned} \text{Re} \int_0^{|\varepsilon - \mu|} D^{(0)}(\omega, \mathbf{k}) d\omega &= \frac{\rho k}{2u} \text{P} \int_0^{|\varepsilon - \mu|} \left\{ \frac{1}{\omega - uk} - \frac{1}{\omega + uk} \right\} d\omega = \\ &= \frac{\rho k}{2u} \ln \left| \frac{\varepsilon - \mu - uk}{\varepsilon - \mu + uk} \right|. \end{aligned}$$

Поэтому для $\text{Re } \delta\varepsilon$ имеем (обычные единицы)

$$\text{Re } \delta\varepsilon = \frac{Z\omega^2}{8\pi^2 \rho u v_F^{(0)}} \int k^2 \ln \left| \frac{\varepsilon - \mu - \hbar uk}{\varepsilon - \mu + \hbar uk} \right| dk. \quad (65.11)$$

¹⁾ Сохранение энергии при рождении квазичастицей фонона малой частоты выражается равенством $(\partial\varepsilon/\partial\mathbf{k}) \delta\mathbf{k} \equiv \mathbf{v} \delta\mathbf{k} = u \delta\mathbf{k}$; оно может выполняться лишь при $v > u$. В металле это условие всегда выполняется, поскольку $v_F \gg u$.

При $\varepsilon - \mu \gg \hbar\omega_D$ логарифм в подынтегральном выражении $\sim \hbar u k / (\varepsilon - \mu)$, и весь интеграл оценивается как $\hbar u k_{\max}^3 / (\varepsilon - \mu) \sim \hbar u / a^3 (\varepsilon - \mu)$. Замечая также, что в силу наличия множителя ρ в знаменателе в (65.11) все это выражение $\propto 1/M$, приходим к оценке

$$\operatorname{Re} \delta \varepsilon \sim (\hbar\omega_D)^2 / (\varepsilon - \mu) \ll \varepsilon - \mu.$$

Таким образом, в этом случае поправка в спектре относительно мала, так что спектр дается выражением

$$\varepsilon - \mu \approx v_F^{(0)}(p - p_F) \quad \text{при} \quad \varepsilon - \mu \gg \hbar\omega_D \quad (65.12)$$

с «невозмущенным» значением скорости на ферми-поверхности $v_F^{(0)}$.

В области же $\varepsilon - \mu \ll \hbar\omega_D$ логарифм в (65.11) $\sim (\varepsilon - \mu) / (\hbar u k)$, и интеграл оценивается как $(\varepsilon - \mu) k_{\max}^2 / (\hbar u) \sim (\varepsilon - \mu) / (\hbar u a^2)$. Все выражение (65.11) оказывается в результате пропорциональным $\varepsilon - \mu$ с коэффициентом, не зависящим от массы иона M (так как произведение ρu^2 не зависит от M). Это значит, что спектр в этой области будет снова того же типа

$$\varepsilon - \mu \approx v_F(p - p_F) \quad \text{при} \quad \varepsilon - \mu \ll \hbar\omega_D, \quad (65.13)$$

но со скоростью v_F , отличающейся от $v_F^{(0)}$ на величину порядка ее самой¹⁾.

Таким образом, спектр фермиевского типа для электронов в металле характеризуется двумя различными значениями скорости v_F и $v_F^{(0)}$ — одним в непосредственной близости к ферми-поверхности ($\varepsilon - \mu \ll \hbar\omega_D$), а другим — при $\varepsilon - \mu \gg \hbar\omega_D$. В термодинамических свойствах металла при низких температурах ($T \ll \hbar\omega_D$) фигурирует параметр v_F из (65.13). Такие же явления, как оптические свойства металла для частот $\omega \gg \omega_D$, определяются скоростью $v_F^{(0)}$.

Задача

Определить затухание длинноволновых ($k \ll p_F$) фононов в металле за счет их поглощения электронами.

¹⁾ Разумеется, в этих условиях использование первого приближения теории возмущений становится, строго говоря, некорректным. Учет следующих приближений не может изменить, однако, самого характера полученного результата: когда первая поправка становится порядка единицы, того же порядка и остальные поправки.

Решение. Поправка к гриновской функции фононов дается, согласно (64.8), интегралом

$$i\delta D^{-1}(K) = -\frac{2\omega^2}{\rho^2} \int G^{(0)}(P)G^{(0)}(P-K) \frac{d^4 P}{(2\pi)^4}, \quad P = (p_0, \mathbf{p}), \quad K = (\omega, \mathbf{k}).$$

В G -функциях надо, однако, еще учесть поправки, связанные со взаимодействием электронов с кратковолновыми фононами. Согласно сказанному в тексте, эти поправки приводят просто к замене $G^{(0)}$ на функцию G , отличающуюся от (65.3) лишь заменой скорости $v_F^{(0)}$ на v_F , и перенормировочной постоянной Z на некоторую другую Z' . При малых K для произведения $G^{(0)}(P)G^{(0)}(P-K)$ можно воспользоваться формулой (17.10). Интегрирование по $dp_0 dp$ сводится к устранению δ -функций, после чего остается еще интегрирование по $d \cos \theta$ (θ — угол между $\mathbf{p}$ и $\mathbf{k}$);

$$\delta D^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{Z'^2 \omega^2 p_F^2 k}{2\pi^2 \rho^2} \int_{-1}^1 \frac{\cos \theta d \cos \theta}{\omega - v_F k \cos \theta + i0}$$

(полагаем $\omega > 0$). Полюс $\cos \theta = \omega/kv_F$ находится внутри области интегрирования (поскольку $v_F > u$), и мнимая часть интеграла

$$\text{Im } \delta D^{-1} = \frac{Z'^2 \omega^2 p_F^2 \omega}{2\pi \rho^2 v_F^2 k}.$$

Закон дисперсии фононов определяется как корень уравнения $D^{(0)-1} + \delta D^{-1} = 0$, откуда находим (в обычных единицах)

$$\omega = uk(1 - i\alpha), \quad \alpha = \frac{Z'^2 \omega^2 p_F^2}{4\pi \hbar^3 \rho u v_F^2}$$

(поправкой к вещественной части ω не интересуемся). Произведение $\rho u \propto \sqrt{M}$; поэтому в грубой оценке $\alpha \sim \sqrt{m/M}$, т. е. затухание всегда мало.

§ 66. Электронный спектр твердых диэлектриков

Характерная особенность электронного энергетического спектра диэлектрического немагнитного кристалла состоит в том, что уже первый возбужденный уровень находится на конечном расстоянии от основного уровня; другими словами, между основным уровнем и спектром возбужденных уровней имеется энергетическая щель (у обычных диэлектриков — порядка нескольких электрон вольт).

Элементарное возбуждение в диэлектрическом кристалле может быть наглядно описано как возбужденное состояние атома, которое, однако, нельзя приписывать какому-либо определенному атому; трансляционная симметрия решетки, как всегда,

приводит к «коллективизированию» возбуждения, распространяющегося в кристалле, как бы перескакивая от одного атома к другому. Как и в других случаях, эти возбуждения можно рассматривать как квазичастицы (называемые в этом случае *экситонами*) с определенными энергиями и квазиимпульсами. Как и всякие квазичастицы, которые могут появляться поодиночке, экситоны обладают целочисленным моментом и подчиняются статистике Бозе¹⁾.

При заданном квазиимпульсе $\mathbf{k}$ энергия экситона может пробегать дискретный ряд различных значений $\epsilon_s(\mathbf{k})$. Когда квазиимпульс пробегает значения в одной ячейке обратной решетки, каждая из функций $\epsilon_s(\mathbf{k})$ пробегает некоторую *зону* значений энергии экситона; различные зоны могут частично перекрывать друг друга. Минимальные значения каждой из функций $\epsilon_s(\mathbf{k})$ отличны от нуля.

Наряду с экситонами в диэлектрике могут существовать электронные возбуждения также и другого рода. Их можно рассматривать как возникающие в результате ионизации отдельных атомов. Каждая такая ионизация приводит к появлению в диэлектрике двух независимо распространяющихся квазичастиц — электрона проводимости и «дырки». Последняя представляет собой недостаток одного электрона в атоме и потому ведет себя как положительно заряженная частица. И здесь, говоря о движении электрона и дырки, мы в действительности имеем в виду некоторые коллективные возбужденные состояния электронов диэлектрика, сопровождающиеся (в противоположность экситонным состояниям) переносом отрицательного или положительного элементарного заряда.

Электроны и дырки обладают полуцелым спином и подчиняются статистике Ферми. Подчеркнем, однако, что электронно-дырочный спектр диэлектрика отнюдь не имеет характера электронного спектра фермиевского типа в металлах. Для последнего характерно существование граничной ферми-поверхности в $\mathbf{k}$ -пространстве, в окрестности которой и лежат квазиимпульсы электронов. В данном же случае никакой подобной поверхности вообще нет, и одновременно появляющиеся электрон и дырка могут иметь произвольные квазиимпульсы.

Более глубоко различие между обоими типами спектров можно понять, рассматривая затухание элементарных возбуждений. В ферми-жидкости любая квазичастица, находящаяся вне ферми-поверхности, может рождать пары новых возбуждений (частицу и дырку) и потому обладает конечным временем жизни, быстро убывающим при удалении от ферми-поверхности

¹⁾ Понятие об экситонах было впервые введено Я. И. Френкелем (1931).

(электрон в металле может, кроме того, испускать фононы — см. § 65). Затухание же одиночного электрона (или дырки) в диэлектрике в идеальной решетке (при $T = 0$) строго равно нулю в конечном интервале энергий над ее минимальным значением¹⁾. Действительно, образование электронно-дырочной пары во всяком случае требует (в виду наличия энергетической щели Δ — см. ниже) конечной затраты энергии. Испускание же квазичастиц фонона (акустического) возможно, лишь если скорость v квазичастицы не меньше скорости звука u (см. примечание на с. 347).

Возможные значения энергии электронов проводимости $\varepsilon^{(e)}(\mathbf{k})$ и дырок $\varepsilon^{(h)}(\mathbf{k})$ тоже заполняют зоны. Шириной энергетической щели в диэлектрике обычно называют сумму $\Delta = \varepsilon_{\min}^{(e)} + \varepsilon_{\min}^{(h)}$ наименьших возможных значений энергий электрона и дырки. Поскольку электрон и дырка появляются или исчезают вместе, то реальным смыслом обладает именно эта сумма, а не величины $\varepsilon_{\min}^{(e)}$ и $\varepsilon_{\min}^{(h)}$ по отдельности; обычно условно полагают $\varepsilon_{\min}^{(h)} = 0$. Минимальные значения энергии могут достигаться для электронов и дырок при одном и том же или при различных значениях квазиимпульса $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$; в первом случае говорят о *прямой*, а во втором — о *непрямой* щели. Если уровни энергии в зоне невырождены (или вырождены только двукратно по спину как следствие симметрии по отношению к обращению времени), то вблизи своего минимума функции $\varepsilon(\mathbf{k})$ имеют вид

$$\varepsilon^{(e)}(\mathbf{k}) = \Delta + \frac{1}{2}m_{ik}^{(e)-1}q_iq_k, \quad \varepsilon^{(h)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}m_{ik}^{(h)-1}q_iq_k, \quad (66.1)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$, а $m_{ik}^{(e)}$ и $m_{ik}^{(h)}$ — тензоры эффективных масс электронов и дырок.

В литературе электронную зону нередко называют просто *зоной проводимости*, а вместо дырочной зоны говорят о *валентной зоне*, которая в основном состоянии кристалла полностью заполнена электронами. Возникновение пары квазичастиц — электрона и дырки — рассматривается при этом как результат перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости с оставлением дырки на покидаемом месте.

На больших (по сравнению с атомными) расстояниях электрон и дырка притягиваются по закону Кулона. Поэтому они могут образовывать связанные состояния. Совокупность связанных электрона и дырки представляет собой электрически

¹⁾ Затухание же при конечных температурах, разумеется, всегда имеется из-за рассеяния на других квазичастицах.

нейтральную квазичастицу, т. е. экситон. При заданном значении квазиимпульса связанным состояниям отвечают дискретные уровни энергии системы электрон+дырка; каждый уровень отвечает одной из экситонных энергетических зон. Энергии экситонов расположены, таким образом, под энергиями электронно-дырочных возбуждений (энергетическая щель в указанном в начале параграфа смысле не совпадает поэтому с величиной Δ , а меньше ее на величину, равную максимальной энергии связи экситона)¹⁾.

Уровни энергии экситона легко вычислить в предельном случае слабо связанных состояний, когда средние расстояния между электроном и дыркой велики по сравнению с постоянной решетки a ; такой экситон называют *экситоном Ванье–Мотта*. В обратном же предельном случае, когда расстояние между электроном и дыркой порядка атомного, говорят об *экситоне Френкеля*; разумеется, экситон Френкеля можно рассматривать как связанное состояние электрона и дырки лишь формально.

Рассмотрим диэлектрический кристалл кубической симметрии. Для экситона Ванье–Мотта можно считать, что электрон и дырка притягиваются по закону Кулона, причем роль остальных атомов в решетке сводится лишь к созданию однородного диэлектрического фона, ослабляющего взаимодействие в ϵ раз, где ϵ — диэлектрическая проницаемость кристалла (взятая для значений частот, отвечающих по порядку величины энергии связи экситона); другими словами, энергия взаимодействия электрона и дырки записывается в виде $U = -e^2/\epsilon r$. Пусть щель в спектре прямая и для простоты будем считать, что минимумы энергий электрона и дырки лежат при $\mathbf{k} = 0$. В кубическом кристалле тензоры эффективных масс сводятся к скалярным константам m_e и m_h , так что

$$\varepsilon^{(e)}(\mathbf{k}) = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad \varepsilon^{(h)}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}. \quad (66.2)$$

В конце § 56 было указано, что движение частицы в кристаллической решетке с наложенным на нее медленно меняющимся в пространстве внешним электрическим полем описывается уравнением Шредингера с гамильтонианом, в котором роль кинетической энергии играет функция $\varepsilon(\mathbf{k})$. Поскольку в данном случае функции $\varepsilon^{(e)}(\mathbf{k}) - \Delta$ и $\varepsilon^{(h)}(\mathbf{k})$ совпадают по форме с кинетическими энергиями обычных свободных частиц, то и уравнение Шредингера рассматриваемой системы совпадает по форме с таковым для системы двух обычных частиц, взаимодействующих

¹⁾ Экситонные состояния обладают, однако, конечным временем жизни, так как электрон и дырка могут рекомбинировать с испусканием, например фонона или фотона.

по закону Кулона, т. е. с уравнением Шредингера задачи об атоме водорода. Мы можем поэтому сразу написать уровни энергии системы, т. е. энергию экситона в виде

$$\varepsilon_n^{(\text{ex})}(\mathbf{k}) - \Delta = \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_h)} - \frac{m e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2 n^2} \quad (66.3)$$

(*G. H. Wannier*, 1937). Первый член в этом выражении есть энергия движения экситона «как целого» с квазиимпульсом $\mathbf{k}$. Второй же член дает энергию связи электрона и дырки в экситоне ($m = m_e m_h / (m_e + m_h)$ — приведенная масса системы). При заданном $\mathbf{k}$ дискретные уровни энергии системы сгущаются по мере увеличения энергии к границе непрерывного спектра. Условие применимости формулы (66.3) состоит в требовании достаточно большой величины «радиуса орбиты» $r_{\text{ex}} \sim \hbar^2 \varepsilon n^2 / m e^2 \gg a$. Это условие заведомо выполняется при больших n , но в кристаллах с большим ε может выполняться и для $n \sim 1^1$.

В заключение этого параграфа вернемся к упомянутому в § 61 утверждению о существовании нижней границы для плотности числа электронов проводимости в полуметалле.

В диэлектрике, где электроны и дырки при $T = 0$ отсутствуют, возможность образования ими связанных состояний означает лишь появление новых ветвей энергетического спектра. В компенсированном же металле такая возможность означала бы, что состояние со свободными электронами и дырками не является низшим, т. е. спектр металлического типа был бы неустойчивым. Возможность образования связанных состояний устраняется экранировкой кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой находящимися «между ними» другими квазичастицами. Другими словами, среднее расстояние между квазичастицами должно быть порядка величины или меньше размеров экситона r_{ex} (в его основном состоянии). Обратим внимание на то, что устанавливаемый этим требованием нижний предел допустимых для металла плотностей числа электронов и дырок падает с уменьшением их эффективных масс.

§ 67. Электроны и дырки в полупроводниках

Энергетический спектр чистых (или, как говорят, *собственных*) полупроводниковых кристаллов отличается от спектра диэлектриков только в количественном отношении — меньшими

¹) Интересно отметить, что вблизи верхнего края (максимума) зоны, где эффективные массы отрицательны, могут образовывать связанные состояния два электрона (или две дырки). Энергия таких состояний лежит в запрещенной области выше максимума суммарной энергии электронов.

значениями щели Δ , в результате чего при обычных температурах в полупроводнике имеется значительная (по сравнению с диэлектриком) плотность носителей тока. Ясно, что это различие условно, и к тому же зависит от интересующей нас области температур¹). В *примесных* (или *легированных*) полупроводниках дополнительным источником электронов или дырок являются атомы примесей, для которых энергетическая щель по отношению к отдаче электрона в решетку (*донорная примесь*) или его захвата из решетки (*акцепторная примесь*) оказывается меньше, чем энергетическая щель в основном спектре.

Рассмотрим подробнее вопрос о связи между величиной щели Δ и плотностью электронов проводимости и дырок в полупроводнике (или диэлектрике).

Попарное возникновение или исчезновение электрона (e) и дырки (h) можно рассматривать, с термодинамической точки зрения, как «химическую реакцию» $e + h \rightleftharpoons 0$ (основное состояние кристалла играет роль «вакуума»). По общим правилам (см. V, § 101) условие термодинамического равновесия этой реакции записывается в виде

$$\mu_e + \mu_h = 0, \quad (67.1)$$

где μ_e и μ_h — химические потенциалы электронов и дырок. Ввиду сравнительно небольшой плотности электронов (n_e) и дырок (n_h) в полупроводнике (при $T \ll \Delta$) распределение Ферми для них с большой точностью сводится к распределению Больцмана, так что электроны и дырки образуют классический газ²). Из условия (67.1) следует тогда обычным образом (см. V, § 101) закон действующих масс, согласно которому произведение равновесных плотностей

$$n_e n_h = K(T), \quad (67.2)$$

где справа стоит функция температуры, зависящая только от свойств основной решетки, на атомах которой и происходит рождение и уничтожение электронов и дырок; эта функция не зависит от наличия или отсутствия примесей. Вычислим функцию $K(T)$, приняв для определенности, что энергии электронов и дырок являются квадратичными функциями квазиимпульса (66.1).

Распределение электронов (в единице объема) по квазиим-

¹) Приведем значения энергетической щели Δ для некоторых полупроводников: Si — 1,17, Ge — 0,74, InSb — 0,24, GaAs — 1,52, PbS — 0,29 эВ. Для типичного диэлектрика алмаза $\Delta = 5,4$ эВ.

²) Плотности электронов и дырок в полупроводниках при обычных температурах составляют $10^{13} - 10^{17} \text{ см}^{-3}$, в то время как в металлах они составляют $10^{22} - 10^{23} \text{ см}^{-3}$.

пульсам дается распределением Больцмана

$$\exp\left(\frac{\mu_e - \varepsilon_e(\mathbf{k})}{T}\right) \cdot 2 \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}$$

(множитель 2 учитывает два направления спина). Переход к распределению по энергиям осуществляется заменой

$$2 \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \rightarrow \frac{\sqrt{2} m_e^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\varepsilon_e - \Delta} d\varepsilon_e,$$

где $m_e = (m_1 m_2 m_3)^{1/3}$, а m_1, m_2, m_3 — главные значения тензора эффективных масс $m_{ik}^{(e)}$. Полное число электронов в единице объема, следовательно, равно

$$n_e = \frac{\sqrt{2} m_e^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} e^{\mu_e/T} \int_{\Delta}^{\infty} \sqrt{\varepsilon_e - \Delta} e^{-\varepsilon_e/T} d\varepsilon_e$$

(в виду быстрой сходимости интегрирование можно распространить до бесконечности). Вычислив интеграл, находим

$$n_e = 2 \left(\frac{m_e T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{(\mu_e - \Delta)/T}. \quad (67.3)$$

Аналогичным образом, получим

$$n_h = 2 \left(\frac{m_h T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\mu_h/T}. \quad (67.4)$$

Наконец, перемножив оба выражения и учтя (67.1), получим искомый результат

$$n_e n_h = \frac{(m_e m_h)^{3/2}}{2\pi^3 \hbar^6} T^3 e^{-\Delta/T}. \quad (67.5)$$

В собственном полупроводнике, где все электроны и дырки возникли парами:

$$n_e = n_h = \frac{(m_e m_h)^{3/4}}{\sqrt{2} \pi^{3/2} \hbar^3} T^{3/2} e^{-\Delta/2T}. \quad (67.6)$$

Приравняв же выражения (67.6) и (67.3), найдем химический потенциал электронов¹⁾

$$\mu_e = \frac{\Delta}{2} + \frac{3T}{4} \ln \frac{m_h}{m_e}. \quad (67.7)$$

¹⁾ В литературе эту величину часто называют уровнем Ферми. Подчеркнем, однако, что химический потенциал электронов в полупроводнике отнюдь не имеет того смысла граничной энергии, которым он обладает в металлах.

Что касается вклада электронов и дырок в термодинамические величины полупроводника, то при $T \ll \Delta$ он экспоненциально мал. Учитывая, что на рождение одной пары электрон — дырка требуется энергия, близкая к Δ , имеем для электронно-дырочного вклада во внутреннюю энергию $E_{eh} \approx V n_e \Delta$ с n_e из (67.6). Этой величиной можно пренебречь по сравнению с решеточным вкладом в энергию кристалла.

§ 68. Электронный спектр вблизи точки вырождения

В этом параграфе мы покажем на простых примерах, каким образом можно, исходя из соображений симметрии, найти вид энергетического спектра электронов или дырок в полупроводнике (или диэлектрике) вблизи определенных точек $\mathbf{k}$ -пространства (обратной решетки), выделенных по своей симметрии¹⁾.

Рассмотрим решетку, относящуюся к кубическому кристаллическому классу O_h , и будем интересоваться свойствами энергетического спектра вблизи точки $\mathbf{k} = 0$ — вершины кубической ячейки обратной решетки; эта точка имеет собственную симметрию полной точечной группы O_h .

В качестве первого примера рассмотрим спектр без учета спина электрона, и пусть в самой точке $\mathbf{k} = 0$ уровень энергии в зоне двукратно вырожден, относясь к неприводимому представлению E_g группы O_h ²⁾. При выходе из точки $\mathbf{k} = 0$ вырождение снимается; задача состоит в нахождении всех ветвей закона дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$ вблизи этой точки.

В § 59 было объяснено, каким образом можно рассматривать отклонение от некоторой точки $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ в $\mathbf{k}$ -пространстве как возмущение. Конкретный вид оператора возмущения для нас здесь несуществен. Достаточно знать лишь структуру выражений, определяющих поправку к энергии в каждом порядке по малой величине $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ (в данном случае $\mathbf{k}_0 = 0$, так что $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k}$). В первом порядке поправки определяются секулярным уравнением, составленным из матричных элементов (для переходов между состояниями, относящимися к одному и тому же вырожденному уровню) от оператора вида $\mathbf{k}\hat{\gamma}$, где $\hat{\gamma}$ — некоторый векторный оператор. В данном случае ввиду наличия в группе симметрии центра инверсии все матричные элементы оператора $\hat{\gamma}$ заведомо обращаются в нуль, так что эффект первого порядка по $\mathbf{k}$ отсутствует (ср. V, § 136). Во втором порядке

¹⁾ Без учета спина электрона этот вопрос формально тождествен с таким же вопросом для энергетического спектра фононов в кристалле; см. V, § 136.

²⁾ Обозначение представлений точечных групп — см. III, § 95, 99.

по $\mathbf{k}$ поправки к энергии определяются секулярным уравнением, составленным из матричных элементов от оператора вида

$$\hat{V} = \hat{\gamma}_{ik} k_i k_k, \quad (68.1)$$

где $\hat{\gamma}_{ik}$ — некоторый тензорный (симметричный по индексам i, k) эрмитов оператор; сюда входят поправки от линейных по $\mathbf{k}$ членов в гамильтониане во втором приближении теории возмущений и поправки от квадратичных по $\mathbf{k}$ членов — в первом приближении. Среди матричных элементов оператора (68.1) заведомо существуют отличные от нуля, но требования симметрии накладывают на них определенные связи.

В смысле своего закона преобразования при операциях симметрии волновые функции, составляющие базис представления E_g , можно выбрать в виде

$$\psi_1 \sim x^2 + \omega y^2 + \omega^2 z^2, \quad \psi_2 \sim x^2 + \omega^2 y^2 + \omega z^2,$$

где

$$\omega = e^{2\pi i/3}, \quad \omega^2 = \omega^*, \quad 1 + \omega + \omega^2 = 0,$$

знак $\sim$ означает здесь слова «преобразуется как». Поворот C_3 вокруг диагонали куба преобразует координаты согласно $x, y, z \rightarrow z, x, y$; при этом функции ψ_1, ψ_2 преобразуются как

$$C_3 : \psi_1 \rightarrow \omega \psi_1, \quad \psi_2 \rightarrow \omega^2 \psi_2.$$

Поворот C_4^x вокруг ребра куба (преобразование $x, y, z \rightarrow x, -z, y$) преобразует функции согласно

$$C_4^x : \psi_1 \rightarrow \psi_2, \quad \psi_2 \rightarrow \psi_1$$

и т. п. При инверсии координаты x, y, z меняют знак, а функции ψ_1, ψ_2 не меняются.

Отсюда легко сделать вывод, что все матричные элементы от недиагональных компонент $\hat{\gamma}_{ik}$ обращаются в нуль, а матричные элементы от диагональных компонент сводятся к двум независимым вещественным постоянным:

$$\langle 1 | \gamma_{xx} | 1 \rangle = \langle 2 | \gamma_{xx} | 2 \rangle = \langle 1 | \gamma_{yy} | 1 \rangle = \dots \equiv A,$$

$$\langle 1 | \gamma_{xx} | 2 \rangle = \langle 2 | \gamma_{xx} | 1 \rangle \equiv B, \quad \langle 1 | \gamma_{yy} | 2 \rangle = \omega B, \quad \langle 1 | \gamma_{zz} | 2 \rangle = \omega^2 B.$$

Теперь матричные элементы оператора (68.1):

$$\langle 1 | V | 1 \rangle = \langle 2 | V | 2 \rangle = A k^2,$$

$$\langle 1 | V | 2 \rangle = \langle 2 | V | 1 \rangle^* = B(k_x^2 + \omega k_y^2 + \omega^2 k_z^2).$$

Составив по этим матричным элементам секулярное уравнение

и решив его, получим две ветви спектра:

$$\varepsilon_{1,2}(k) - \varepsilon(0) = Ak^2 \pm B [k^4 - 3(k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)^2]^{1/2}. \quad (68.2)$$

Вырождение снимается при выходе из точки $\mathbf{k} = 0$ во всех направлениях, за исключением направления диагонали куба ($k_x = k_y = k_z$)¹).

В качестве другого примера рассмотрим спектр с учетом спина электрона; при этом уровням энергии отвечают двузначные (спинорные) представления группы симметрии. Пусть в точке $\mathbf{k} = 0$ уровень четырехкратно вырожден, отвечая неприводимому представлению D'_u (или D'_g) группы O_h ²).

Функции базиса этого представления можно выбрать так, чтобы они преобразовывались как собственные функции ψ_m^j ($m = -j, \dots, j$) момента $j = 3/2$ ³). Это обстоятельство позволяет применить следующий прием, существенно упрощающий решение задачи (*J. M. Luttinger*, 1956).

Для четырехмерного представления матрица оператора (68.1) будет равна 4×4 , с 16 элементами. Всякую такую матрицу можно представить в виде линейной комбинации 16 заданных линейно независимых матриц 4×4 , в качестве которых выберем 15 матриц

$$\hat{j}_x, \hat{j}_x^2, \{\hat{j}_x, \hat{j}_y\}_+, \hat{j}_x^3, \{\hat{j}_x, \hat{j}_y^2 - \hat{j}_z^2\}_+$$

и получающихся из них циклическими перестановками индексов x, y, z и матрицу $\{\hat{j}_x, \{\hat{j}_y, \hat{j}_z\}_+\}_+$ (символ $\{\dots\}_+$ означает антикоммутатор). Здесь $\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z$ — матрицы декартовых компонент момента $j = 3/2$, взятые по отношению к четырем функциям $\psi_m^{3/2}$. С другой стороны, при таком выборе функций базиса следует считать, что сами операторы $\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z$ преобразуются при поворотах и отражениях как компоненты аксиального вектора.

¹) Тот же результат (68.2) получается и для представления E_u (в точке $\mathbf{k} = 0$). Вообще закон дисперсии вблизи заданной точки всегда одинаков для представлений, отличающихся друг от друга лишь умножением на какое-либо из одномерных представлений группы (в данном случае $E_u = E_g \times A_{1u}$). Очевидно, что в таких случаях матричные элементы для переходов между различными функциями базиса связаны друг с другом одинаковыми связями.

²) Такая ситуация имеет место для дна дырочной зоны в алмазе, кремнии и германии, которые все имеют решетку одинакового типа.

³) В задаче в III, § 99 показано, что неприводимое представление $D^{(3/2)}$ полной группы вращений остается неприводимым и по отношению к группе O , совпадая с ее представлением D' .

Это обстоятельство позволяет записать оператор $\hat{V}$, квадратичный по k_x, k_y, k_z , составив его из выражений, инвариантных по отношению ко всем преобразованиям группы $\mathbf{O}_h$:

$$\hat{V} = \beta_1 \mathbf{k}^2 + 4\beta_2 (k_x^2 \hat{j}_x^2 + k_y^2 \hat{j}_y^2 + k_z^2 \hat{j}_z^2) + \beta_3 (k_x k_y \{\hat{j}_x, \hat{j}_y\}_+ + k_y k_z \{\hat{j}_y, \hat{j}_z\}_+ + k_x k_z \{\hat{j}_z, \hat{j}_x\}_+), \quad (68.3)$$

где $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ — вещественные постоянные.

Матричные элементы оператора (68.3) по отношению к функциям

$$\psi_1 \sim \psi_{3/2}^{3/2}, \quad \psi_2 \sim \psi_{1/2}^{3/2}, \quad \psi_3 \sim \psi_{-1/2}^{3/2}, \quad \psi_4 \sim \psi_{-3/2}^{3/2}$$

легко вычисляются теперь по хорошо известным матричным элементам момента (они даются формулами III, (29.7)–(29.10)). Такое вычисление приводит к следующим выражениям:

$$\begin{aligned} V_{11} &= V_{44} = (\beta_1 + 3\beta_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\beta_1 + 9\beta_2)k_z^2, \\ V_{22} &= V_{33} = (\beta_1 + 7\beta_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\beta_1 + \beta_2)k_z^2, \\ V_{12} &= -V_{34} = \frac{\sqrt{3}}{2}\beta_3 k_z (k_y + ik_x), \\ V_{13} &= V_{24} = 2\sqrt{3}\beta_2 (k_y^2 - k_x^2) + \frac{\sqrt{3}}{2}\beta_3 ik_x k_y, \\ V_{14} &= V_{23} = 0. \end{aligned} \quad (68.4)$$

Составление секулярного уравнения можно упростить, заметив, что расщепление уровня заведомо не может быть полным — должно оставаться двукратное (крамерсовское) вырождение. Это значит, что каждый корень $\lambda \equiv \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(0)$ секулярного уравнения (собственное значение матрицы $\hat{V}$) будет двойным. Другими словами, каждому собственному значению λ будет соответствовать два линейно независимых набора величин φ_n ($n = 1, 2, 3, 4$) — решений уравнений

$$\sum_m V_{nm} \varphi_m = \lambda \varphi_n. \quad (68.5)$$

Комбинируя эти два набора, мы можем, следовательно, наложить на величины φ_n одно дополнительное условие, в частности — обратить в нуль одну из них; пусть $\varphi_4 = 0$. Тогда уравнение (68.5) с $n = 4$ даст

$$V_{41}\varphi_1 + V_{42}\varphi_2 + V_{43}\varphi_3 = 0.$$

Подставив отсюда значение φ_3 в уравнения с $n = 1, 2$, получим

систему всего двух однородных уравнений с двумя неизвестными φ_1 и φ_2 :

$$\begin{pmatrix} V_{11} - V_{41}V_{13}/V_{43} & V_{12} - V_{42}V_{13}/V_{43} \\ V_{21} - V_{41}V_{23}/V_{43} & V_{22} - V_{42}V_{23}/V_{43} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$$

(уравнение же с $n = 3$ не дает ничего нового). Таким образом, задача о собственных значениях 4×4 -матрицы сводится к задаче для 2×2 -матрицы. Составив для нее секулярное уравнение и решив его (со значениями V_{nm} из (68.4)), получим

$$\lambda = \frac{1}{2} (V_{11} + V_{22}) \pm \left[\frac{1}{4} (V_{11} - V_{22})^2 + |V_{12}|^2 + |V_{13}|^2 \right]^{1/2},$$

или окончательно

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{k}) - \varepsilon(0) = Ak^2 \pm [Bk^4 + C(k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)]^{1/2}, \quad (68.6)$$

где

$$A = \beta_1 + 5\beta_2, \quad B = 16\beta_2^2, \quad C = 3 \left(\frac{1}{4}\beta_3^2 - 16\beta_2^2 \right)$$

(*G. Dresselhaus, A. F. Kip, Ch. Kittel, 1955*). Уровень расщепляется при выходе из точки $\mathbf{k} = 0$ во всех направлениях¹⁾.

Остановимся кратко на вопросе о виде уравнений, описывающих поведение частиц вблизи вырожденного дна зоны в магнитном поле. Для определенности будем иметь в виду второй из рассмотренных в этом параграфе случаев — спектр (68.6).

Прямое использование гамильтониана, составленного из (68.6) по общему правилу (56.7), натолкнулось бы на затруднения, связанные с неаналитическим характером спектра вблизи точки $\mathbf{k}=0$. Эти трудности можно обойти, если произвести замену $\mathbf{k} \rightarrow \hat{\mathbf{k}} = \mathbf{K} - e\hat{\mathbf{A}}/\hbar c$ не в (68.6), а в матричном гамильтониане (68.3) (для сохранения эрмитовости при этом должна быть произведена симметризация по компонентам $\mathbf{k}$). Каждый матричный элемент гамильтониана превращается после этого в линейный дифференциальный оператор, действующий не только на спинные индексы, но и на аргументы функций $\varphi_n(\mathbf{K})$ в уравнениях (68.5), которые превращаются, таким образом, в систему четырех линейных дифференциальных уравнений.

¹⁾ Напомним, что применение теории возмущений к состояниям одного только вырожденного уровня предполагает малость интервалом $\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(0)$ возникающего расщепления по сравнению с расстояниями до соседних зон, в том числе тех, которые отщепились из-за спин-орбитального взаимодействия.

Для учета спиновых эффектов при наличии магнитного поля к гамильтониану (68.3) надо еще добавить члены, непосредственно зависящие от $\mathbf{H}$, которые не определяются соображениями калибровочной инвариантности. Поскольку поле считается слабым, добавляемые члены должны быть линейны по $\mathbf{H}$; в то же время в виду предполагаемой малости $\mathbf{k}$ они не должны зависеть от $\mathbf{k}$ (ср. § 59). В данном случае общий вид таких членов, инвариантных относительно всех преобразований симметрии кристалла, таков:

$$\beta_4 \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{j}} + \beta_5 (H_x \hat{j}_x^3 + H_y \hat{j}_y^3 + H_z \hat{j}_z^3). \quad (68.7)$$

В заключение этого параграфа упомянем об интересной ситуации, возникающей, если одна из соприкасающихся в точке вырождения $\mathbf{k}_0$ зон является зоной проводимости, а другая — валентной зоной. Энергетическая щель в спектре такого типа равна нулю; для рождения электрона и дырки с импульсами, близкими к $\mathbf{k}_0$, достаточно сколь угодно малой энергии. Такие кристаллы являются в определенном смысле промежуточными между диэлектриком и металлом. Энергетическая щель отсутствует, но электронные и дырочные состояния не разделены только в одной точке $\mathbf{k}$ -пространства. Можно сказать, что это металл, у которого поверхность Ферми «стянута» в одну точку $\mathbf{k}_0$. При $T = 0$ в таком *бесщелевом полупроводнике* ¹⁾ носители тока отсутствуют, но при низких температурах их число возрастает по степенному, а не экспоненциальному закону. Вид спектра вблизи точки $\mathbf{k}_0$ нельзя установить исходя из одних только соображений симметрии; кулоновское взаимодействие электронов и дырок приводит к появлению в этой точке особенности у матричных элементов возмущения ²⁾.

¹⁾ Примером является одна из модификаций олова — серое олово.

²⁾ Подробное исследование этого вопроса см.: А. А. Абрикосов, С. Д. Бенславский // ЖЭТФ. 1970. Т. 59. С. 1280.

МАГНЕТИЗМ

§ 69. Уравнение движения магнитного момента
в ферромагнетике

Магнитная структура кристаллов приводит к появлению у них специфических ветвей энергетического спектра. Переходя к исследованию этих спектров, напомним прежде всего некоторые особенности взаимодействий в магнитных телах.

Основным видом взаимодействий в ферромагнетиках является обменное взаимодействие атомов, которое и приводит к установлению спонтанной намагниченности. Характерным свойством этого взаимодействия является его независимость от ориентации намагниченности относительно решетки: обменное взаимодействие является результатом электростатического взаимодействия электронов с учетом симметрии волновой функции системы и не зависит от направления суммарного спина¹⁾).

Простейшей ферромагнитной системой является диэлектрик, в кристаллической решетке которого имеются атомы, обладающие магнитным моментом, причем знак обменного взаимодействия таков («ферромагнитен»), что энергетически выгодно параллельное положение моментов. Тогда основным состоянием системы будет состояние, в котором все спины параллельны. Точнее, в этом состоянии проекция суммарного спина системы на некоторое направление равна максимально возможному значению Σs_a (сумма по всем атомам), где s_a — спин одного атома. Действительно, гамильтониан обменного взаимодействия $\hat{H}_{об}$ коммутативен с оператором полного спина системы $\hat{\mathbf{S}}$, а значит и с его проекцией $\hat{S}_z$ (это следует из того, что $\hat{H}_{об}$ не зависит от направления спинов, а оператор $\hat{\mathbf{S}}$ и есть оператор поворота в спиновом пространстве). Поэтому основное состояние должно обладать определенным значением S_z , а минимуму энергии соответствует максимальное S_z . Заметим, что тогда равны своим

¹⁾ Экспериментальные данные о гиромагнитных отношениях g , дающие для ферромагнетиков значения, очень близкие к 2, свидетельствуют о спиновой природе ферромагнетизма.

максимальным значениям s_a и проекции s_z спинов каждого из атомов, так что магнитный момент в основном состоянии равен своему «номинальному» значению $\Sigma \mu_a$, где μ_a — магнитный момент одного атома. Это свойство, однако, нарушается более слабыми — релятивистскими — взаимодействиями.

В более сложных случаях намагниченность тела не равна номинальной. В частности, когда взаимодействие не между всеми атомами носит ферромагнитный характер, возможно образование структур из двух противоположно намагниченных подрешеток, намагниченности которых различны и потому не вполне компенсируются; вещества со структурой такого типа называют ферритами (случай же полной компенсации соответствует антиферромагнетик).

Наконец, в ферромагнитном металле нельзя рассматривать спины атомов независимо от электронов проводимости, которые во всяком случае не будут (из-за эффектов фермиевского вырождения) полностью намагничены даже при $T = 0$. Особенности магнитных взаимодействий могут привести также к более сложной структуре основного состояния ферромагнетика с неколлинеарным расположением атомов магнитных моментов — так называемые геликоидальные структуры.

Как и во всякой макроскопической системе, слабо возбужденные состояния ферромагнетика можно рассматривать как совокупность элементарных возбуждений — газ квазичастиц. Элементарные возбуждения в упорядоченном распределении атомных магнитных моментов называют *магнонами*. Поскольку речь идет о квазичастицах в трансляционно-симметричной кристаллической решетке, магноны обладают определенными не истинными импульсами, а квазиимпульсами, пробегающими значения в одной ячейке обратной решетки. В классической картине магнонам отвечают *спиновые волны* — распространяющиеся вдоль решетки колебания магнитных моментов. Магноны подчиняются статистике Бозе, и предельному классическому случаю спиновых волн отвечают большие числа заполнения состояний магнонов.

Если длина спиновой волны велика по сравнению с постоянной решетки а (т. е. волновой вектор $k \ll 1/a$), то волну можно рассматривать макроскопически; в результате закон дисперсии волн $\omega(\mathbf{k})$ будет выражен через феноменологические параметры (материальные константы), входящие в макроскопические уравнения движения магнитных моментов. Тем самым будет выражен через эти параметры и спектр магнонов $\varepsilon = \hbar \omega(\mathbf{k})$. Такой путь определения спектра магнонов вполне аналогичен определению спектра длинноволновых фононов через макроскопические параметры (упругие модули), входящие

в макроскопические уравнения колебаний в звуковых волнах. Для выполнения этой программы необходимо предварительно вывести указанные уравнения движения¹⁾.

Рассмотрим сначала этот вопрос с учетом только обменных взаимодействий.

Поскольку мы интересуемся слабо возбужденными состояниями ферромагнетика (только их свойства и могут быть выяснены в общем виде), мы должны ограничиться «медленными» движениями магнитного момента с малыми частотами. Такими будут движения, в которых направление магнитного момента медленно меняется в пространстве, а его величина остается постоянной. Действительно, равновесная величина намагниченности фиксирована обменным взаимодействием; поэтому ее изменение во всяком случае не связано с конечной затратой энергии при любой длине волны. (Предполагается, что тело находится достаточно далеко от точки Кюри, в которой спонтанная намагниченность исчезает.) С другой стороны, при учете только обменных взаимодействий, энергия не меняется при повороте магнитного момента как целого; поэтому неоднородный вдоль тела поворот намагниченности будет требовать тем меньшей энергии, чем больше длина волны. Другими словами, длинноволновые колебания будут иметь малую частоту.

Уравнение движения, определяющее изменение направления магнитного момента есть не что иное, как уравнение прецессии спинового механического момента $\hbar\mathbf{S}$ под действием момента сил $\mathbf{K}$:

$$\frac{\partial \hbar\mathbf{S}}{\partial t} = \mathbf{K},$$

(см. I, (34.4)). Мы будем понимать под $\hbar\mathbf{S}$ и $\mathbf{K}$ соответственно механический момент и момент сил, отнесенные к единице объема. Плотность магнитного момента (намагниченность) $\mathbf{M}$ выражается через $\mathbf{S}$ согласно

$$\mathbf{M} = \gamma \hbar \mathbf{S} = -\frac{g|e|\hbar}{2mc} \mathbf{S},$$

где γ — отношение магнитного момента к механическому, $e = -|e|$ и m — соответственно заряд и масса электрона, g — гиромагнитное отношение для ферромагнетика (ср. II, § 45). Уравнение для $\mathbf{M}$ имеет, следовательно, вид

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = \gamma \mathbf{K}. \quad (69.1)$$

¹⁾ Дальнейшие результаты этого параграфа принадлежат Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшицу (1935). Отметим, что эти результаты справедливы для «обменных» ферромагнетиков. Мы не будем касаться здесь так называемого слабого ферромагнетизма, в котором ферромагнитный момент появляется только при учете релятивистских эффектов.

Это уравнение является точным, когда момент сил $\mathbf{K}$ не зависит от координат и выполняется приближенно, если $\mathbf{K}$ медленно меняется в пространстве.

Момент сил $\mathbf{K}$ определяется изменением энергии при бесконечно малом повороте спиновой системы. Пусть $\delta\phi$ — вектор, направленный вдоль оси вращения и равный по величине углу поворота. Тогда согласно формулам механики момент сил дается выражением $-(\partial E/\partial\phi)$ (см. I, (34.6)). Если $\delta\phi$ зависит от координат, мы должны перейти от дифференцирования к варьированию в каждой точке пространства. Удобнее производить это варьирование при постоянной температуре, постоянном объеме тела и постоянном магнитном поле в каждой точке тела. Термодинамическим потенциалом в этих переменных является свободная энергия $\tilde{F}$ ¹⁾. Таким образом, плотность момента сил определяется уравнением:

$$\delta\tilde{F} = - \int \mathbf{K} \delta\phi dV. \quad (69.2)$$

Запишем изменение свободной энергии $\delta\tilde{F}$ при изменении магнитного момента (точнее его направления, поскольку его величина фиксирована,) в виде

$$\delta\tilde{F} = - \int \mathbf{H}_{\text{эф}} \delta\mathbf{M} dV, \quad (69.3)$$

где по аналогии с выражением для энергии магнитного момента во внешнем магнитном поле введено «эффективное поле» $\mathbf{H}_{\text{эф}}$. В равновесии $\mathbf{H}_{\text{эф}} = 0$, поскольку равновесное распределение магнитного момента как раз и определяется минимизацией свободной энергии. Учтем теперь, что изменение $\mathbf{M}$ при бесконечно малом повороте $\delta\phi$ равно:

$$\delta\mathbf{M} = [\delta\phi \mathbf{M}].$$

Подставляя это выражение в (69.3) и сравнивая его с (69.2), находим плотность момента сил:

$$\mathbf{K} = [\mathbf{M} \mathbf{H}_{\text{эф}}].$$

¹⁾ См. VIII, § 39 (термодинамические величины, относящиеся к телу в целом, обозначались там рукописными латинскими буквами). При неоднородном распределении правильнее говорить о свободной энергии тела (при заданном его объеме), а не о термодинамическом потенциале $\delta\tilde{\Phi}$. Мы не будем интересоваться здесь стрикционными эффектами, т. е. напряжениями и деформациями кристалла, возникающими при изменении намагниченности. В этом случае можно не делать различия между $\delta\tilde{\Phi}$ и $\delta\tilde{F}$.

Подставляя в (69.1), приходим окончательно к уравнению Ландау-Лифшица для магнитного момента:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = \frac{g|e|}{2mc} [\mathbf{H}_{\text{эф}} \mathbf{M}]. \quad (69.4)$$

Покажем, что изменение магнитного момента, описываемое этим уравнением, не сопровождается диссипацией энергии. Эта диссипация равна:

$$Q = T \frac{\partial S}{\partial t} = - \frac{\partial R_{\min}}{\partial t} = - \frac{\partial \tilde{F}}{\partial t},$$

где S — энтропия тела, а $R_{\min}$ — минимальная работа, необходимая для приведения тела в данное неравновесное состояние. С помощью (69.4) имеем, таким образом,

$$Q = \int \mathbf{H}_{\text{эф}} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} dV = \frac{g|e|}{2mc} \int \mathbf{H}_{\text{эф}} [\mathbf{H}_{\text{эф}}] dV = 0,$$

чем и доказывается сделанное утверждение. Заметим, что отсутствие диссипации обеспечивается тем, что правая часть уравнения (69.4) перпендикулярна к $\mathbf{H}_{\text{эф}}$. (Мы вернемся к обсуждению вопроса о диссипации в конце следующего параграфа.)

Согласно определению (69.2), явный вид эффективного поля находится варьированием полной свободной энергии тела. Последняя дается интегралом

$$\tilde{F} = \int \left\{ f_0(M) + U_{\text{неод}} - \mathbf{M} \mathbf{H} - \frac{H^2}{8\pi} \right\} dV \quad (69.5)$$

(см. VIII, § 39). Здесь $f_0(M)$ — плотность свободной энергии однородно намагниченного тела при $H = 0$, учитывающая лишь обменные взаимодействия и потому не зависящая от направления $\mathbf{M}$; $U_{\text{неод}}$ — плотность дополнительной обменной энергии, связанной с медленным изменением направления вектора $\mathbf{M}$ вдоль неоднородного намагниченного тела.

Первые члены разложения этой энергии по степеням производных от момента $\mathbf{M}$ по координатам имеют вид

$$U_{\text{неод}} = \frac{1}{2} \alpha_{ik} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x_k}, \quad (69.6)$$

причем эта квадратичная (по производным) форма существенно положительна. Выражение (69.6) составлено так, чтобы (в соответствии со свойствами обменного взаимодействия) не зависеть от абсолютного направления вектора $\mathbf{M}$. В одноосных кристаллах симметричный тензор второго ранга α_{ik} имеет компоненты $\alpha_{xx} = \alpha_{yy} \equiv \alpha_1$, $\alpha_{zz} \equiv \alpha_2$ (ось z — ось симметрии кристалла); в кубических кристаллах $\alpha_{ik} = \alpha \delta_{ik}$.

Порядок величины коэффициентов α_{ik} можно оценить, заметив, что энергия неоднородности, отнесенная к объему одной элементарной ячейки кристаллической решетки, должна была бы достигать характерных атомных значений энергии обменного взаимодействия, если бы направление момента существенно менялось на расстояниях порядка постоянной решетки a . Характерная обменная энергия совпадает, по порядку величины, с температурой Кюри T_c (точка исчезновения ферромагнетизма). Из условия $T_c/a^3 \sim \alpha M^2/a^2$ находим

$$\alpha \sim T_c/aM^2. \quad (69.7)$$

Варьируя интеграл (69.5) (при заданных значениях $\mathbf{H}$ в каждой точке тела) и произведя во втором члене интегрирование по частям, получим

$$\delta \tilde{F} = \int \left\{ f'_0(M) \frac{\mathbf{M}}{M} - \alpha_{ik} \frac{\partial^2 \mathbf{M}}{\partial x_i \partial x_k} - \mathbf{H} \right\} \delta \mathbf{M} dV;$$

Согласно определению (69.2), выражение в фигурных скобках есть $-\mathbf{H}_{\text{эф}}$. Первый член в нем направлен вдоль $\mathbf{M}$, но при подстановке в уравнение движения (69.4) такой член все равно выпадает, и потому его можно вообще опустить¹⁾. Таким образом, находим

$$\mathbf{H}_{\text{эф}} = \alpha_{ik} \frac{\partial^2 \mathbf{M}}{\partial x_i \partial x_k} + \mathbf{H}. \quad (69.8)$$

Для получения полной системы уравнений к (69.4) и (69.8) надо добавить еще уравнение Максвелла, связывающее поле $\mathbf{H}$ с распределением намагниченности $\mathbf{M}$. Спиновые волны, которые будут рассмотрены в следующем параграфе, являются низкочастотными в том смысле, что $\omega \ll ck$. В этих условиях поле квазистационарно; в уравнениях Максвелла можно пренебречь производными по времени, и они сводятся к виду

$$\text{rot } \mathbf{H} = 0, \quad \text{div } \mathbf{B} = \text{div } (\mathbf{H} + 4\pi \mathbf{M}) = 0. \quad (69.9)$$

В связи с этим может возникнуть вопрос о правомерности варьирования интеграла (69.5) по $\mathbf{M}$ при постоянном $\mathbf{H}$ несмотря на то, что они связаны вторым уравнением (69.9). Дело, однако, в том, что если положить $\mathbf{H} = -\nabla \varphi$ (в виду первого уравнения) и вычислить вариацию интеграла по φ , то она обратится в силу второго уравнения в нуль, так что варьирование $\mathbf{H}$ не даст вклада в $\delta \tilde{F}$.

¹⁾ После этого, однако, $\mathbf{H}_{\text{эф}}$ уже не обязательно будет обращаться в нуль в равновесии.

Если тело не находится во внешнем магнитном поле, то поле внутри него целиком связано с распределением намагниченности и представляет собой, вообще говоря, величину того же порядка, что и $\mathbf{M}$. В этом смысле член $\mathbf{H}$ в эффективном поле (69.8) представляет собой релятивистский эффект (напомним, что атомные магнитные моменты, а с ними и спонтанная намагниченность $\mathbf{M}$, определяются магнетоном Бора $\beta = |e|\hbar/(2mc)$, — величиной, содержащей c в знаменателе). Поэтому в рассматриваемом пока чисто обменном приближении второй член в (69.8) следует опустить, так что уравнение движения

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = \frac{g|e|}{2mc} \alpha_{ik} \left[\frac{\partial^2 \mathbf{M}}{\partial x_i \partial x_k} \right]. \quad (69.10)$$

Обратим внимание на нелинейность этого уравнения.

Уравнение (69.10) можно переписать в виде уравнения непрерывности для магнитного момента:

$$\frac{\partial M_i}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{il}}{\partial x_l} = 0, \quad (69.11)$$

где тензор потока момента имеет вид

$$\Pi_{il} = \frac{g|e|}{2mc} \alpha_{lk} \left[\mathbf{M} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x_k} \right]_i.$$

Этого следовало ожидать заранее, поскольку в обменном приближении полный магнитный момент тела сохраняется.

Учтем теперь, что наряду с обменными в ферромагнетике существуют также и значительно более слабые релятивистские взаимодействия электронных моментов: спин-спиновые и спин-орбитальные. В макроскопической теории они описываются энергией магнитной анизотропии, плотность которой $U_{\text{ан}}$ зависит от направления вектора намагниченности по отношению к кристаллической решетке; этими взаимодействиями устанавливается равновесное направление спонтанной намагниченности ферромагнетика. К релятивистским относится, как уже было указано, также и взаимодействие $\mathbf{M}$ с магнитным полем $\mathbf{H}$.

В одноосном кристалле энергия анизотропии имеет вид

$$U_{\text{ан}} = -\frac{K}{2} M_z^2. \quad (69.12)$$

Если $K > 0$, то равновесная намагниченность направлена вдоль оси симметрии — ось z (ферромагнетик типа «легкая ось»); если же $K < 0$, то направление спонтанной намагниченности лежит в плоскости xu (ферромагнетик типа «легкая плоскость»).

В кубическом кристалле энергия анизотропии может быть представлена в виде

$$U_{\text{ан}} = \frac{K'}{M^2} (M_x^2 M_y^2 + M_x^2 M_z^2 + M_y^2 M_z^2), \quad (69.13)$$

где оси x, y, z направлены вдоль трех осей симметрии четвертого порядка (ребра кубических ячеек). Если $K' > 0$, то равновесный вектор $\mathbf{M}$ направлен вдоль одного из ребер кубических ячеек, а если $K' < 0$, то — вдоль одной из пространственных диагоналей ячеек¹).

Для определенности, будем рассматривать одноосный ферромагнетик. Добавив к подынтегральному выражению в (69.5) член $U_{\text{ан}}$ (69.12), получим после варьирования дополнительный член $-K M_z \nu \delta \mathbf{M}$, где ν — единичный вектор в направлении оси симметрии кристалла. Таким образом, для эффективного поля находим

$$\mathbf{H}_{\text{эф}} = \alpha_{ik} \frac{\partial^2 \mathbf{M}}{\partial x_i \partial x_k} + K M_z \nu + \mathbf{H}. \quad (69.14)$$

Легко видеть, что этим изменением эффективного поля исчерпываются изменения, которые учет релятивистских эффектов вносит в уравнение движения (69.9). Действительно, в отсутствие диссипации правая часть уравнения движения по-прежнему должна быть перпендикулярна $\mathbf{H}_{\text{эф}}$, т. е. должна иметь вид $[\mathbf{M}' \mathbf{H}_{\text{эф}}]$, где $\mathbf{M}'$ может отличаться от $\mathbf{M}$ лишь за счет релятивистских поправок, всегда малых по сравнению с большой величиной $\mathbf{M}$ и потому несущественных. Релятивистские же члены в $\mathbf{H}_{\text{эф}}$ добавляются к величине, малой в силу медленности изменения $\mathbf{M}$ вдоль тела; эти члены могут стать существенными при достаточно больших длинах волн.

§ 70. Магноны в ферромагнетике. Спектр

Применим полученные в предыдущем параграфе уравнения к распространению волн, в которых плотность магнитного момента совершает малые колебания, прецессируя относительно своего равновесного значения $\mathbf{M}_0$. Мы будем рассматривать однодоменный образец, во всем объеме которого $\mathbf{M}_0$ постоянно, и ограничимся случаем волн с длиной, много меньшей размеров образца. Тогда среду можно рассматривать как неограниченную.

¹) Безразмерные величины K, K' для различных ферромагнетиков имеют значения, лежащие в широком интервале от десятых долей единицы до десятков. Порядок же величины отношения релятивистских взаимодействий к обменному характеризуется величиной $a^3 U_{\text{ан}}/T_c$ и составляет обычно $10^{-4} - 10^{-5}$.

Рассмотрим сначала вопрос с учетом только обменных взаимодействий, т. е. на основе уравнения (69.11). Положим $\mathbf{M} = \mathbf{M}_0 + \mathbf{m}$, где $\mathbf{m}$ — малая величина, и линеаризуем уравнение, отбросив члены второго порядка по $\mathbf{m}$; поскольку абсолютная величина $M = M_0$, то в этом приближении $\mathbf{m} \perp \mathbf{M}_0$. Получим

$$\mathbf{m} = \frac{|e|}{mc} \alpha_{ik} \left[\frac{\partial^2 \mathbf{m}}{\partial x_i \partial x_k} \mathbf{M}_0 \right] \quad (70.1)$$

(здесь и ниже полагаем $g = 2$). Для $\mathbf{m}$, зависящего от координат и времени как $\exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)]$, находим

$$i\omega \mathbf{m} = \frac{|e|}{mc} \alpha k^2 [\mathbf{m} \mathbf{M}_0], \quad (70.2)$$

где $\alpha = \alpha(\mathbf{n}) = \alpha_{ik} n_i n_k$, $\mathbf{n}$ — единичный вектор в направлении волнового вектора $\mathbf{k}$. Раскрыв это уравнение в компонентах, имеем

$$\begin{aligned} i\omega m_x &= \frac{|e|}{mc} \alpha M k^2 m_y, \\ i\omega m_y &= -\frac{|e|}{mc} \alpha M k^2 m_x \end{aligned}$$

(ось z — в направлении $\mathbf{M}_0$). Отсюда находим закон дисперсии спиновых волн¹⁾

$$\omega = \frac{|e|M}{mc} \alpha(\mathbf{n}) k^2. \quad (70.3)$$

Мы видим, в соответствии со сказанным в начале предыдущего параграфа, что в обменном приближении частота стремится к нулю при $k \rightarrow 0$. Вектор $\mathbf{m}$ в спиновой волне вращается в плоскости xy с постоянной угловой скоростью ω , оставаясь постоянным по абсолютной величине.

В квантовой картине формула (70.3) определяет энергетический спектр магнонов $\varepsilon = \hbar\omega$ ²⁾:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2\beta M \alpha(\mathbf{n}) k^2. \quad (70.4)$$

В формализме вторичного квантования макроскопические величины, описывающие ферромагнетик, заменяются операторами, выраженными через операторы уничтожения и рождения

¹⁾ Квадратичный закон дисперсии спиновых волн был впервые найден с помощью микроскопической теории Ф. Блохом (F. Bloch, 1930). Выражение этого спектра через макроскопические параметры дано Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшицем (1945).

²⁾ В этой главе β везде обозначает магнетон Бора: $\beta = |e|\hbar/(2mc)$.

магнонов. Покажем, как это должно быть сделано для магнонов (70.4).

Приведем в соответствие с классической величиной $\mathbf{M}$ векторный оператор $\widehat{\mathbf{M}}$, компоненты которого удовлетворяют определенным правилам коммутации. Пусть $\widehat{\mathbf{S}}(\mathbf{r})\delta V$ — оператор суммарного спина атомов в физически бесконечно малом элементе объема δV в точке $\mathbf{r}$. Операторы $\widehat{\mathbf{S}}(\mathbf{r}_1)\delta V_1$ и $\widehat{\mathbf{S}}(\mathbf{r}_2)\delta V_2$, относящиеся к различным элементам δV_1 и δV_2 , коммутативны. Компоненты же одного и того же оператора $\widehat{\mathbf{S}}(\mathbf{r})\delta V$ удовлетворяют обычным правилам коммутации момента:

$$\widehat{S}_x\delta V \cdot \widehat{S}_y\delta V - \widehat{S}_y\delta V \cdot \widehat{S}_x\delta V = i\widehat{S}_z\delta V,$$

или $\widehat{S}_x\widehat{S}_y - \widehat{S}_y\widehat{S}_x = i\widehat{S}_z/\delta V$ (и аналогично для остальных коммутаторов). В пределе $\delta V \rightarrow 0$ эти правила записываются для любых $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ в едином виде

$$\widehat{S}_x(\mathbf{r}_1)\widehat{S}_y(\mathbf{r}_2) - \widehat{S}_y(\mathbf{r}_2)\widehat{S}_x(\mathbf{r}_1) = i\widehat{S}_z(\mathbf{r}_1)\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

Умножив теперь это равенство на $4\beta^2$ и заметив, что оператор намагнитченности $\widehat{\mathbf{M}} = -2\beta\widehat{\mathbf{S}}$, получим

$$\widehat{M}_x(\mathbf{r}_1)\widehat{M}_y(\mathbf{r}_2) - \widehat{M}_y(\mathbf{r}_2)\widehat{M}_x(\mathbf{r}_1) = -2i\beta\widehat{M}_z(\mathbf{r}_1)\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (70.5)$$

В применении к спиновым волнам, в которых $\mathbf{M}$ испытывает малые колебания вокруг оси z , в первом приближении по малым величинам m_x , m_y можно заменить в правой стороне (70.5)

оператор $\widehat{M}_z$ числом $M_z \approx M$; тогда

$$\widehat{m}_x(\mathbf{r}_1)\widehat{m}_y(\mathbf{r}_2) - \widehat{m}_y(\mathbf{r}_2)\widehat{m}_x(\mathbf{r}_1) = -2i\beta M\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (70.6)$$

Отсюда видно, что величины m_x и m_y играют (с точностью до постоянных множителей) в данном случае роль канонически сопряженных «обобщенных координат и импульсов» — подобно тому, как φ и ρ' играли такую же роль при квантовании звуковых волн в жидкости (§ 24). Подчеркнем, однако, существенное отличие между обоими случаями. Правило коммутации (24.7) для фононных операторов является точным, не связанным с малостью колебаний (т. е. с малостью чисел заполнения фононных состояний). Правило же (70.6) является приближенным, справедливым лишь в первом приближении по малой величине $\mathbf{m}$.

Исходя из правила коммутации (70.6) и соотношения между операторами $\widehat{m}_x$ и $\widehat{m}_y$, отвечающего линейным уравнениям (70.1), можно найти выражения этих операторов через операторы уничтожения и рождения магнонов, подобно тому как это было сделано в § 24 для фононов (см. задачу 4 к § 71).

Вернемся к изучению спектра магнонов и обратимся к учету влияния релятивистских эффектов на этот спектр. Теперь уже необходимо учитывать и магнитное поле $\mathbf{H}$, возникающее при колебаниях $\mathbf{M}$. Оно будет того же порядка малости, что и $\mathbf{m}$; обозначим его здесь как $\mathbf{h}$.

Уравнения Максвелла (69.10) дают

$$[\mathbf{k}\mathbf{h}] = 0, \quad \mathbf{k}\mathbf{h} = -4\pi\mathbf{k}\mathbf{m}.$$

Отсюда видно, что поле $\mathbf{h}$ направлено вдоль волнового вектора и равно

$$\mathbf{h} = -4\pi(\mathbf{n}\mathbf{m})\mathbf{n}. \quad (70.7)$$

Подставив (70.7) в последние два члена подынтегрального выражения в (69.5), получим

$$-\mathbf{m}\mathbf{h} - \frac{\hbar^2}{8\pi} = 2\pi(\mathbf{n}\mathbf{m})^2 \quad (70.8)$$

(здесь опущен член $\mathbf{M}_0\mathbf{h}$, который ввиду потенциальности поля $\mathbf{h}$ при интегрировании по всему объему преобразуется в интеграл по поверхности и обращается в нуль); эту часть энергии анизотропии в спиновой волне иногда называют *магнито-статической*.

Пусть ферромагнетик одноосен и относится к типу «легкая ось», так что $\mathbf{M}_0$ направлено вдоль оси симметрии кристалла (ось z): $\mathbf{M}_0 = \nu M$. Имея в виду дальнейшие применения, допустим также существование внешнего поля $\mathfrak{H}$, параллельного тому же направлению ν ; при этом образец надо представить себе как цилиндр с осью вдоль ν . Тогда поле внутри тела $\mathbf{H} = \mathfrak{H} + \mathbf{h}$. Линеаризованное уравнение движения (которое мы выписываем уже умноженным на $\hbar$)

$$-i\varepsilon\mathbf{m} = 2\beta M \left\{ \left(\alpha k^2 + K + \frac{\mathfrak{H}}{M} \right) [\nu\mathbf{m}] - [\nu\mathbf{h}] \right\}. \quad (70.9)$$

Для одноосного кристалла $\alpha = \alpha_1 \sin^2 \theta + \alpha_2 \cos^2 \theta$, где θ — угол между $\mathbf{k}$ и ν .

Подставив сюда $\mathbf{h}$ из (70.7), расписываем уравнение в компонентах (причем ось x удобно выбрать в плоскости, проходящей через направления ν и $\mathbf{n}$). Из условия совместности получающихся двух уравнений для m_x и m_y находим закон дисперсии

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2\beta M \left[\left(\alpha k^2 + K + \frac{\mathfrak{H}}{M} \right) \left(\alpha k^2 + K + \frac{\mathfrak{H}}{M} + 4\pi \sin^2 \theta \right) \right]^{1/2}. \quad (70.10)$$

Отметим, что благодаря наличию члена $\sin^2 \theta = k_x^2/k^2$ разложение $\varepsilon(\mathbf{k})$ по степеням компонент $\mathbf{k}$ не имеет простого степенного характера; это связано с дальнедействующим характером магнитных взаимодействий.

Выражение вида (70.10), выведенное здесь для одноосного ферромагнетика (типа «легкая ось»), справедливо и для кубических кристаллов. Это следует из того, что изменение энергии анизотропии при малых отклонениях вектора $\mathbf{M}$ от своего равновесного направления имеет в обоих случаях одинаковый вид. Так, для кубического кристалла с $K' > 0$ изменение $\delta U_{\text{ан}}$ при отклонении $\mathbf{M}$ от направления $\mathbf{M}_0$ вдоль ребра куба зависит только от угла ϑ между $\mathbf{M}$ и $\mathbf{M}_0$ и равно $\delta U_{\text{ан}} = K' M^2 \vartheta^2$. Сравнив это с аналогичным выражением $\delta U_{\text{ан}} = K M^2 \vartheta^2 / 2$ для одноосного кристалла, мы видим, что для перехода к случаю кубического кристалла с $K' > 0$ достаточно заменить в (70.10) $K \rightarrow 2K'$. Аналогичным образом, легко убедиться, что для перехода к случаю кубического кристалла с $K' < 0$ (направлением $\mathbf{M}_0$ вдоль пространственной диагонали куба) надо заменить $K \rightarrow 4|K'|/3$. Отметим также, что в кубическом кристалле величина $\alpha(\mathbf{n})$ сводится к постоянной. Для одноосного же ферромагнетика типа «легкая плоскость» ($K < 0$) ситуация иная: изменение $\delta U_{\text{ан}}$ при отклонении $\mathbf{M}$ от $\mathbf{M}_0$ зависит как от полярного угла, так и от азимута направления $\mathbf{M}$ относительно $\mathbf{M}_0$; поэтому этот случай требует особого рассмотрения — см. задачу.

Напомним, что результат (70.10) относится лишь к начальной части спектра, в которой квазиимпульсы $k \ll 1/a$ и допустимо макроскопическое рассмотрение. Со стороны больших, но удовлетворяющих этому условию значений k ($\alpha k^2 \gg 4\pi$, K) выражение (70.10) сводится к

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2\beta M \alpha(\mathbf{n}) k^2 + 2\beta \mathfrak{H}. \quad (70.11)$$

Первый член здесь совпадает с чисто обменным выражением (70.4). Внешнее же поле добавляет к энергии магнона просто член $2\beta \mathfrak{H}$. В этом приближении, следовательно, магнон обладает проекцией момента на $\mathbf{M}_0$, равной -2β . Возбуждение в теле каждого магнона уменьшает полный магнитный момент тела на 2β .

В обратном случае, при $\mathbf{k} \rightarrow 0$, выражение (70.10) стремится к отличной от нуля величине, равной (при $\mathfrak{H} = 0$)

$$\varepsilon(0) = 2\beta M K \left(1 + \frac{4\pi}{K} \sin^2 \theta\right)^{1/2}. \quad (70.12)$$

Таким образом, учет магнитной анизотропии приводит к появлению энергетической щели в спектре магнонов¹⁾. Это естественно, поскольку при наличии анизотропии даже поворот магнитного момента как целого (т. е. при $\mathbf{k} = 0$) связан с конечной энергией. Мы видим, что при малых $\mathbf{k}$ релятивистские эффекты, несмотря на их малость, приводят к относительно большим поправкам к спектру.

Представление о магнонах как об элементарных возбуждениях относится к слабо возбужденным состояниям тела, а тем самым — к низким температурам. Поэтому в относящихся к магнонам формулах значения всех материальных констант (в том числе и намагниченности M) должны браться при $T = 0$.

Вернемся к сделанному в § 69 предположению о слабости диссипации. В квантовой картине диссипация означает конечность времени жизни магнонов, обусловленную их взаимодействием друг с другом и с другими квазичастицами.

Если сначала говорить о взаимодействии магнонов друг с другом, то прежде всего надо отметить, что в обменном приближении число магнонов не меняется (каждый магнон дает в M_z одинаковый вклад -2β , а обменное взаимодействие сохраняет M_z). Поэтому в таком приближении возможны лишь процессы рассеяния. Их вероятность, однако, уменьшается с понижением температуры — уже просто из-за уменьшения числа рассеивателей, — так что обменное затухание во всяком случае стремится к нулю при $T = 0$. Мы увидим ниже (§ 72), что состояние с одним магноном в обменном приближении есть действительно строго стационарное состояние системы²⁾.

При $T = 0$ затухание магнонов обусловлено только процессами их распада. Такие процессы возможны лишь за счет релятивистских взаимодействий, и уже поэтому их вероятность мала. Кроме того, при малых $\mathbf{k}$ вероятность распада всегда уменьшается за счет малости статистических весов (фазовых объемов) конечных состояний процесса.

Затухание магнонов вызывается также и их взаимодействием с фононами (роль оператора возмущения играет здесь зависящая от деформации кристалла часть гамильтониана обменного взаимодействия). При $T = 0$ возможен процесс рождения фонона магноном; для этого, однако, квазиимпульс магнона должен

¹⁾ Соответствующую частоту $\omega(0) = \varepsilon(0)/\hbar$ называют частотой *ферромагнитного резонанса*.

²⁾ Отметим также, что сечение рассеяния двух магнонов друг на друге в обменном приближении стремится к нулю при уменьшении их энергии (см. § 73). Это обстоятельство дополнительно уменьшает обменное затухание магнонов при низких температурах. При достаточно низких температурах релятивистские эффекты существенны и для процессов рассеяния.

быть достаточно велик — скорость магнона $\partial\varepsilon/\hbar\partial\mathbf{k}$ должна быть больше скорости звука (ср. примечание на с. 347). Вероятность процесса мала также и за счет малости статистического веса конечного состояния.

Наконец, в ферромагнитном металле всегда возможно (за счет обменного взаимодействия с электронами проводимости) возбуждение магноном электрона из-под ферми-поверхности. И здесь вероятность процесса при малых $\mathbf{k}$ мала за счет малости статистического веса конечных состояний.

Задача

Найти спектр магнонов в одноосном ферромагнетике типа «легкая плоскость» ($K < 0$).

Решение. Равновесная намагниченность $\mathbf{M}_0$ лежит в плоскости, перпендикулярной оси симметрии кристалла (оси z); выберем направление $\mathbf{M}_0$ в качестве оси x . Линеаризованное уравнение движения магнитного момента имеет в этом случае вид

$$-i\varepsilon\mathbf{m} = 2\beta \{ \alpha k^2 [\mathbf{n}_x \mathbf{m}] - |K| m_z \mathbf{n}_y - [\mathbf{n}_x \mathbf{h}] \},$$

где $\mathbf{n}_x$, $\mathbf{n}_y$ — единичные векторы вдоль координатных осей, а вектор $\mathbf{m}$ лежит в плоскости yz , перпендикулярной $\mathbf{M}_0$. Подставив сюда $\mathbf{h}$ из (70.7), расписав уравнение в компонентах и приравняв нулю определитель получающейся системы, получим спектр магнонов

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2\beta M [\alpha k^2 (\alpha k^2 + |K|) + 4\pi \sin^2 \theta (\alpha k^2 + |K| \sin^2 \varphi)]^{1/2},$$

где θ и φ — полярный угол и азимут направления $\mathbf{k}$ относительно направления $\mathbf{M}_0$ (причем азимут отсчитывается от плоскости xz). При $\alpha k^2 \gg 1$ мы возвращаемся к тому же квадратичному спектру (70.4), а при $k \rightarrow 0$ энергия магнона стремится к величине

$$\varepsilon(0) = 4(\pi|K|)^{1/2} \beta M \sin \theta \sin \varphi|,$$

обращающейся в нуль, когда вектор $\mathbf{k}$ лежит в плоскости xz , образованной осью симметрии и спонтанной намагниченностью кристалла. Это обращение в нуль является, однако, приближенным: учет в энергии анизотропии членов более высокого порядка приводит к появлению анизотропии и в плоскости xy и тем самым — к конечной энергетической щели во всех направлениях $\mathbf{k}$ ¹).

§ 71. Магноны в ферромагнетике. Термодинамические величины

Возбужденные в ферромагнетике магноны вносят определенный вклад в его термодинамические величины. Полученные в предыдущем параграфе результаты позволяют вычислить этот

¹) Напомним (см. VIII, § 40), что разложение энергии анизотропии по степеням $\mathbf{M}$ есть в действительности разложение по релятивистскому отношению v/c (и не связано с малостью $\mathbf{M}$, т. е. с близостью к точке Кюри).

вклад при температурах, низких в том смысле, что $T \ll T_c$. Действительно, в тепловом равновесии при температуре T основная часть магнонов имеет энергии $\varepsilon \sim T$. Для квадратичного спектра

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2\beta M \alpha(\mathbf{n})k^2, \quad (71.1)$$

это значит, что при температурах $T \ll T_c$ возбуждены магноны с квазиимпульсами $k \ll (T_c/\beta M \alpha)^{1/2}$. Воспользовавшись оценкой (69.7) для α и оценив намагниченность как $M \sim \beta/a^3$ (на одну элементарную ячейку приходится магнитный момент порядка нескольких β), находим отсюда $ak \ll 1$, т. е. условие применимости результатов § 70.

«Магнонные» части термодинамических величин ферромагнетика вычисляются как термодинамические величины идеального бозе-газа с равным нулю химическим потенциалом. Так, для магнонной части термодинамического потенциала Ω имеем

$$\Omega_{\text{маг}} = T \int \ln(1 - e^{-\varepsilon/T}) \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} \quad (71.2)$$

(см. V, (54.4)). Отсюда для магнонного вклада во внутреннюю энергию¹⁾

$$E_{\text{маг}} = \Omega_{\text{маг}} - T \frac{\partial \Omega_{\text{маг}}}{\partial T} = \int \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/T} - 1} \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (71.3)$$

Магнонный же вклад в спонтанную намагниченность дает ее изменение с температурой. Он вычисляется как производная

$$M_{\text{маг}} \equiv M(T) - M(0) = -\frac{1}{V} \frac{\partial \Omega_{\text{маг}}}{\partial \mathfrak{H}} \Big|_{\mathfrak{H} \rightarrow 0}$$

по внешнему магнитному полю (ср. VIII, (31.4)). Дифференцируя выражение (71.2), получим

$$M_{\text{маг}} = - \int \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathfrak{H}} \Big|_{\mathfrak{H} \rightarrow 0} \frac{1}{e^{\varepsilon/T} - 1} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (71.4)$$

Производная $-(\partial \varepsilon / \partial \mathfrak{H})$ представляет собой собственный магнитный момент магнона.

Вычислим интегралы (71.3), (71.4) при температурах $T \gg 2\pi\beta M^2$; тогда для спектра магнонов можно пользоваться

¹⁾ При химическом потенциале $\mu = 0$ (а потому и $\Phi = N\mu = 0$) имеем $E = \Phi + TS - PV = TS + \Omega$; энтропия же $S = -\partial \Omega / \partial T$. Выражение (71.3) можно было бы, конечно, написать и непосредственно, без обращения к формуле (71.2).

²⁾ Для типичного значения $M = 2 \cdot 10^3$ Гс это условие дает $T \gg 1$ К.

предельным выражением (71.1). В виду быстрой сходимости интегралов интегрирование можно распространить по всему $\mathbf{k}$ -пространству (вместо одной ячейки обратной решетки). Полагая величину α постоянной (для кубических кристаллов) и заменив $d^3k \rightarrow 4\pi k^2 dk$, после очевидной подстановки получим

$$E_{\text{маг}} = \frac{VT^{5/2}}{4\pi^2 A^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} dx}{e^x - 1} = V \frac{T^{5/2} \Gamma(5/2) \zeta(5/2)}{4\pi^2 A^{3/2}},$$

где для краткости обозначено $A = 2\beta M \alpha$ (так что $\varepsilon = Ak^2$)¹⁾. Для теплоемкости $C_{\text{маг}} = \delta E_{\text{маг}} / \delta T$ находим отсюда

$$C_{\text{маг}} = V \frac{5\Gamma(5/2)\zeta(5/2)}{8\pi^2 A^{3/2}} T^{3/2} = 0,113 \left(\frac{T}{A}\right)^{3/2} V. \quad (71.5)$$

Напомним, что это выражение дает лишь магнонную часть теплоемкости; наряду с ней теплоемкость кристалла содержит еще и обычную фононную часть.

Обращаясь к интегралу (71.4), подставляем, согласно (70.11), значение -2β для магнитного момента магнона. В результате при $T \gg 2\pi\beta M$ получим

$$M_{\text{маг}} = -\frac{\beta T^{3/2}}{2\pi^2 A^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{e^x - 1}, \quad (71.6)$$

откуда

$$M(T) = M(0) - \frac{\beta T^{3/2} \Gamma(3/2) \zeta(3/2)}{2\pi^2 A^{3/2}} = M(0) - 0,117 \beta (T/A)^{3/2} \quad (71.7)$$

(магнонный вклад исчерпывает, конечно, все изменение намагниченности, поскольку фононы не несут с собой магнитного момента). Таким образом, изменение спонтанной намагниченности в области температур $2\pi\beta M \ll T \ll T_c$ следует закону $T^{3/2}$ (*F. Bloch*, 1930).

Наличие щели (70.10) в спектре магнонов приводит к экспоненциальной зависимости $C_{\text{маг}}$ и $M_{\text{маг}}$ от T в области еще более низких температур. При $T \ll \beta K M$

$$C_{\text{маг}}, M_{\text{маг}} \propto \exp(-2\beta K M / T). \quad (71.8)$$

¹⁾ О вычислении интегралов такого типа см. V, § 58.

Величина, стоящая в числителе экспоненты, — наименьшее значение энергетической щели, достигаемое при $\theta = 0$ и $\theta = \pi$ (см. также задачу 1).

Если спонтанная намагниченность ферромагнетика в основном состоянии равна наибольшему возможному (как говорят, номинальному) значению, отвечающему параллельности всех атомных моментов в теле, то это значение уже не изменится при наложении (в том же направлении) внешнего магнитного поля, т. е. восприимчивость χ в этом направлении равна нулю.

Учет релятивистских взаимодействий уменьшает спонтанную намагниченность (при $T = 0$) по сравнению с ее «обменным» значением и приводит к появлению отличной от нуля восприимчивости (*T. Holstein, H. Primakoff, 1940*). Хотя этот эффект и очень мал, его вычисление представляет принципиальный интерес.

При вычислении выше магнитной части термодинамических величин мы опустили нулевую энергию «магнитных осцилляторов», не дающую вклада в температурную зависимость этих величин. Нулевая энергия отвечает числам заполнения магнанных состояний, равным $1/2$:

$$E(0)_{\text{маг}} = \int \frac{1}{2} \varepsilon(\mathbf{k}) \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3}.$$

Соответственно для «нулевой» намагниченности имеем

$$M(0) = - \int \frac{1}{2} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathfrak{H}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (71.9)$$

Этот интеграл расходится при больших k , т. е. он определяется главным образом коротковолновыми магнонами ($ka \sim 1$), которые вообще нельзя рассматривать макроскопически. Однако изменение намагниченности под влиянием релятивистских эффектов определяется, как мы увидим, длинноволновой областью спектра магнонов и может быть вычислено с помощью полученных в § 70 формул.

Для простоты будем рассматривать кубический кристалл и пренебрежем малой в этом случае константой анизотропии, т. е. будем писать спектр магнонов (70.10) в виде

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2\beta[(bk^2 + \mathfrak{H})(bk^2 + \mathfrak{H} + 4\pi M \sin^2 \theta)]^{1/2}, \quad (71.10)$$

где $b = \alpha M$; релятивистским эффектам отвечает в этом выражении член $4\pi M \sin^2 \theta$, возникающий от учета магнитостатической энергии. Искомое изменение δM намагниченности под влиянием релятивистских эффектов получается вычитанием из (71.9)

такого же интеграла с $\varepsilon_{об}(\mathbf{k}) = 2\beta b k^2 + 2\beta \mathfrak{H}$ вместо $\varepsilon(\mathbf{k})$:

$$\delta M = -\frac{1}{2} \int \frac{\partial}{\partial \mathfrak{H}} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon_{об}(\mathbf{k})] \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (71.11)$$

Этот интеграл уже сходится при больших $\mathbf{k}^1$.

Для вычисления удобно сначала продифференцировать его по M при постоянном b (для этого и введено обозначение b в (71.10)). После простых преобразование получим

$$\frac{\partial \delta M}{\partial M} = -\frac{4\pi^2 \beta M}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{\sin^4 \theta \cdot 2\pi k^2 dk \cdot \sin \theta d\theta}{(bk^2 + \mathfrak{H})^{1/2} (bk^2 + \mathfrak{H} + 4\pi M \sin^2 \theta)^{3/2}}.$$

Ввиду сходимости интегрирование по dk можно распространить до ∞ .

При $\mathfrak{H} = 0$ интеграл легко вычисляется; интегрируя затем по M , получим

$$\delta M = -\frac{\sqrt{\pi} \beta}{8 \alpha^{3/2}}. \quad (71.12)$$

Эта величина очень мала: $\delta M/M \sim 10^{-6}$.

Если же внешнее поле велико ($\mathfrak{H} \gg 4\pi M$), можно пренебречь членом $4\pi M \sin^2 \theta$ в знаменателе подынтегрального выражения. После этого вычисление приводит к результату

$$\delta M = -\frac{2\pi \beta M^{1/2}}{15 \alpha^{3/2} \mathfrak{H}^{1/2}}. \quad (71.13)$$

При $\mathfrak{H} \rightarrow \infty$ δM стремится, как и следовало, к нулю.

В заключение отметим, что если бы мы попытались тем же способом, который был применен в этом параграфе к трехмерному случаю, рассмотреть температурную зависимость намагниченности двумерного ферромагнетика, то (в чисто обменном приближении) мы получили бы вместо (71.6) логарифмически расходящийся интеграл. Это означает, что спонтанное намагничение в двумерной системе с обменным взаимодействием в действительности отсутствует при всех $T \neq 0$. Эта ситуация аналогична той, которая была отмечена в § 27 для двумерной бозе-жидкости (и в V, § 137 — для двумерного кристалла). Независимость энергии системы от направления магнитного момента приводит к тому, что в ее выражение входят только производные

¹⁾ Во избежание недоразумений отметим, что поправку к энергии основного состояния этим способом определить нельзя: без дифференцирования по $\mathfrak{H}$ интеграл от $\varepsilon - \varepsilon_{об}$ расходится при использовании длинноволновых выражений для спектра магнонов.

вектора $\mathbf{M}$; в свою очередь, это приводит, в конечном итоге, к расходимости флуктуаций (в двумерном случае), разрушающих намагничение. Учет релятивистских взаимодействий, зависящих от направления $\mathbf{M}$, стабилизирует флуктуации и делает возможным существование двумерного ферромагнетика.

Задачи

1. Вычислить магнонные части термодинамических величин при температурах $T \ll \varepsilon(0)$.

Решение. Существенны магныны с малыми квазиимпульсами $\mathbf{k}$, распространяющиеся в направлении, где щель минимальна, т. е. вблизи $\theta = 0$ и $\theta = \pi$; оба эти значения дают одинаковый вклад. Например, при малых θ имеем, с требуемой точностью,

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2\beta KM + Ak^2 + 4\pi\beta M\theta^2,$$

где $A = 2\beta M \alpha$ для кубических кристаллов или $A = 2\beta M \alpha_2$ для одноосных кристаллов типа «легкая ось». Распределение магновов при рассматриваемых температурах можно считать бoльцмановским (т. е. можно пренебречь единицей в знаменателях подынтегральных выражений) и заменить везде в предэкспоненциальных множителях $\varepsilon(\mathbf{k})$ на $\varepsilon(0)$. Интегрирование по k и по θ распространяется до ∞ , и в результате находим

$$E_{\text{маг}} = V \frac{KT^{(5/2)}}{32\pi^{5/2} A^{3/2}} \exp\left(-\frac{2\beta KM}{T}\right), \quad M_{\text{маг}} = -\frac{E_{\text{маг}}}{VKM}.$$

При вычислении теплоемкости следует дифференцировать только экспоненциальный множитель

$$C_{\text{маг}} = 2\beta KMT^{-2} E_{\text{маг}}.$$

2. Определить зависимость намагниченности от внешнего поля при условиях $\mathfrak{H} \gg 4\pi M$, $T \gg \beta\mathfrak{H}$.

Решение. В указанных условиях можно пренебречь релятивистскими членами и писать $\varepsilon(\mathbf{k})$ в виде (70.11). Продифференцировав выражение (71.4), находим

$$\frac{\partial M}{\partial \mathfrak{H}} = \frac{4\beta^2}{T} \int \frac{e^{\varepsilon/T}}{(e^{\varepsilon/T} - 1)^2} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}.$$

В интеграле существенны малые $\mathbf{k}$. Поэтому

$$\frac{\partial M}{\partial \mathfrak{H}} \approx 4\beta^2 T \int \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{T}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{(\alpha k^2 M_0 + \mathfrak{H})^2}$$

(полагаем $\alpha = \text{const}$; M_0 — значение M при $\mathfrak{H} = 0$) и окончательно

$$\frac{\partial M}{\partial \mathfrak{H}} = \frac{T}{8\pi (\alpha M_0)^{3/2} \mathfrak{H}^{1/2}}.$$

Таким образом, в рассматриваемых условиях $M - M_0 \propto \mathfrak{H}^{1/2}$.

3. Определить зависимость намагниченности при $T = 0$ от внешнего поля в слабых полях.

Решение. Дифференцируя интеграл (71.11) с $\varepsilon(\mathbf{k})$ из (71.10) по $\mathfrak{H}$, получим

$$\frac{\partial M}{\partial \mathfrak{H}} = \frac{4\pi^2 \beta M_0^2 \sin^4 \theta}{[(\alpha M_0 k^2 + 4\pi M_0 \sin^2 \theta + \mathfrak{H})(\alpha M_0 k^2 + \mathfrak{H})]^{3/2}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}.$$

При $\mathfrak{H} \rightarrow 0$ интеграл по dk расходится логарифмически при малых k . Поэтому, ограничиваясь логарифмической точностью, можно положить в первом множителе в знаменателе $k = 0$, $\mathfrak{H} = 0$, а во втором $\mathfrak{H} = 0$, но при этом обрезать интеграл снизу при $k^2 \sim \mathfrak{H}/\alpha M_0$ и сверху — при $k^2 \sim 4\pi/\alpha$. В результате получим

$$\frac{\partial M}{\partial \mathfrak{H}} = \frac{\beta}{32\sqrt{\pi} M_0 \alpha^{3/2}} \ln \frac{4\pi M_0}{\mathfrak{H}}.$$

Напомним, что в (71.10) пренебрежено K . При $\mathfrak{H} \ll KM$ в логарифме $\mathfrak{H}$ заменяется на KM_0 .

4. В обменном приближении определить пространственную корреляционную функцию флуктуаций намагниченности на расстояниях $r \gg a$.

Решение. Операторы $\hat{m}_x$ и $\hat{m}_y$, удовлетворяющие правилу коммутации (70.6) и выраженные через операторы уничтожения и рождения магнонов, имеют вид (в шредингеровском представлении)

$$\hat{m}_x(\mathbf{r}) = (\beta M/V)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}),$$

$$\hat{m}_y(\mathbf{r}) = i(\beta M/V)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}).$$

С помощью этих операторов вычисляем корреляционную функцию

$$\varphi_{ik}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \langle \hat{m}_i(\mathbf{r}_1) \hat{m}_k(\mathbf{r}_2) + \hat{m}_k(\mathbf{r}_2) \hat{m}_i(\mathbf{r}_1) \rangle, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

(индексы i, k пробегает значения x, y). Учтя, что отличные от нуля диагональные матричные элементы имеют только произведения $\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = n_{\mathbf{k}}$, $\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \rangle = n_{\mathbf{k}} + 1$ (где $n_{\mathbf{k}}$ — числа заполнения состояний магнонов), находим

$$\varphi_{ik}(\mathbf{r}) = \delta_{ik} \int 2\beta M \left(n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}.$$

Подынтегральное выражение прямо дает фурье-компоненту корреляционной функции. Постоянный член в ней можно опустить: ему соответствует δ -функциональное слагаемое в $\varphi_{ik}(\mathbf{r})$, между тем, как все рассмотрение относится лишь к расстояниям $r \gg a$. Таким образом,

$$\varphi_{ik}(\mathbf{k}) = 2\beta M n_{\mathbf{k}} \delta_{ik} = 2\beta M [e^{\varepsilon(\mathbf{k})/T} - 1]^{-1} \delta_{ik}.$$

В классическом пределе, при $\varepsilon \ll T$, находим

$$\varphi_{ik}(\mathbf{k}) = \delta_{ik} T / \alpha k^2.$$

В кубическом ферромагнетике $\alpha = \text{const}$, и тогда

$$\varphi_{ik}(\mathbf{r}) = \delta_{ik} T / 4\pi \alpha r, \quad r \gg (\beta M \alpha / T)^{1/2}.$$

§ 72. Спиновый гамильтониан

Для получения закона дисперсии магнонов во всем интервале изменения квазиимпульса (а не только в длинноволновом пределе) необходимо, разумеется, использовать более детальные представления о микроскопической структуре ферромагнетика.

Рассмотрим диэлектрик, состоящий из атомов с равным нулю орбитальным моментом, но отличным от нуля спином S . Если не интересоваться высоко возбужденными состояниями, связанными с возбуждением электронных оболочек атомов, можно усреднить гамильтониан системы по орбитальным переменным электронов атомов в основном состоянии (и при закрепленных в узлах решетки атомных ядрах). В результате мы получим спиновый гамильтониан системы, содержащий лишь операторы полных спинов атомов¹⁾.

Если учитывать только обменное взаимодействие, зависящее лишь от относительных ориентаций спинов, то операторы векторов спинов атомов могут входить в гамильтониан лишь в виде скалярных комбинаций. Существенный методический интерес представляет исследование системы, описываемой простейшим гамильтонианом такого рода:

$$\hat{H}_{об} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m} \neq \mathbf{n}} J_{\mathbf{nm}} \hat{S}_{\mathbf{n}} \hat{S}_{\mathbf{m}}, \quad J_{\mathbf{nm}} = J(\mathbf{r}_{\mathbf{n}} - \mathbf{r}_{\mathbf{m}}), \quad (72.1)$$

где суммирование происходит по всем атомам; «векторные» (с целочисленными компонентами) индексы $\mathbf{m}$ и $\mathbf{n}$ нумеруют узлы решетки; $\mathbf{r}_{\mathbf{n}}$ — их радиус-векторы. Числа $J_{\mathbf{nm}}$ называют *обменными интегралами* (ср. III, § 62, задачи)²⁾. При независимом суммировании по $\mathbf{m}$ и $\mathbf{n}$ каждая пара атомов встречается в сумме (72.1) дважды, причем, конечно, $J_{\mathbf{nm}} = J_{\mathbf{mn}}$.

В (72.1) все магнитные атомы в решетке предполагаются одинаковыми (по одному в каждой элементарной ячейке). Основное же предположение, лежащее в основе такого гамильтониана, состоит в достаточной взаимной удаленности атомов в решетке. Обменный интеграл определяется «перекрытием» волновых функций двух атомов и очень быстро (экспоненциально) убывает с увеличением расстояния между ними. Для системы

¹⁾ Такая процедура аналогична тому, как строятся гамильтонианы отдельных атомов, описывающие тонкую структуру их уровней — ср. III, § 72.

²⁾ Описание обменного взаимодействия спиновым гамильтонианом было введено *Дираком* (P. A. M. Dirac, 1929). Гамильтониан (72.1) введен *ван Флекумом* (J. H. van Vleck, 1931); его обычно называют *гейзенберговским*, поскольку он соответствует модели ферромагнетика, впервые рассмотренной *Гейзенбергом*.

взаимно удаленных атомов можно поэтому считать взаимодействие парным, в связи с чем в (72.1) отсутствуют члены с произведениями операторов спина более чем двух атомов. С этой же точностью можно считать, что обменное взаимодействие между двумя атомами осуществляется каждый раз всего одной парой электронов — по одному из каждого атома. Тогда оператор взаимодействия будет составлен билинейно по операторам спинов электронов, а после усреднения по состояниям атомов — билинейно по атомным спинам (*C. Herring, 1966*)¹).

Система, описываемая гамильтонианом (72.1), ферромагнитна, если обменные интегралы $J_{mn} > 0$. Определим энергию основного состояния такой системы. Допустим при этом наличие также и внешнего магнитного поля $\mathfrak{H}$, добавив к (72.1) оператор

$$\hat{V} = -2\beta\mathfrak{H} \sum_{\mathbf{m}} \hat{S}_{\mathbf{m}z} \quad (72.2)$$

(ось z — в направлении поля). Оператор $\sum \hat{S}_{\mathbf{m}z}$ проекции полного спина системы коммутативен как с $\hat{H}_{\text{об}}$, так и с $\hat{V}$; состояния системы можно поэтому классифицировать по собственным значениям этой величины.

В ферромагнитном случае основному состоянию отвечает наибольшее возможное значение проекции суммарного спина, равное NS , где N — число атомов в системе (это не связано, конечно, с наличием внешнего поля, которое лишь выделяет избранное направление оси). Пусть χ_0 — нормированная спиновая волновая функция основного состояния.

Максимальное значение NS проекции полного спина может достигаться, лишь если и проекция спина каждого атома имеет свое максимальное значение S . Поэтому χ_0 есть в то же время и собственная функция каждого из операторов $\hat{S}_{\mathbf{n}z}$:

$$\hat{S}_{\mathbf{n}z}\chi_0 = S\chi_0. \quad (72.3)$$

Введем необходимые для дальнейшего операторы $\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$, удовлетворяющие правилам коммутации

$$\hat{S}_+\hat{S}_- - \hat{S}_-\hat{S}_+ = 2\hat{S}_z, \quad \hat{S}_z\hat{S}_{\pm} - \hat{S}_{\pm}\hat{S}_z = \pm\hat{S}_{\pm} \quad (72.4)$$

(см. III, (26.12)). Их матричные элементы:

$$\langle S_z | S_+ | S_z - 1 \rangle = \langle S_z - 1 | S_- | S_z \rangle = \sqrt{(S + S_z)(S - S_z + 1)} \quad (72.5)$$

¹) В таких условиях суммирование в (72.1) должно производиться, конечно, лишь по парам соседних атомов. Этим, однако, запись формул никак не упрощается, и потому мы не будем учитывать это условие явным образом.

(см. III, (27.12)); оператор $\hat{S}_+$ увеличивает, а $\hat{S}_-$ — уменьшает на единицу значение проекции S_z . Далее, пишем

$$\hat{S}_{\mathbf{m}}\hat{S}_{\mathbf{n}} = \hat{S}_{\mathbf{m}z}\hat{S}_{\mathbf{n}z} + \frac{1}{2}(\hat{S}_{\mathbf{m}+}\hat{S}_{\mathbf{n}-} + \hat{S}_{\mathbf{m}-}\hat{S}_{\mathbf{n}+})$$

и затем

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m} \neq \mathbf{n}} J_{\mathbf{mn}}(\hat{S}_{\mathbf{m}z}\hat{S}_{\mathbf{n}z} + \hat{S}_{\mathbf{m}-}\hat{S}_{\mathbf{n}+}) - 2\beta\mathfrak{H} \sum_{\mathbf{m}} \hat{S}_{\mathbf{m}z}, \quad (72.6)$$

где использована симметрия $J_{\mathbf{mn}} = J_{\mathbf{nm}}$ и коммутативность операторов, относящихся к разным атомам.

Поскольку операторы $\hat{S}_{\mathbf{n}+}$ имеют матричные элементы лишь для переходов с увеличением чисел S_z , то для состояния с наибольшими значениями этих чисел

$$\hat{S}_{\mathbf{n}+}\chi_0 = 0 \quad (72.7)$$

(что видно также и из явных выражений матричных элементов (72.5)). Поэтому при воздействии гамильтониана (72.6) на волновую функцию χ_0 получается

$$\hat{H}\chi_0 = \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m} \neq \mathbf{n}} J_{\mathbf{mn}} S^2 - 2\beta\mathfrak{H} N S \right\} \chi_0.$$

Выражение в скобках и есть энергия E_0 основного состояния. Заменив суммирование по $\mathbf{m}$ и $\mathbf{n}$ суммированием по $\mathbf{m}$ и по $\mathbf{q} = \mathbf{n} - \mathbf{m}$, запишем окончательно E_0 в виде

$$E_0 = -\frac{1}{2} N S^2 \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}} - 2\beta S N \mathfrak{H}. \quad (72.8)$$

Полный магнитный момент системы в этом состоянии есть $2\beta S N$.

Следующее, в порядке уменьшения проекции полного спина, состояние системы отвечает значению $N S - 1$ указанной проекции; оно соответствует возбуждению одного магнона с магнитным моментом -2β . Таким значением проекции полного спина обладает состояние с волновой функцией

$$(2S)^{-1/2} \hat{S}_{\mathbf{n}-}\chi_0, \quad (72.9)$$

в котором воздействием оператора $\hat{S}_{\mathbf{n}-}$ уменьшена на 1 проекция спина одного из атомов¹⁾. Эта функция, однако, не является

¹⁾ Нормировку функции (72.9) легко проверить, заметив, что

$$\begin{aligned} (\hat{S}_{\mathbf{n}-}\chi_0)^*(\hat{S}_{\mathbf{n}-}\chi_0) &= \chi_0^* \hat{S}_{\mathbf{n}-}^+ \hat{S}_{\mathbf{n}-} \chi_0 \equiv \langle S | S_{\mathbf{n}+} S_{\mathbf{n}-} | S \rangle = \\ &= \langle S | S_{\mathbf{n}+} | S - 1 \rangle \langle S - 1 | S_{\mathbf{n}-} | S \rangle = 2S. \end{aligned}$$

собственной функцией гамильтониана системы; в ней не учтена еще трансляционная симметрия решетки. Собственная функция гамильтониана должна быть построена как линейная комбинация функций (72.9) со всеми номерами $\mathbf{n}$. Те же рассуждения, которые привели нас в § 55 к функциям Блоха для электрона в периодическом поле, показывают, что для правильного учета трансляционной симметрии эта линейная комбинация должна иметь вид

$$\chi_{\mathbf{k}} = (2NS)^{-1/2} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{\mathbf{n}}} \hat{S}_{\mathbf{n}-} \chi_0 \quad (72.10)$$

(множитель $N^{-1/2}$ — нормировочный). Постоянный вектор $\mathbf{k}$ есть не что иное, как квазиимпульс магнона.

Энергия $\varepsilon(\mathbf{k})$ магнона есть разность $E_{\mathbf{k}} - E_0$ между энергиями возбужденного и основного состояний системы. Поэтому

$$(\hat{H} - E_0)\chi_{\mathbf{k}} = \varepsilon(\mathbf{k})\chi_{\mathbf{k}}.$$

Подставив в левую сторону этого равенства выражение (72.10) и заменив затем $E_0\chi_0$ на $\hat{H}\chi_0$, получим

$$\varepsilon(\mathbf{k})\chi_{\mathbf{k}} = (2NS)^{-1/2} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{\mathbf{n}}} (\hat{H}\hat{S}_{\mathbf{n}-} - \hat{S}_{\mathbf{n}-}\hat{H})\chi_0. \quad (72.11)$$

Стоящий здесь коммутатор легко вычислить, записав $\hat{H}$ в виде (72.6) и используя правила коммутации (72.4). Снова учтя симметрию коэффициентов $J_{\mathbf{mn}}$, найдем

$$\hat{H}\hat{S}_{\mathbf{n}-} - \hat{S}_{\mathbf{n}-}\hat{H} = \sum_{\mathbf{m}}' J_{\mathbf{mn}} (\hat{S}_{\mathbf{m}z}\hat{S}_{\mathbf{n}-} - \hat{S}_{\mathbf{n}z}\hat{S}_{\mathbf{m}-}) + 2\beta\mathfrak{H}\hat{S}_{\mathbf{n}-}. \quad (72.12)$$

Наконец, подставив это выражение в (72.11), вспомнив (72.3) и перейдя к суммированию по $\mathbf{q} = \mathbf{n} - \mathbf{m}$, получим

$$\varepsilon(\mathbf{k})\chi_{\mathbf{k}} = \left\{ S \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}} (1 - e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{\mathbf{q}}}) + 2\beta\mathfrak{H} \right\} \chi_{\mathbf{k}}.$$

Выражение в фигурных скобках есть искомая энергия магнона. Мнимая часть выражения под знаком суммы, будучи нечетной функцией $\mathbf{r}_{\mathbf{q}}$, обращается в нуль в результате суммирования, так что окончательно

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = S \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}} (1 - \cos \mathbf{k}\mathbf{r}_{\mathbf{q}}) + 2\beta\mathfrak{H} \quad (72.13)$$

(F. Bloch, 1930).

Эта формула дает точный закон дисперсии магнонов в системе, описываемой гамильтонианом (72.1). В предельном случае малых $\mathbf{k}$ она переходит, естественно, в квадратичный закон:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} S k_i k_k \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}} x_{\mathbf{q}i} x_{\mathbf{q}k} + 2\beta \mathfrak{H}. \quad (72.14)$$

Точка Кюри рассматриваемой системы лежит при температуре $T_c \sim J$, так что при температурах $T \gg J$ система уже заведомо парамагнитна. При таких температурах можно, в первом приближении, вовсе пренебречь взаимодействием между атомами. В этом приближении магнитная восприимчивость системы будет совпадать с восприимчивостью идеального газа атомов со спином S и даваться формулой

$$\chi = \frac{N}{V} \frac{4\beta^2 S(S+1)}{3T} \quad (72.15)$$

(см. V, § 52); восприимчивость отнесена к единице объема. Это выражение является первым членом разложения функции $\chi(T)$ по степеням $1/T$. Следующие члены разложения уже зависят от взаимодействия атомов; определим первый из них.

Восприимчивость (в нулевом поле) определяется как производная $\chi = \partial M / \partial \mathfrak{H}$ при $\mathfrak{H} \rightarrow 0$, а намагниченность M вычисляется как производная от свободной энергии: $VM = -\partial F / \partial \mathfrak{H}$. Для решения поставленной задачи надо вычислить F с точностью до членов $\sim 1/T^2$.

Исходим из формулы $F = -T \ln Z$, где Z — статистическая сумма

$$Z = \sum_{\mathbf{n}} e^{-E_{\mathbf{n}}/T} \approx \sum_{\mathbf{n}} \left(1 - \frac{E_{\mathbf{n}}}{T} + \frac{E_{\mathbf{n}}^2}{2T^2} - \frac{E_{\mathbf{n}}^3}{6T^3} \right);$$

суммирование производится по всем уровням энергии системы¹⁾. Полное число уровней в спектре рассматриваемой системы конечно и равно числу всех возможных комбинаций ориентаций атомных спинов относительно решетки. Каждый спин имеет $2S+1$ различных ориентаций; поэтому указанное число есть $(2S+1)^N$. Обозначая чертой над буквой простое арифметическое усреднение, перепишем Z в виде

$$Z = (2S+1)^N \left[1 - \frac{1}{T} \overline{E} + \frac{1}{2T^2} \overline{E^2} - \frac{1}{6T^3} \overline{E^3} \right].$$

¹⁾ Последующее вычисление свободной энергии соответствует вычислению в V, § 73, продлевая их до следующего члена разложения.

Среднее значение $\overline{E^m} = \text{Sp } \hat{H}^m / (2S + 1)^N$. По известному свойству следа оператора он может вычисляться по любой полной системе волновых функций; пусть это будут функции, отвечающие всем возможным наборам ориентаций атомных спинов. Тогда усреднение сводится к независимому усреднению каждого из спинов по его направлениям; при этом $\overline{E} = 0$. Логарифмируя теперь Z и снова разлагая по степеням $1/T$, с той же точностью получим

$$F = -NT \ln(2S + 1) - \frac{1}{2T} \overline{E^2} + \frac{1}{6T^2} \overline{E^3}. \quad (72.16)$$

В этом выражении нас интересуют члены, содержащие $\mathfrak{H}^2$; только эти члены дадут вклад в восприимчивость. Опустив все остальные члены и заметив, что при усреднении нечетные степени компонент спина обращаются в нуль, получим

$$F = -\frac{(2\beta\mathfrak{H})^2}{2T} \sum_{\mathbf{n}} \overline{S_{\mathbf{n}z}^2} - \frac{(2\beta\mathfrak{H})^2}{2T^2} \cdot \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{m}} 2J_{\mathbf{mn}} \overline{(S_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}z})} \overline{(S_{\mathbf{m}} S_{\mathbf{m}z})}.$$

Средние значения

$$\overline{(S_{\mathbf{n}z} S_{\mathbf{n}x})} = \overline{(S_{\mathbf{n}z} S_{\mathbf{n}y})} = 0, \quad \overline{(S_{\mathbf{n}z}^2)} = S(S + 1)/3.$$

Таким образом,

$$F = -\frac{2}{3T} \beta^2 \mathfrak{H}^2 N S(S + 1) - \frac{2}{9T^2} \beta^2 \mathfrak{H}^2 N S^2 (S + 1)^2 \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}},$$

и отсюда окончательно восприимчивость

$$\chi = \frac{4\beta^2 S(S + 1)N}{3TV} \left[1 + \frac{S(S + 1)}{3T} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}} \right]. \quad (72.17)$$

Обратим внимание на то, что знак поправочного члена в квадратных скобках зависит от знака обменного интеграла.

Задачи

1. Найти магнитную часть теплоемкости системы, описываемой гамильтонианом (72.1), при температурах $T \gg J$.

Решение. Первый член разложения теплоемкости по степеням $1/T$ возникает от члена $-\overline{E^2}/2T$ в свободной энергии (72.16). Усредняя тем же способом квадрат гамильтониана (72.1), получим

$$\overline{E^2} = \frac{1}{4} \cdot 2 \sum_{\mathbf{m} \neq \mathbf{n}} J_{\mathbf{mn}}^2 \overline{S_{\mathbf{m}i} S_{\mathbf{m}k}} \overline{S_{\mathbf{n}i} S_{\mathbf{n}k}} = 3 \frac{S^2 (S + 1)^2 N}{9} \frac{N}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}}^2$$

(так как $\overline{S_i S_k} = S(S+1) \delta_{ik}/3$). Для теплоемкости находим в результате

$$C_{\text{маг}} = \frac{NS^2(S+1)^2}{6T^2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}}^2$$

в соответствии с V, (73.4).

2. Пренебрегая взаимодействием между спинами, вычислить намагниченность парамагнетика при произвольном соотношении между $\beta\mathfrak{H}$ и T .

Решение. Статистическая сумма (для одного спина в поле)

$$Z = \sum_{S_z = -S}^S \exp\left(-\frac{2\beta\mathfrak{H}}{T} S_z\right) = \frac{\text{sh}[2\beta\mathfrak{H}(S+1/2)/T]}{\text{sh}(\beta\mathfrak{H}/T)}.$$

Вычисляя свободную энергию и дифференцируя ее по $\mathfrak{H}$, находим намагниченность

$$M = \frac{N}{V} T \frac{\partial}{\partial \mathfrak{H}} \ln Z = \frac{2\beta N}{V} \left\{ \left(S + \frac{1}{2}\right) \text{cth} \frac{2\beta\mathfrak{H}(S+1/2)}{T} - \frac{1}{2} \text{cth} \frac{\beta\mathfrak{H}}{T} \right\}$$

(*L. Brillouin*, 1927). При $\beta\mathfrak{H} \ll T$ это выражение переходит в (72.15). В обратном пределе, при $\beta\mathfrak{H} \gg T$, намагниченность стремится к своему номинальному значению по закону

$$M = \frac{2\beta NS'}{V} \left\{ S - \exp\left(-\frac{4\beta\mathfrak{H}}{T}\right) \right\}.$$

§ 73. Взаимодействие магнонов

Существенный методический интерес представляет вопрос о вкладе в магнитную часть термодинамических величин ферромагнетика, происходящем от взаимодействия магнонов; напомним, что вычисления в § 71 были основаны на представлении об идеальном газе невзаимодействующих магнонов. Рассмотрим этот вопрос для системы, описываемой обменным спиновым гамильтонианом (72.1).

Имея в виду нахождение вклада только наиболее низкого порядка по малому отношению T/T_c , мы можем ограничиться лишь парным взаимодействием магнонов. Это значит, что надо рассмотреть двухмагнонные состояния системы, в которых проекция полного спина равна $NS - 2$.

Такой проекции отвечают волновые функции

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{n}\mathbf{n}} &= [4S(2S-1)]^{-1/2} \hat{S}_{\mathbf{n}-} \hat{S}_{\mathbf{n}-} \chi_0, \\ \chi_{\mathbf{m}\mathbf{n}} &= (2S)^{-1} \hat{S}_{\mathbf{m}-} \hat{S}_{\mathbf{n}-} \chi_0, \quad \mathbf{m} \neq \mathbf{n}; \end{aligned} \quad (73.1)$$

поскольку операторы спина различных атомов коммутативны, то $\chi_{mn} = \chi_{nm}$ ¹⁾. Функции (73.1) нормированы условием $\chi_{mn}^* \chi_{mn} = 1$, в чем легко убедиться, раскрывая произведение таким же образом, как это было сделано для проверки нормировки в (72.9). Тем же способом можно убедиться и во взаимной ортогональности различных функций χ_{mn} .

Функции (73.1) не являются сами по себе собственными функциями гамильтониана. Волновые же функции двухмагнонных стационарных состояний системы должны представлять собой определенные линейные комбинации функций χ_{mn} , которые запишем в виде

$$\chi = \sum_{m \neq n} \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{mn} \chi_{mn} + \sum_n \psi_{nn} \chi_{nn} \quad (73.2)$$

(поскольку χ_{mn} и χ_{nm} — одно и то же, то надо полагать и $\psi_{mn} \equiv \psi_{nm}$). Совокупность коэффициентов ψ_{mn} составляет волновую функцию в представлении, в котором независимыми переменными являются номера атомов в решетке. Множитель $1/\sqrt{2}$ в первой сумме в (73.2) введен для того, чтобы квадрат модуля $|\chi|^2$ был равен сумме $\sum |\psi_{mn}|^2$, в которой каждая из различных ψ_{mn} встречалась бы лишь один раз.

Тем же способом, которым было найдено уравнение (72.11) для волновых функций одномагнонных стационарных состояний, найдем, что функции (73.2) должны удовлетворять аналогичному уравнению

$$\begin{aligned} \mathcal{E} \chi = \sum_{m \neq n} \frac{\psi_{mn}}{2^{3/2} S} \{ \hat{H}, \hat{S}_m - \hat{S}_n \} \chi_0 + \\ + \sum_n \frac{\psi_{nn}}{2[S(2S-1)]^{1/2}} \{ \hat{H}, \hat{S}_n - \hat{S}_n \} \chi_0, \end{aligned} \quad (73.3)$$

где теперь $\mathcal{E} = E - E_0$ — энергия двух взаимодействующих друг с другом магнонов (а скобки $\{ \dots \}$ означают коммутатор).

Раскроем коммутаторы в правой стороне уравнения (73.3). Для этого замечаем, что

$$\{ \hat{H}, \hat{S}_m - \hat{S}_n \} \equiv \{ \hat{H}, \hat{S}_m \} \hat{S}_n - \hat{S}_m \{ \hat{H}, \hat{S}_n \},$$

и используем выражения (72.12) для коммутаторов $\{ \hat{H}, \hat{S}_n \}$. После этого с учетом правил коммутации (72.4) переставляем

¹⁾ Если спин $S = 1/2$, то двукратное применение одного и того же оператора $\hat{S}_n$ к функции основного состояния χ_0 обращает ее в нуль. В этом случае, следовательно, все «диагональные» функции $\chi_{nn} \equiv 0$.

операторы $\hat{S}_z$ в крайнее правое положение, где они, воздействуя на функцию χ_0 , умножают ее на S . В результате получим

$$\begin{aligned} \{\hat{H}, \hat{S}_{\mathbf{m}-}\hat{S}_{\mathbf{n}-}\} \chi_0 = S \sum_{\mathbf{l}} [J_{\mathbf{ml}}(\hat{S}_{\mathbf{m}-} - \hat{S}_{\mathbf{l}-})\hat{S}_{\mathbf{n}-} + \\ + J_{\mathbf{nl}}(\hat{S}_{\mathbf{n}-} - \hat{S}_{\mathbf{l}-})\hat{S}_{\mathbf{m}-}] \chi_0 + \delta_{\mathbf{mn}} \sum_{\mathbf{l}} J_{\mathbf{nl}}\hat{S}_{\mathbf{n}-}\hat{S}_{\mathbf{l}-}\chi_0 - J_{\mathbf{mn}}\hat{S}_{\mathbf{m}-}\hat{S}_{\mathbf{n}-}\chi_0 + \\ + 4\beta\mathfrak{H}\hat{S}_{\mathbf{m}-}\hat{S}_{\mathbf{n}-}\chi_0; \quad (73.4) \end{aligned}$$

для упрощения записи формулы ограничения, налагаемые на индексы суммирования, не выписываются — суммирования производятся по всем значениям $\mathbf{l}$, но при этом подразумевается, что все «диагональные» $J_{\mathbf{ll}} = 0$.

Дальнейшая процедура сводится к подстановке (73.4) в уравнение (73.3) и приравниванию коэффициентов, стоящих при одинаковых функциях $\chi_{\mathbf{mn}}$ в обеих сторонах равенства. Вычисления элементарны, хотя и довольно громоздки. Они приводят в результате к следующей системе уравнений для величин $\psi_{\mathbf{mn}}$:

$$\begin{aligned} (2JS - \mathcal{E})\psi_{\mathbf{mn}} = S \sum_{\mathbf{l}} (J_{\mathbf{lm}}\psi_{\mathbf{ln}} + J_{\mathbf{ln}}\psi_{\mathbf{lm}}) + J_{\mathbf{mn}}\psi_{\mathbf{mn}} - \\ - A_S \left[J_{\mathbf{mn}}(\psi_{\mathbf{mm}} + \psi_{\mathbf{nn}}) + 2\delta_{\mathbf{mn}} \sum_{\mathbf{l}} J_{\mathbf{lm}}\psi_{\mathbf{lm}} \right], \quad (73.5) \end{aligned}$$

где

$$A_S = S \left[1 - \left(\frac{2S-1}{2S} \right)^{1/2} \right]$$

и введено обозначение J для суммы $\sum_{\mathbf{l}} J_{\mathbf{nl}}$, не зависящей, очевидно, от индекса $\mathbf{n}$ ¹⁾.

Перейдем в этом уравнении от координатного представления (независимые переменные — координаты атомов $\mathbf{r}_{\mathbf{n}}$, $\mathbf{r}_{\mathbf{m}}$) к импульсному, т. е. положим

$$\psi_{\mathbf{mn}} = \frac{1}{N} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{r}_{\mathbf{m}}+\mathbf{r}_{\mathbf{n}})/2} \sum_{\mathbf{k}} \psi(\mathbf{K}, \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_{\mathbf{m}}-\mathbf{r}_{\mathbf{n}})}. \quad (73.6)$$

Вектор $\mathbf{K}$ играет роль суммарного квазиимпульса двух магнов, а $\mathbf{k}$ — квазиимпульса их относительного движения; суммирование производится по N дискретным значениям $\mathbf{k}$, допускаемым для решетки объема Nv (N — число атомов в решетке,

¹⁾ Эти уравнения справедливы и в случае спина $S=1/2$, когда все $\psi_{\mathbf{nn}}$ произвольны. Обратим внимание на то, что при $S=1/2$ все «диагональные» величины $\psi_{\mathbf{nn}}$ вообще выпадают из уравнений с $\mathbf{m} \neq \mathbf{n}$. Уравнения же с $\mathbf{m} = \mathbf{n}$ в этом случае надо просто считать отсутствующими.

v — объем ее элементарной ячейки). Вместе с $\psi_{\mathbf{mn}}$ надо представить в виде ряда Фурье также и обменные интегралы:

$$J_{\mathbf{mn}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n)} J(\mathbf{k}), \quad J(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{n}} J_{0\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n)} \quad (73.7)$$

(поскольку $J_{\mathbf{mn}} = J_{\mathbf{nm}}$, то $J(\mathbf{k}) = J(-\mathbf{k})$).

Опустив простые промежуточные выкладки, приведем сразу окончательный результат преобразования уравнения (73.5):

$$\left[\varepsilon\left(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}\right) + \varepsilon\left(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}\right) - \mathcal{E} \right] \psi(\mathbf{K}, \mathbf{k}) + \int U(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') \psi(\mathbf{K}, \mathbf{k}') \frac{V d^3 k'}{(2\pi)^3} = 0, \quad (73.8)$$

где

$$NU(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = A_S \left[J\left(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}\right) + J\left(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}\right) + J\left(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}'\right) + J\left(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}'\right) \right] - \frac{1}{2} [J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + J(\mathbf{k} + \mathbf{k}')], \quad (73.9)$$

а $\varepsilon(\mathbf{k})$ — энергия одного магнона, определяемая формулой (72.13); суммирование по $\mathbf{k}'$ заменено интегрированием по одной ячейке обратной решетки.

Таким образом, точная (в рамках гамильтониана (72.1)) задача о двухмагнонных состояниях системы сводится к решению уравнения, вполне аналогичного уравнению Шредингера для системы двух частиц в импульсном представлении (ср. III, (130.4)). При этом функции $\varepsilon(\mathbf{k})$ играют роль кинетических энергий частиц, а ядро интегрального уравнения $U(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$ — роль матричного элемента энергии U их взаимодействия для перехода (рассеяния) из состояний с импульсами $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ в состояния с импульсами $\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2$ где

$$\mathbf{k}_1 = \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}, \quad \mathbf{k}_2 = \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}, \quad \mathbf{k}'_1 = \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}', \quad \mathbf{k}'_2 = \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}'.$$

В этом смысле $U(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$ целесообразно записать в виде

$$NU(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = A_S [J(\mathbf{k}_1) + J(\mathbf{k}_2) + J(\mathbf{k}'_1) + J(\mathbf{k}'_2)] - \frac{1}{2} [J(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1) + J(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_2)]. \quad (73.10)$$

В общем случае уравнение (73.8), (73.9) очень сложно. Мы ограничимся вычислением поправки к термодинамическим величинам в предположении $S \gg 1$. Простота этого случая связана

с тем, что энергия магнонов $\varepsilon(\mathbf{k})$ пропорциональна S , а их взаимодействие U не зависит от S (при $S \gg 1$ коэффициент в (73.9) $A_S \approx 1/4$). Поэтому U можно рассматривать как малое возмущение. Тогда поправка $\Omega_{\text{вз}}$ (от взаимодействия магнонов) к термодинамическому потенциалу Ω будет даваться просто средним значением U . Взяв «диагональный матричный элемент»

$$U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{2N} [J(\mathbf{k}_1) + J(\mathbf{k}_2) - J(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - J(0)], \quad (73.11)$$

мы тем самым усредняем по состоянию с заданными квазиимпульсами магнонов. После этого статистическое усреднение по равновесному распределению магнонов осуществляется интегрированием

$$\Omega_{\text{вз}} = \int n(\mathbf{k}_1) n(\mathbf{k}_2) U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \frac{V^2 d^3 \mathbf{k}_1 d^3 \mathbf{k}_2}{(2\pi)^6}, \quad (73.12)$$

где $n(\mathbf{k}) = [\exp(\varepsilon(\mathbf{k})/T) - 1]^{-1}$ — функция распределения Бозе.

При низких температурах интеграл определяется областью малых значений $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$, соответственно чему следует разложить все $\varepsilon(\mathbf{k})$ и $J(\mathbf{k})$ по степеням $\mathbf{k}$. Тогда $\varepsilon(\mathbf{k})$ дается квадратичным выражением (72.14). Поскольку $J(\mathbf{k})$ — четная функция $\mathbf{k}$, то квадратичны также и первые члены ее разложения:

$$J(\mathbf{k}) \approx J(0) + a_{ik} k_i k_k.$$

Тогда

$$U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{N} a_{ik} k_{1i} k_{2k}.$$

Но при подстановке этого выражения, нечетного по $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$, в (73.12) интеграл обращается в нуль в результате усреднения по направлениям $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$.

Поэтому в разложении $J(\mathbf{k})$ надо учесть члены четвертого порядка, в результате чего в интеграле (73.12) функция $U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ оказывается формой четвертой степени, причем отличный от нуля вклад в интеграл дают члены этой формы, квадратичные по $\mathbf{k}_1$ и по $\mathbf{k}_2$. Ввиду быстрой сходимости интегрирование может быть распределено по всему $\mathbf{k}$ -пространству. Заменой переменных $\mathbf{k} = \bar{\mathbf{k}} \sqrt{T}$ убеждаемся, что зависимость $\Omega_{\text{вз}}$ от T и $\mathfrak{H}$ имеет вид

$$\Omega_{\text{вз}} = VT^5 f(\mathfrak{H}/T), \quad (73.13)$$

причем $f(0)$ и $f'(0)$ конечны. Отсюда следует, что поправочный

член в намагнитченности

$$M_{\text{вз}} = -\frac{1}{V} \frac{\partial \Omega_{\text{вз}}}{\partial \mathfrak{H}} \bigg|_{\mathfrak{H}=0} = \text{const} \cdot T^4. \quad (73.14)$$

Такому же закону следует поправочный член в теплоемкости¹⁾.

Мы видим, что взаимодействие магнонов приводит к поправкам в термодинамических величинах лишь в высоком приближении по T/T_c . Напомним, что основные члены в намагнитченности и в магнитной части теплоемкости следуют закону $T^{3/2}$. Между этими членами и поправками от $\Omega_{\text{вз}}$ существуют еще члены, пропорциональные $T^{5/2}$ и $T^{7/2}$, происходящие от следующих членов разложения энергии магнонов $\varepsilon(\mathbf{k})$ по степеням $\mathbf{k}^2$.

С помощью полученных уравнений можно рассмотреть также вопрос о связанных состояниях двух магнонов. Эти состояния проявляются как дискретные (при заданном $\mathbf{K}$) собственные значения уравнения (73.8). Как функции переменной $\mathbf{K}$, эти собственные значения $\mathcal{E}(\mathbf{K})$ представляют собой новые ветви элементарных возбуждений в системе. Исследование показывает, однако, что эти состояния существуют только при достаточно больших значениях $\mathbf{K}$; поэтому они во всяком случае не влияют на термодинамические величины ферромагнетика при низких температурах²⁾.

Задача

В предположении $S \gg 1$ найти поправочные члены от взаимодействия магнонов в намагнитченности и теплоемкости для кубической решетки, в которой обменные интегралы отличны от нуля только для соседних (вдоль кубических осей) пар атомов.

Решение. Каждый атом имеет шесть ближайших соседних атомов. По определению (73.7), находим

$$J(\mathbf{k}) = 2J_0(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a),$$

где J_0 — обменный интеграл для пары соседних атомов, а a — длина ребра кубической ячейки. При малых $\mathbf{k}$

$$J(\mathbf{k}) \approx J_0 \left[2 - a^2 k^2 + \frac{a^4}{12} (k_x^4 + k_y^4 + k_z^4) \right].$$

¹⁾ Эти результаты (в общем случае произвольного спина) были впервые получены Дайсоном (*F. Dyson*, 1956). В изложенном выводе уравнения (73.5) мы следовали в основном Бойду и Каллавею (*R. J. Boyd, J. Callaway*, 1965).

²⁾ См. *M. Wortis* // *Phys. Rev.* 1963. V. 132. P. 85. Речь идет о трехмерной решетке. В двух- и одномерном случаях связанные состояния магнонов существуют при всех значениях $\mathbf{k}$.

Отсюда

$$U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -\frac{a^7 J_0}{4V} (k_{1x}^2 k_{2x}^2 + k_{1y}^2 k_{2y}^2 + k_{1z}^2 k_{2z}^2)$$

(опущены члены, нечетные по $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$). Энергия магнона (согласно (72.14))

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = S J_0 a^2 k^2 + 2\beta\mathfrak{H}.$$

Вычисление интеграла (73.12) приводит к следующим результатам:

$$\frac{M_{\text{вз}}}{M} = -\frac{3\pi\zeta(3/2)\zeta(5/2)}{2S^2} \left(\frac{T}{4\pi S J_0} \right)^4, \quad C_{\text{вз}} = \frac{15\pi\zeta^2(5/2)N}{S} \left(\frac{T}{4\pi S J_0} \right)^4$$

(ζ — дзета-функция).

§ 74. Магноны в антиферромагнетике

Антиферромагнетики характерны тем, что магнитные моменты всех электронов в пределах каждой элементарной ячейки кристаллической решетки взаимно компенсируются (в состоянии равновесия в отсутствие магнитного поля). Плотность магнитного момента распределена, строго говоря, по всему объему ячейки. Но в кристаллах антиферромагнитных диэлектриков с хорошей точностью можно считать, что фактически эта плотность локализована у отдельных атомов, каждому из которых можно приписать определенный магнитный момент. Эти моменты, повторяясь периодически во всех ячейках, создают *магнитные подрешетки* антиферромагнетика.

Различные антиферромагнетики очень разнообразны по своей структуре. Вопрос об их магнитном энергетическом спектре мы рассмотрим на типичном примере кристалла с двумя магнитными атомами, расположенными в эквивалентных точках каждой элементарной ячейки (т. е. в точках, переходящих друг в друга при каких-либо преобразованиях кристаллографической симметрии кристалла). Средние плотности магнитных моментов, образованных этими атомами подрешеток, обозначим через $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ и введем два вектора

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2, \quad \mathbf{L} = \mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2. \quad (74.1)$$

В основном состоянии антиферромагнетика $\mathbf{M} = 0$, $\mathbf{L} \neq 0$, между тем как у ферромагнетика было бы $\mathbf{M} \neq 0$, $\mathbf{L} = 0$. Подчеркнем существенную разницу между основными состояниями в обоих случаях. В обменном приближении, в основном состоянии ферромагнетика проекции спинов всех магнитных атомов имеют определенные (наибольшие возможные) значения $S_z = S$, чему соответствует номинальное значение намагниченности $\mathbf{M}$. В основном же состоянии антиферромагнетика намагниченности

подрешеток заведомо не могут иметь своих номинальных значений, так как суммарные проекции спинов каждой из подрешеток в отдельности не являются (даже в обменном приближении) сохраняющимися величинами и потому не имеют (в стационарном состоянии) определенных значений. Тем более не имеют определенных значений проекции спина отдельных атомов.

Вид макроскопических «уравнений движения» векторов $\mathbf{L}$ и $\mathbf{M}$, описывающих их длинноволновые колебания, устанавливается аналогично тому, как это было сделано в § 69 для ферромагнетика. Уравнение для плотности магнитного момента $\mathbf{M}$ имеет тот же вид (69.1) что и в ферромагнитном случае:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = \gamma \mathbf{K}, \quad (74.2)$$

причем момент сил $\mathbf{K}$ определяется формулой (69.2).

Уравнение же для $\mathbf{L}$ можно получить, если учесть, что наличие углового механического момента $\hbar \mathbf{S} = \mathbf{M}/\gamma$ означает, вообще говоря, вращение системы, в данном случае — системы спинов. Угловая скорость этого вращения согласно термодинамической формуле V, (26.8) определяется производной свободной энергии по этому моменту:

$$\boldsymbol{\Omega} = \left(\frac{\partial \tilde{F}}{\partial \hbar \mathbf{S}} \right)_T.$$

Эту формулу можно очевидным образом обобщить на случай слабой неоднородности в пространстве:

$$\delta \tilde{F} = \int \boldsymbol{\Omega} \delta \hbar \mathbf{S} dV = \frac{1}{\gamma} \int \boldsymbol{\Omega} \delta \mathbf{M} dV. \quad (74.3)$$

Изменение $\mathbf{L}$ со временем представляет собой вращение с угловой скоростью $\boldsymbol{\Omega}$, которое описывается уравнением:

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial t} = [\boldsymbol{\Omega} \mathbf{L}]. \quad (74.4)$$

Перейдем к определению момента сил $\mathbf{K}$. При повороте системы на бесконечно-малый угол $\delta \phi$ меняются оба вектора $\mathbf{L}$ и $\mathbf{M}$:

$$\delta \mathbf{L} = [\delta \phi \mathbf{L}], \quad \delta \mathbf{M} = [\delta \phi \mathbf{M}].$$

Варьируя свободную энергию $\tilde{F}$ и сравнивая с формулой (69.2), определяющей $\mathbf{K}$, находим:

$$\mathbf{K} = [\mathbf{L} \mathbf{H}_{\mathbf{L}}] - \frac{1}{\gamma} [\mathbf{M} \boldsymbol{\Omega}], \quad (74.5)$$

где мы ввели эффективное поле $\mathbf{H}_L$, соответствующее антиферромагнитному вектору $\mathbf{L}$, согласно

$$\delta \tilde{F} = - \int \mathbf{H}_L \delta \mathbf{L} dV, \quad (74.6)$$

и использовали формулу (74.3) для варьирования по $\mathbf{M}$.

Окончательно уравнение для $\mathbf{M}$ принимает вид

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = \gamma [\mathbf{L} \mathbf{H}_L] + [\Omega \mathbf{M}]. \quad (74.7)$$

Отметим некоторые общие свойства уравнений (74.4) и (74.7). Нетрудно проверить, что движение, описываемое этими уравнениями, является бездиссипативным. Действительно, диссипация энергии равна

$$T \frac{\partial S}{\partial t} = \left(\frac{\partial \tilde{F}}{\partial t} \right)_T = - \int \mathbf{H}_L \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial t} dV + \frac{1}{\gamma} \int \Omega \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} dV$$

и в силу (74.4) и (74.7) обращается в нуль. Далее, из уравнения (74.4) очевидно следует, что $\partial \mathbf{L}^2 / \partial t = 0$. Как и должно быть, длина вектора $\mathbf{L}$ остается постоянной. Наконец, умножая (74.4) на $\mathbf{M}$, а (74.7) на $\mathbf{L}$ и складывая, находим, что $\partial \mathbf{L} \mathbf{M} / \partial t = 0$, так что вектор $\mathbf{M}$ перпендикулярен $\mathbf{L}$.

Для определения эффективного поля $\mathbf{H}_L$ и угловой скорости Ω надо установить вид свободной энергии кристалла. В обменном приближении свободная энергия должна быть инвариантна относительно одновременного поворота всех магнитных моментов (и следовательно векторов $\mathbf{L}$ и $\mathbf{M}$) относительно кристаллической решетки. Вместе с предположенной кристаллографической эквивалентностью положений двух магнитных атомов в ячейке отсюда следует также и необходимость инвариантности относительно перестановки $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$, т. е. относительно преобразования $\mathbf{L} \rightarrow -\mathbf{L}$, $\mathbf{M} \rightarrow \mathbf{M}$. Ввиду инвариантности свободной энергии при этом преобразовании также и $\mathbf{H}_L \rightarrow -\mathbf{H}_L$, $\Omega \rightarrow \Omega$.

Существенно, что в рассматриваемом нами длинноволновом пределе магнитный момент $\mathbf{M}$ является малой величиной. Это ясно уже из того, что если вектор $\mathbf{L}$ постоянен в пространстве, в обменном случае никакого магнитного момента, естественно, не возникает. В результате мы должны учесть члены не выше второго порядка по $\mathbf{M}$ и по первым производным $\mathbf{L}$. Выражение, удовлетворяющее поставленным условиям, имеет вид

$$F_{об} = \int \left(\frac{a \mathbf{M}^2}{2} + \frac{1}{2} \alpha_{ik} \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial x_k} \right) dV, \quad (74.8)$$

где коэффициент a положителен в соответствии с тем, что в

равновесии должно быть $\mathbf{M} = 0$. В (74.8) опущены члены, которые можно свести к написанным интегрированием по частям. Члены, квадратичные по $\partial \mathbf{M} / \partial x_i$, можно не учитывать, поскольку они заведомо малы по сравнению с $\mathbf{M}^2$.

Варьируя интеграл (74.8) (и произведя в нем интегрирование по частям), получим

$$\mathbf{H}_L = \frac{1}{2} \alpha_{ik} \frac{\partial^2 \mathbf{L}}{\partial x_i \partial x_k}, \quad \Omega = \gamma a \mathbf{M}. \quad (74.9)$$

В заключение отметим, что уравнение (74.7) для магнитного момента можно переписать в виде уравнения непрерывности (69.11). Тензор потока момента имеет теперь вид

$$\Pi_{il} = \gamma \alpha_{lk} \left[\mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial x_k} \right]_i.$$

Уравнение же для $\mathbf{L}$, разумеется, не имеет вида уравнения непрерывности, поскольку «антиферромагнитный момент» $\int \mathbf{L} dV$ не сохраняется.

Рассмотрим теперь малые колебания магнитных моментов, для чего положим

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_0 + \mathbf{I} = \nu \mathbf{L} + \mathbf{L}, \quad \mathbf{M} \equiv \mathbf{m},$$

где $\mathbf{I}$ и $\mathbf{m}$ — малые величины, ν — единичный вектор в равновесном направлении вектора $\mathbf{L}_0$. Линеаризованные уравнения движения (74.4) и (74.7) имеют вид

$$\frac{\partial \mathbf{I}}{\partial t} = L [\Omega \nu], \quad \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = \gamma L [\nu \mathbf{H}_L]. \quad (74.10)$$

Здесь учтено, что второй член справа в уравнении (74.7) тождественно равен нулю. Величины же Ω и $\mathbf{H}_L$ линейны по малым переменным и в них достаточно просто заменить $\mathbf{L}$ и $\mathbf{M}$ на $\mathbf{I}$ и $\mathbf{m}$.

Для плоской монохроматической спиновой волны уравнения движения (74.10) дают

$$\begin{aligned} -i\omega \mathbf{I} &= -\gamma L a [\mathbf{m} \nu] \\ -i\omega \mathbf{m} &= -\gamma L a(\mathbf{n}) k^2 [\mathbf{I} \nu], \end{aligned} \quad (74.11)$$

где снова (как и в § 69) $\alpha(\mathbf{n}) = \alpha_{ik} n_i n_k$, $\mathbf{n}$ — единичный вектор в направлении $\mathbf{k}$. Умножив первое из этих уравнений векторно на ν , получим

$$\gamma L a \mathbf{m} = -i\omega [\mathbf{I} \nu], \quad (74.12)$$

Мы видим, что в рассматриваемом случае длинных волн вектор $\mathbf{m}$ действительно мал по сравнению с $\mathbf{I}$. Подстановка же этого

выражения во второе уравнение сразу приводит к следующему закону дисперсии спиновых волн:

$$\omega = \gamma Lk [a \alpha(\mathbf{n})]^{1/2}. \quad (74.13)$$

Таким образом, частота спиновых волн, а тем самым и энергия магнонов $\varepsilon = \hbar\omega$ в антиферромагнетике в обменном приближении пропорциональны k , а не k^2 , как в ферромагнетике¹⁾. Уравнения (74.11) устанавливают однозначную связь между $\mathbf{l}$ и $\mathbf{m}$, но обе компоненты $\mathbf{l}$ (в плоскости, перпендикулярной ν) остаются произвольными. Это значит, что спиновые волны имеют два независимых направления поляризации.

Из уравнений (74.12) и (74.13) видно, что $m \sim k(\alpha/a)^{1/2}l \ll l$. Относительная малость $\mathbf{m}$ уже была использована выше. Для учета магнитной анизотропии надо сделать более конкретные предположения о характере симметрии кристалла. Мы будем считать, что кристалл имеет одноосную симметрию, причем равновесное направление $\mathbf{L}$ совпадает с осью симметрии²⁾. Выберем ее направление за ось z .

Ввиду малости вектора $\mathbf{m}$ достаточно учесть анизотропию, связанную с вектором $\mathbf{l}$. Это также позволяет пренебречь, в отличие от ферромагнетика, возникающим при колебаниях магнитным полем.

При сделанных предположениях плотность энергии анизотропии $U_{\text{ан}} = K\mathbf{l}^2/2$, причем $K > 0$. Ее учет приводит к появлению дополнительного члена $-K\mathbf{l}$ в эффективном поле $\mathbf{H}_L$, которое для плоской волны становится равным

$$\mathbf{H}_L = -[\alpha(\mathbf{n})k^2 + K]\mathbf{l}. \quad (74.14)$$

Отсюда видно, что с учетом анизотропии закон дисперсии спиновых волн получается из (74.12) заменой αk^2 на $\alpha k^2 + K$. В результате при $k \rightarrow 0$ энергия магнонов будет стремиться не к нулю, а к конечной величине³⁾

$$\varepsilon(0) = \hbar\gamma L\sqrt{aK} \quad (74.15)$$

¹⁾ Такой закон дисперсии для антиферромагнетиков впервые получен Хюльтеном (*L. Hulthen*, 1936). Вывод, использующий макроскопическое рассмотрение намагниченностей подрешеток, дан *М. И. Когановым* и *В. М. Цукерником* (1958).

²⁾ К такому типу относится антиферромагнетик FeCO_3 , имеющий ромбоэдрическую решетку (кристаллический класс D_{3d}) с двумя ионами Fe в элементарной ячейке. Магнитные моменты этих ионов направлены вдоль оси третьего порядка.

³⁾ Частоту $\omega(0) = \varepsilon(0)/\hbar$ называют частотой *антиферромагнитного резонанса*.

(*Ch. Kittel*, 1951). Обратим внимание на то, что щель в спектре оказывается пропорциональной корню из константы анизотропии (а не ее первой степени, как в (70.12)). Поскольку малость релятивистских эффектов выражается относительной малостью константы анизотропии, то в антиферромагнетике эти эффекты, вообще говоря, существеннее, чем в ферромагнетике.

Магнонный вклад во внутреннюю энергию антиферромагнетика вычисляется по формуле (71.3). (Правая часть этого равенства должна быть удвоена, поскольку магныоны имеют два направления поляризации.) В области температур

$$\varepsilon(0) \ll T \ll T_N \quad (74.16)$$

(T_N — температура исчезновения антиферромагнетизма, точка Нееля) можно пользоваться спектром (74.12). В одноосном кристалле

$$\omega(k) = \gamma L a^{1/2} [\alpha_1(k_x^2 + k_y^2) + \alpha_2 k_z^2].$$

Вычисление интеграла (71.3) приводит к следующему результату для магнонного вклада в теплоемкость:

$$C_{\text{маг}} = V \frac{4\pi^2 T^3}{15\gamma^3 L^3 a^{3/2} (\alpha_2 \alpha_1^2)^{3/2} \hbar^3}. \quad (74.17)$$

При температурах же $T \ll \varepsilon(0)$ магнонный вклад в термодинамические величины экспоненциально мал.

Для того чтобы определить температурную зависимость антиферромагнитного вектора $\mathbf{L}$, добавим к энергии единицы объема тела член вида

$$-\mathbf{GL} = -GL_z \approx -GL \left(1 - \frac{l^2}{2L}\right), \quad (74.18)$$

где $\mathbf{G}$ — сопряженное вектору $\mathbf{L}$ вспомогательное поле, приложенное вдоль его равновесного направления.

Тогда равновесное значение L можно определить, дифференцируя по G свободную энергию: $L = -(1/V)(\partial \tilde{F}/\partial G)_T$. (Ср. формулу (54.4) (см. V) для случая магнитного поля.) В результате получаем аналогичную (71.4) формулу

$$L_{\text{маг}} = L(T) - L(0) = - \int \frac{\partial \varepsilon}{\partial G} \Big|_{G \rightarrow 0} \frac{1}{e^{\varepsilon/T} - 1} \frac{2d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (74.19)$$

Наличие поля G приводит в законе дисперсии магнонов к замене

$\alpha(\mathbf{n})k^2 \rightarrow \alpha(\mathbf{n})k^2 + G/L$. Дифференцируя, находим

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial G} = \frac{\hbar^2 \gamma^2 L a}{2\varepsilon}.$$

Подставляя в (74.18) и интегрируя, получаем окончательно для области температур (74.15):

$$L(T) - L(0) = -\frac{T^2}{12\gamma L^2 a^{1/2} (\alpha_2 \alpha_1^2)^{1/2} \hbar}.$$

Заметим, что в обменном приближении интеграл (74.18), как и в случае ферромагнетика, расходится для двумерных систем, что приводит к разрушению антиферромагнитного дальнего порядка.

Задача

Найти спектр магнонов в одноосном антиферромагнетике типа «легкая плотность» ($K < 0$).

Решение. Равновесный антиферромагнитный вектор $\mathbf{L}_0$ лежит теперь в плоскости перпендикулярной оси симметрии кристалла — оси z . Выберем направление оси x вдоль $\mathbf{L}_0$. Энергия анизотропии имеет вид $U_{\text{ан}} = |K|(\mathbf{n}_z \mathbf{l})^2/2$, где $\mathbf{n}_z$ и далее $\mathbf{n}_y$ — единичные векторы вдоль осей z и y . В выражении для $\mathbf{H}_L$ появляется дополнительное слагаемое — $|K|(\mathbf{n}_z \mathbf{l})\mathbf{n}_z$, так что первое из уравнений (74.11) и уравнение (74.12) не меняются, а второе уравнение (74.11) приобретает вид

$$-i\omega \mathbf{m} = -\gamma L \alpha(\mathbf{n})k^2 [\mathbf{l} \nu] - \gamma L |K|(\mathbf{n}_z \mathbf{l})\mathbf{n}_y.$$

В результате для магнона с поляризацией вектора $\mathbf{l}$ вдоль оси y закон дисперсии имеет прежний вид (74.13), а для магнона с $\mathbf{l}$ вдоль z в формуле (74.13) αk^2 заменяется на $\alpha k^2 + |K|$. Анизотропия в этом случае снимает вырождение по поляризациям.

§ 74*. Антиферромагнитное состояние спинового гамильтониана

В § 72 мы видели, что в ферромагнитном случае можно точно определить энергию основного состояния спинового гамильтониана (72.1) и закон дисперсии элементарных возбуждений — магнонов. Такое точное решение невозможно для антиферромагнетика. Сама картина двух подрешеток с противоположно направленными спинами в их узлах носит, по существу, классический характер и нарушается возможностью обмена электронами между подрешетками. В результате этого суммарные проекции спинов подрешеток не имеют определенных значений и не являются хорошими квантовыми числами для характеристики основного и возбужденных состояний.

Картина вставленных друг в друга ферромагнитных подрешеток может, однако, служить правильным нулевым приближением в квазиклассическом случае, когда спин каждого узла подрешетки велик. В этом случае квантовые эффекты малы и их можно учесть по теории возмущений.¹⁾ Условие $S \gg 1$ не выполняется для реальных антиферромагнетиков. Тем не менее решение этой задачи представляет большой интерес и излагаемый ниже метод полезен при исследовании многих вопросов теории магнетизма. Отметим, что в этой модели в простейшем случае взаимодействия только с ближайшими соседями при отрицательных значениях обменных интегралов J_{nm} в (72.1) заведомо возникает антиферромагнетизм. Действительно, в первом приближении основное состояние определяется просто минимизацией этого выражения по направлениям классических векторов $\mathbf{S}_n$. Минимуму соответствует состояние, в котором ближайшие соседи каждого узла имеют противоположное направление спина, т. е. принадлежат к другой подрешетке.

Мы воспользуемся спиновым гамильтонианом в форме (72.6) и в качестве первого шага выразим входящие в эту формулу операторы $\hat{S}_z$, $\hat{S}_+$, $\hat{S}_-$ через операторы с бозевскими правилами коммутации. Запишем спиновые операторы для спина S в виде

$$\hat{S}_- = \sqrt{2S} \hat{a}^+ \left(1 - \frac{\hat{a}^+ \hat{a}}{2S}\right)^{1/2}, \quad \hat{S}_+ = \sqrt{2S} \hat{a} \left(1 - \frac{\hat{a}^+ \hat{a}}{2S}\right)^{1/2}, \quad (74^*.1)$$

$$\hat{S}_z = S - \hat{a}^+ \hat{a}.$$

Нетрудно убедиться в том, что если операторы $\hat{a}^+$, $\hat{a}$ удовлетворяют обычным бозевским правилам коммутации

$$\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1,$$

то операторы $\hat{S}_z$, $\hat{S}_+$ и $\hat{S}_-$ будут удовлетворять правильным соотношениям коммутации (72.4). Имеем, например,

$$\{\hat{S}_z, \hat{S}_+\} = -\sqrt{2S} \left(1 - \frac{\hat{a}^+ \hat{a}}{2S}\right)^{1/2} \{\hat{a}^+, \hat{a}\} \hat{a} = \hat{S}_+$$

в соответствии со второй формулой (72.4). (Фигурная скобка обозначает коммутатор.)

Аналогичным образом можно проверить, что

$$\hat{S}^2 \equiv \hat{S}_- \hat{S}_+ + \hat{S}_z^2 + \hat{S}_z = S(S+1).$$

¹⁾ Теория возмущений при условии $S \gg 1$ уже была использована в конце § 73 для исследования взаимодействия магнонов.

Наконец, из (74*.1) следует, что, как это и должно быть, равен нулю результат действия оператора $\hat{S}_+$ на состояние с максимально возможным значением $S_z = S$ (т. е. с $\hat{a}^+\hat{a} = 0$), равно как и результат действия $\hat{S}_-$ на состояние с $S_z = -S$, $\hat{a}^+\hat{a} = -2S$.

Таким образом, формулы (74*.1) дают обладающие всеми необходимыми свойствами точное представление спиновых операторов, причем операторы $\hat{a}^+$ и $\hat{a}$ имеют смысл операторов рождения и уничтожения в данном узле решетки «частицы» с проекцией $S_z = -1^1$).

Начиная с этого момента нам будет удобно ввести разные обозначения для узлов, принадлежащим к разным подрешеткам. Будем нумеровать узлы первой подрешетки векторными индексами a , а второй — индексами b . Направим ось квантования момента вдоль направления намагниченности подрешетки a . В рассматриваемом квазиклассическом случае больших S квантовые флуктуации малы и эта намагниченность близка к номинальному значению. (Ниже мы вычислим поправку к этому значению.) Это означает, что оператор $\hat{a}^+\hat{a}$, а следовательно и сами операторы $\hat{a}^+$ и $\hat{a}$ следует считать малыми величинами и пренебречь ими в подкоренных выражениях в (74*.1). В результате (74*.1) приобретает вид

$$\hat{S}_{a-} \approx \sqrt{2S}\hat{a}_a^+, \quad \hat{S}_{a+} \approx \sqrt{2S}\hat{a}_a, \quad \hat{S}_{az} = S - \hat{a}_a^+\hat{a}_a. \quad (74*.2)$$

Что касается второй подрешетки, то ее намагниченность направлена вдоль отрицательного направления оси z . Поэтому для ее операторов справедливы соотношения в точности аналогичные (74*.2), но в системе координат $x' = x$, $y' = -y$, $z' = -z$. (Изменение знака, а также и оси y , необходимо для того, чтобы «штрихованная» система координат была правосторонней.) Штрихованные операторы очевидно связаны с обычными следующим образом $\hat{S}'_+ = \hat{S}_-$, $\hat{S}'_- = \hat{S}_+$, $\hat{S}'_z = -\hat{S}_z$. Поэтому, если ввести бозевские операторы $\hat{b}_b$ уничтожения «частицы» с проекцией спина $S_z = +1$ на узле b , получаем для второй решетки вместо (74*.2) формулы

$$\hat{S}_{b-} \approx \sqrt{2S}\hat{b}_b, \quad \hat{S}_{b+} \approx \sqrt{2S}\hat{b}_b^+, \quad \hat{S}_{bz} = -S + \hat{b}_b^+\hat{b}_b. \quad (74*.3)$$

¹) Представление (74*.1) для спиновых операторов было найдено Холштейном и Примаковым (*T. Holstein, H. Primakov, 1940*). Они же впервые применили преобразование (74*.1) в теории магнетизма. Излагаемая приближенная теория антиферромагнетизма принадлежит Андерсону и Кубо (*P. W. Anderson, 1952; R. Kubo, 1952*).

Подставим (74*.2) и (74*.3) в выражение (72.6) для гамильтониана, оставив лишь члены не выше второго порядка по операторам рождения и уничтожения. Суммирование по узлам первой и второй подрешеток должно производиться в отдельности. Запись формул, однако, можно упростить, если нумеровать узлы подрешеток одинаковым образом, т. е. так, чтобы было

$$\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_{a'} = \mathbf{r}_b - \mathbf{r}_{b'} \quad \text{при} \quad \mathbf{a} - \mathbf{a}' = \mathbf{b} - \mathbf{b}'.$$

(В силу эквивалентности подрешеток тогда $J_{aa'} = J_{bb'}$.) После этого можно обозначать индекс суммирования по узлам второй подрешетки той же буквой $\mathbf{a}$. Несложные вычисления дают в отсутствие внешнего поля:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & S^2(J_0^{(2)} - J_0^{(1)}) + S(J_0^{(1)} - J_0^{(2)}) \sum_a (\hat{a}_a^+ \hat{a}_a + \hat{b}_a^+ \hat{a}_a) - \\ & - S \sum_{aa'} \left(J_{aa'}^{(1)} (\hat{a}_a^+ \hat{a}_{a'} + \hat{b}_a^+ \hat{a}_{a'}) + J_{aa'}^{(2)} (\hat{a}_a^+ \hat{b}_{a'}^+ + \hat{a}_a \hat{b}_{a'}) \right). \end{aligned} \quad (74*.4)$$

Мы ввели здесь обозначение $J_{aa'}^{(1)}$ для элементов матрицы $J_{aa'}$ в том случае, когда узлы $\mathbf{a}$ и $\mathbf{a}'$ принадлежат одной и той же подрешетке и $J_{aa'}^{(2)}$, если они принадлежат к разным подрешеткам,

$$J_0^{(1,2)} \equiv \sum_a J_{aa'}^{(1,2)}.$$

Запишем теперь гамильтониан (74*.4) в импульсном представлении, для чего положим, как в (72.7),

$$\begin{aligned} J_{aa'}^{(1)} = (2/N) \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_{a'})} J_{\mathbf{k}}^{(1)}, \quad J_{\mathbf{k}}^{(1)} = \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_{a'})} J_{aa'}^{(1)}, \\ \hat{a}_a = \sqrt{(2/N)} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_a} \hat{a}_{\mathbf{k}}, \quad \hat{a}_{\mathbf{k}} = \sqrt{(2/N)} \sum_a e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_a} \hat{a}_a, \\ \hat{a}_a^+ = \sqrt{(2/N)} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_a} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+, \quad \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ = \sqrt{(2/N)} \sum_a e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_a} \hat{a}_a^+, \end{aligned} \quad (74*.5)$$

и аналогично для других величин. (Учтено, что число узлов, по которым производится суммирование, равно теперь $N/2$, где N — полное число узлов в решетке.) Введенная выше величина $J_0^{(1)}$ есть не что иное, как $J_{\mathbf{k}=0}^{(1)}$.

Используя эти формулы, легко приводим (74*.4) к виду

$$\begin{aligned} \hat{H} = & S^2(J_0^{(2)} - J_0^{(1)}) + \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \{ (A_{\mathbf{k}}/2) (\hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+ + \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}}) + (B_{\mathbf{k}}/2) (\hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}}) \}, \end{aligned} \quad (74*.6)$$

где

$$A_{\mathbf{k}} = -2SJ_{\mathbf{k}}^{(2)}, \quad B_{\mathbf{k}} = 2S \left(J_0^{(1)} - J_0^{(2)} - J_{\mathbf{k}}^{(1)} \right). \quad (74^*.7)$$

Гамильтониан (74*.6) формально аналогичен гамильтониану (25.11) слабонеидеального бозе-газа, отличаясь от последнего только смыслом коэффициентов $A_{\mathbf{k}}$ и $B_{\mathbf{k}}$ и наличием двух типов операторов $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ и $\hat{b}_{\mathbf{k}}$. Диагонализация (74*.6) достигается преобразованием, аналогичным (25.8). Положим

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}\hat{c}_{\mathbf{k}} + \nu_{\mathbf{k}}\hat{d}_{-\mathbf{k}}^+, \quad \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ = u_{\mathbf{k}}\hat{c}_{\mathbf{k}}^+ + \nu_{\mathbf{k}}\hat{d}_{-\mathbf{k}}. \quad (74^*.8)$$

Выражения для $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ отличаются от (74*.8) перестановкой операторов $\hat{c}_{\mathbf{k}}$ и $\hat{d}_{\mathbf{k}}$:

$$\hat{b}_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}\hat{d}_{\mathbf{k}} + \nu_{\mathbf{k}}\hat{c}_{-\mathbf{k}}^+, \quad \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ = u_{\mathbf{k}}\hat{d}_{\mathbf{k}}^+ + \nu_{\mathbf{k}}\hat{c}_{-\mathbf{k}}. \quad (74^*.9)$$

Новые операторы $\hat{c}_{\mathbf{k}}$, $\hat{c}_{\mathbf{k}}^+$ и $\hat{d}_{\mathbf{k}}$, $\hat{d}_{\mathbf{k}}^+$, имеют смысл операторов рождения и уничтожения магнонов двух независимых поляризаций. Они будут удовлетворять бозевским правилам коммутации, если, как и в § 25, наложить на $u_{\mathbf{k}}$ и $\nu_{\mathbf{k}}$ условие

$$u_{\mathbf{k}}^2 - \nu_{\mathbf{k}}^2 = 1.$$

Мы, однако, произведем диагонализацию гамильтониана несколько другим способом, чем в § 25.

Указанному условию можно удовлетворить тождественно, если положить:

$$u_{\mathbf{k}} = \text{ch } \alpha_{\mathbf{k}}, \quad \nu_{\mathbf{k}} = \text{sh } \alpha_{\mathbf{k}}. \quad (74^*.10)$$

При подстановке (74*.8), (74*.9) в (74*.6) члены, недиагональные по числам заполнения магнонов, выпадут, если параметр $\alpha_{\mathbf{k}}$ в формулах (74*.10) определен согласно

$$\text{cth}(2\alpha_{\mathbf{k}}) = -\frac{B_{\mathbf{k}}}{A_{\mathbf{k}}}.$$

Окончательно гамильтониан приобретает вид

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k})(\hat{c}_{\mathbf{k}}^+\hat{c}_{\mathbf{k}} + \hat{d}_{\mathbf{k}}^+\hat{d}_{\mathbf{k}}), \quad (74^*.11)$$

где $\varepsilon(\mathbf{k})$ — энергия магнона с квазиимпульсом $\hbar\mathbf{k}$, равная

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sqrt{B_{\mathbf{k}}^2 - A_{\mathbf{k}}^2}. \quad (74^*.12)$$

Согласно (74*.7) $B_{\mathbf{k}=0} = A_{\mathbf{k}=0}$. Разложение же этих величин по степеням компонент $\mathbf{k}$ начинается с квадратичных членов. Поэтому при малых $\mathbf{k}$ энергия $\varepsilon(\mathbf{k})$ линейна по $|\mathbf{k}|$ в соответствии с результатом макроскопической теории предыдущего параграфа.

Отметим также, что, как видно из (74*.11), вырождение по поляризации магнонов в обменном приближении имеет место при любых $\mathbf{k}$.

Энергия основного состояния E_0 дается выражением:

$$E_0 = S^2(J_0^{(2)} - J_0^{(1)}) + \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon(\mathbf{k}) - \frac{1}{2}B_{\mathbf{k}}). \quad (74*.13)$$

аналогичным (25.13). Второй член справа представляет собой квантовую поправку. Он очевидно имеет порядок $1/S$ по отношению к классическому первому члену.

Квантовые эффекты приводят к уменьшению намагниченности подрешеток по сравнению с классическим значением равным S , если относить его к одному узлу. Из (74*.2) следует, что

$$\langle S_z \rangle = S - \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{a}} \langle \hat{a}_{\mathbf{a}}^+ \hat{a}_{\mathbf{a}} \rangle = S - \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle.$$

Выражая операторы $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+$, $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ через магнонные операторы с помощью (74*.8) получаем при $T = 0$, когда $\langle \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{d}_{\mathbf{k}}^+ \hat{d}_{\mathbf{k}} \rangle = 0$, формулу, аналогичную (25.18):

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{B_{\mathbf{k}}}{4\varepsilon(\mathbf{k})} - \frac{1}{2}.$$

Подставим это выражение в формулу для $\langle S_z \rangle$ и перейдем от суммирования по $\mathbf{k}$ к интегрированию по $V d^3k / (2\pi)^3$:

$$\langle S_z \rangle = S - \int \left(\frac{B_{\mathbf{k}}}{4\varepsilon(\mathbf{k})} - \frac{1}{2} \right) \frac{\nu d^3k}{(2\pi)^3}, \quad (74*.14)$$

где ν — объем элементарной ячейки подрешетки. Интегрирование в (74*.14) производится по ячейке $\mathbf{k}$ -пространства, соответствующего подрешетке. (Напоминаем, что в (74*.5) суммирование производится по узлам подрешетки.) Численный расчет для простой кубической решетки с взаимодействием между ближайшими соседями дает

$$\langle S_z \rangle \approx S - 0,08.$$

Отметим, что в этом случае поправка к классическому значению оказывается малой даже при экстраполяции к значению $S = 1/2$. Намагниченность подрешетки может, однако, оказаться существенно меньше номинальной для решеток с «фрустрацией»¹⁾, в которых существенно взаимодействие с отдаленными соседями, причем его знак, в отличие от знака взаимодействия между ближайшими соседями, соответствует ферромагнетизму.

¹⁾ От английского «frustration» — разочарование.

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ФЛУКТУАЦИИ**§ 75. Гринавская функция фотона в среде**

Приступая к изучению статистических свойств электромагнитного поля в материальных средах, напомним прежде всего, в чем заключается смысл усреднений, которым подвергаются электромагнитные величины в макроскопической электродинамике.

Если исходить, для наглядности, из классической точки зрения, то можно различать усреднение по физически бесконечно малому объему при заданном расположении всех частиц в нем и затем усреднение полученной величины по движению частиц. В уравнения Максвелла макроскопической электродинамики входят полностью усредненные величины. При рассмотрении же флуктуаций поля речь идет о колебаниях со временем величин, усредненных лишь по физически бесконечно малым объемам.

С квантовомеханической точки зрения говорить об усреднении по объему можно, разумеется, не для самой физической величины, а лишь для ее оператора; второй же шаг заключается в определении среднего значения этого оператора с помощью квантовомеханических вероятностей. Фигурирующие ниже в этой главе операторы поля будут пониматься как усредненные только в первом смысле.

Статистические свойства электромагнитного излучения в материальной среде описываются гриновской функцией фотона в среде. Для фотонов роль ψ -операторов играют операторы потенциалов электромагнитного поля. Фотонные функции Грина определяются через эти операторы таким же образом, как они определяются для частиц через ψ -операторы.

Потенциалы поля составляют 4-вектор $A^\mu = (A^0, \mathbf{A})$, где $A^0 \equiv \varphi$ — скалярный, а $\mathbf{A}$ — векторный потенциалы. Выбор этих потенциалов в классической электродинамике неоднозначен: они допускают так называемое калибровочное преобразование, никак не отражающееся ни на каких наблюдаемых величинах (см. II, § 18). Соответственно в квантовой электродинамике такая же неоднозначность имеет место в выборе операторов поля, а с ними — и

в определении гриновских функций фотона. Мы будем пользоваться калибровкой, в которой скалярный потенциал равен нулю:

$$A^0 \equiv \varphi = 0, \quad (75.1)$$

так что поле определяется одним лишь векторным потенциалом. Такая калибровка обычно оказывается удобной для задач, в которых речь идет о взаимодействии электромагнитного поля с нерелятивистскими частицами, — как это и имеет место для поля в обычных материальных средах.

В этой калибровке функция Грина представляет собой трехмерный тензор второго ранга

$$D_{ik}(X_1, X_2) = -i \langle T \hat{A}_i(X_1) \hat{A}_k(X_2) \rangle \quad (75.2)$$

($i, k = x, y, z$ — трехмерные векторные индексы), где угловые скобки обозначают (как и в (36.1)) усреднение по распределению Гиббса для системы, состоящей из среды вместе с находящимся с ней в равновесии излучением; поскольку фотоны являются бозонами, то перестановка операторов $\hat{A}_i, \hat{A}_k$ при их хронологизации не сопровождается изменением знака произведения. Напомним также, что операторы $\hat{A}_i$ — самосопряженные (чем выражается истинная нейтральность фотона); поэтому в (75.2) не делается различия между $\hat{A}_i$ и $\hat{A}_i^{+1}$).

В качестве первичного понятия для построения всех видов фотонных гриновских функций следует, однако, пользоваться не (75.2), а запаздывающей функцией Грина, определенной согласно

$$iD_{ik}^R(X_1, X_2) = \begin{cases} \langle \hat{A}_i(X_1) \hat{A}_k(X_2) - \hat{A}_k(X_2) \hat{A}_i(X_1) \rangle, & t_1 > t_2, \\ 0, & t_1 < t_2 \end{cases} \quad (75.3)$$

(знак минус между двумя членами в угловых скобках отвечает определению (36.19) для статистики Бозе).

Для замкнутой системы функция Грина зависит от моментов времени t_1, t_2 только через их разность $t = t_1 - t_2$. Что же касается координат $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ то в общем случае неоднородной среды они входят в функцию независимо друг от друга: $D_{ik}^R(t; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Соответственно фурье-разложению эта функция будет подвергаться

¹⁾ В общем случае произвольной калибровки потенциалов фотонная функция Грина является 4-тензором $D_{\mu\nu}$ (в калибровке же (75.1): $D_{00} = 0, D_{0i} = 0$). Общие тензорные и калибровочные свойства фотонной функции Грина в статистике — такие же, как и в квантовой электродинамике поля в вакууме. Отметим, что определение (75.2) отличается знаком от принятого в т. IV. Оно выбрано здесь единообразно с определением гриновских функций других бозонов (в том числе фононов).

только по времени; компонента этого разложения

$$D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int_0^\infty e^{i\omega t} D_{ik}^R(t; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) dt. \quad (75.4)$$

Рассматривая величины, усредненные по физически бесконечно малым объемам, мы тем самым ограничиваем себя рассмотрением лишь длинноволновой части излучения, в которой волновые векторы фотонов удовлетворяют условию

$$ka \ll 1 \quad (75.5)$$

(a — межатомные расстояния в среде). В этой области частот гриновская функция фотона может быть выражена через другие макроскопические характеристики среды — ее диэлектрическую и магнитную проницаемости $\varepsilon(\omega)$ и $\mu(\omega)$.

Для этого запишем оператор взаимодействия электромагнитного поля со средой:

$$\hat{V} = -\frac{1}{c} \int \hat{\mathbf{j}} \hat{\mathbf{A}} d^3x, \quad (75.6)$$

где $\hat{\mathbf{j}}$ — оператор плотности электрического тока, создаваемого частицами среды¹⁾. Если же в среду внести некоторый классический «сторонний» ток $\mathbf{j}(t, \mathbf{r})$, то с ним будет связан оператор взаимодействия

$$\hat{V} = -\frac{1}{c} \int \mathbf{j}(t, \mathbf{r}) \hat{\mathbf{A}} d^3x. \quad (75.7)$$

Это выражение позволяет установить связь с общей теорией отклика макроскопической системы на внешнее воздействие.

Напомним, что в этой теории (см. V, § 125) фигурировал дискретный ряд величин $x_a (a = 1, 2, \dots)$, характеризующий поведение системы под действием определенных внешних воздействий. Эти воздействия описываются «возмущающими силами» $f_a(t)$ такими, что оператор энергии взаимодействия имеет вид

$$\hat{V} = - \sum_a f_a \hat{x}_a,$$

¹⁾ См. IV, § 43 (в т. IV ток обозначается через $e\mathbf{j}$, т. е. элементарный заряд e выносился из определения $\mathbf{j}$). Оператор (75.6) подразумевает использование релятивистского выражения для оператора тока. В нерелятивистских задачах можно пренебречь в ψ -операторах (из которых строится оператор тока $\hat{\mathbf{j}}$) частями, связанными с отрицательными частотами, т. е. с античастицами. Это означает, в частности, пренебрежение радиационными поправками, которые изменяют фотонную функцию Грина в вакууме за счет виртуального рождения электронно-позитронных пар. Эти поправки пренебрежимо малы при длинах волн $\lambda \gg \hbar/mc$ — условие, заведомо выполненное в области (75.5).

где $\hat{x}_a$ — операторы величин x_a . Средние значения $\bar{x}_a(t)$, устанавливающиеся под действием возмущения, являются линейными функционалами сил $f_a(t)$. Для фурье-компонент всех величин эта связь записывается в виде

$$\bar{x}_{aw} = \sum_b \alpha_{ab}(\omega) f_{bw}$$

(предполагается, что в отсутствие возмущения $\bar{x}_a = 0$). Коэффициенты α_{ab} в этих соотношениях называют *обобщенными восприимчивостями* системы. Если обе величины x_a и x_b ведут себя одинаково по отношению к обращению времени, а тело *не магнитоактивно* (не обладает магнитной структурой и не находится в магнитном поле), то величины α_{ab} симметричны по своим индексам.

Здесь нам придется иметь дело с величинами f_a и x_a , имеющими распределенный характер — функциями координат $\mathbf{r}$ точки тела. В таком случае выражение $\hat{V}$ надо писать в виде

$$\hat{V} = - \sum_a \int f_a(t, \mathbf{r}) \hat{x}_a(t, \mathbf{r}) d^3x, \quad (75.8)$$

а соотношение между средними значениями $\bar{x}_a$ и силами f_a — как

$$\bar{x}_{aw}(\mathbf{r}) = \sum_b \int \alpha_{ab}(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') f_{bw}(\mathbf{r}') d^3x'. \quad (75.9)$$

Обобщенные восприимчивости становятся теперь функциями координат двух точек в теле, а их симметрия выражается равенством

$$\alpha_{ab}(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \alpha_{ba}(\omega; \mathbf{r}', \mathbf{r}). \quad (75.10)$$

Согласно формуле Кубо (см. V, (126.9)), восприимчивости выражаются через средние значения коммутаторов гейзенберговских операторов $\hat{x}_a(t, \mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} \alpha_{ab}(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle \hat{x}_a(t, \mathbf{r}) \hat{x}_b(0, \mathbf{r}') - \hat{x}_b(0, \mathbf{r}') \hat{x}_a(t, \mathbf{r}) \rangle dt. \end{aligned} \quad (75.11)$$

Будем рассматривать теперь в качестве «сил» f_a компоненты вектора тока $\mathbf{j}$. Тогда из сравнения (75.7) с (75.8) видно, что отвечающими им величинами x_a будут компоненты векторного потенциала поля $\mathbf{A}/c$. Сравнение же формулы (75.11) с определением (75), (75.4) показывает теперь, что обобщенные восприимчивости $\alpha_{ab}(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ совпадают с компонентами тензора

$$-D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')/\hbar c^2.$$

В силу (75.10) отсюда сразу следует (для немагнитоактивных сред), что

$$D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = D_{ki}^R(\omega; \mathbf{r}', \mathbf{r}). \quad (75.12)$$

Соотношения же (75.9) принимают вид

$$\overline{A}_{i\omega}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\hbar c} \int D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') j_{k\omega}(\mathbf{r}') d^3x'. \quad (75.13)$$

Среднее значение $\overline{\mathbf{A}}$ есть не что иное, как векторный потенциал макроскопического (полностью усредненного — см. начало параграфа) электромагнитного поля в среде; ниже черту над $\mathbf{A}$ (а также и над другими макроскопическими величинами) не будем писать. Учтем теперь, что макроскопическое поле, создаваемое классическим током $\mathbf{j}$, удовлетворяет уравнению Максвелла

$$\text{rot } \mathbf{H}_\omega = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_\omega - \frac{i\omega}{c} \mathbf{D}_\omega,$$

где $\mathbf{D}$ — электрическая индукция; в общем случае анизотропной среды $\mathbf{D}_\omega$ связано с напряженностью $\mathbf{E}_\omega$ соотношениями $D_{i\omega} = \varepsilon_{ik}(\omega) E_{k\omega}$; если среда неоднородна, то тензор диэлектрической проницаемости является также и функцией координат: $\varepsilon_{ik}(\omega, \mathbf{r})$.

В выбранной нами калибровке потенциалов (75.1) имеем

$$\mathbf{B}_\omega = \text{rot } \mathbf{A}_\omega, \quad \mathbf{E}_\omega = i \frac{\omega}{c} \mathbf{A}_\omega, \quad (75.14)$$

где $\mathbf{B}$ — магнитная индукция, связанная с напряженностью $\mathbf{H}$ соотношениями $B_{i\omega} = \mu_{ik} H_{k\omega}$ ¹⁾. Поэтому для потенциала имеем уравнение²⁾.

$$\left[\text{rot}_{im}(\mu_{mn}^{-1} \text{rot}_{nk}) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{ik} \right] A_{k\omega} = \frac{4\pi}{c} j_{i\omega}.$$

Подставив сюда $\mathbf{A}_\omega$ в виде (75.13), найдем, что функция D_{ik}^R должна удовлетворять уравнению

$$\left[\text{rot}_{im}(\mu_{mn}^{-1} \text{rot}_{nl}) - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{il} \right] D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi \hbar \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (75.15)$$

¹⁾ Напомним, что в макроскопической электродинамике среднее значение микроскопической электрической напряженности принято обозначать через $\mathbf{E}$, а среднее значение магнитной напряженности — через $\mathbf{B}$ и называть магнитной индукцией.

²⁾ Здесь и ниже пользуемся обозначением $\text{rot}_{il} = e_{ikl} \partial / \partial x_k$, где e_{ikl} — единичный антисимметричный псевдотензор. При этом $(\text{rot } \mathbf{A})_i = \text{rot}_{il} A_l$.

Это уравнение существенно упрощается для изотропных (в каждом своем элементе объема) сред, когда тензоры ε_{ik} и μ_{ik} сводятся к скалярам. Магнитная проницаемость обычно близка к 1, и ниже в этом параграфе мы будем считать ее равной 1. Положив $\varepsilon_{ik} = \varepsilon \delta_{ik}$ и $\mu_{ik} = \delta_{ik}$, получим уравнение

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_l} - \delta_{il} \Delta - \delta_{il} \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega; \mathbf{r}) \right] D_{lk}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi \hbar \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (75.16)$$

Таким образом, вычисление запаздывающей функции Грина для неоднородной среды сводится к решению определенного дифференциального уравнения (*И. Е. Дзялошинский, Л. П. Питаевский, 1959*).¹⁾

На границах между различными средами компоненты тензора D_{lk}^R должны удовлетворять определенным условиям. В уравнении (75.16) вторая переменная $\mathbf{r}'$ и второй индекс k не участвуют в дифференциальных или алгебраических операциях, производимых над тензором D_{lk}^R , т. е. играют лишь роль параметров. Поэтому граничные условия должны ставиться только по координатам $\mathbf{r}$ для функции $D_{lk}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$, рассматриваемой как вектор по индексу l . Эти условия соответствуют непрерывности тангенциальных компонент $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ ²⁾. Поскольку $\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}}/c$, то роль вектора $\mathbf{E}$ играет при этом производная

$$-\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} D_{lk}^R(t; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

или, в компонентах Фурье,

$$i \frac{\omega}{c} D_{lk}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (75.17)$$

Аналогичным образом, роль вектора $\mathbf{H}$ (совпадающего при $\mu = 1$ с $\mathbf{B}$) играет

$$\text{rot}_l D_{ik}(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (75.18)$$

¹⁾ Отметим, что функция D_{ik}^R оказывается функцией Грина уравнений Максвелла в известном из математической физики смысле — решение уравнений поля с точным источником, удовлетворяющее условию запаздывания (опережающая функция D_{ik}^A удовлетворяла бы такому же уравнению с ε^* вместо ε).

²⁾ Граничные условия для нормальных компонент $\mathbf{B}$ и $\mathbf{D}$ не дают в данном случае ничего нового в соответствии с тем, что в поле, меняющемся со временем как $e^{-i\omega t}$, уравнения $\text{div } \mathbf{D} = 0$, $\text{div } \mathbf{B} = 0$ являются следствием уравнений $\text{rot } \mathbf{E} = i\omega \mathbf{B}/c$, $\text{rot } \mathbf{H} = -i\omega \mathbf{D}/c$.

Для пространственно-однородной неограниченной среды функция D_{ik}^R зависит только от разности $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Для компонент фурье-разложения по этой разности дифференциальное уравнение (75.16) сводится к системе алгебраических уравнений

$$\frac{1}{4\pi\hbar} \left[k_i k_l - \delta_{il} k^2 + \delta_{il} \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega) \right] D_{lk}^R(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ik}. \quad (75.19)$$

Решение этих уравнений:

$$D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}) = \frac{4\pi\hbar}{\omega^2 \varepsilon(\omega)/c^2 - k^2} \left[\delta_{ik} - \frac{c^2 k_i k_k}{\omega^2 \varepsilon(\omega)} \right]. \quad (75.20)$$

Согласно (36.21), функция Грина D_{ik} для однородной среды выражается через запаздывающую функцию D_{ik}^R формулой

$$D_{ik}(\omega, \mathbf{k}) = \text{Re } D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}) + i \text{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \cdot \text{Im } D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}). \quad (75.21)$$

При $T \rightarrow 0$ эта формула дает

$$D_{ik}(\omega, \mathbf{k}) = \text{Re } D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}) + i \text{sign } \omega \cdot \text{Im } D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}). \quad (75.22)$$

Функция D_{ik}^R дается выражением (75.20); если учесть, что $\text{Re } \varepsilon(\omega)$ — четная, а $\text{Im } \varepsilon(\omega)$ — нечетная функции ω , то мы найдем, что при $T = 0$

$$D_{ik}(\omega, \mathbf{k}) = D_{ik}^R(|\omega|, \mathbf{k}). \quad (75.23)$$

В пустоте $\varepsilon(\omega) = 1$. Но поскольку во всякой материальной среде $\text{Im } \varepsilon(\omega) > 0$ при $\omega > 0$, то вакууму отвечает предельный переход $\varepsilon \rightarrow 1 + i \text{sign } \omega$. При этом получаем выражение

$$D_{ik}^{(0)}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{4\pi\hbar}{\omega^2/c^2 - k^2 + i0} \left(\delta_{ik} - \frac{c^2 k_i k_k}{\omega^2} \right),$$

совпадающее с известным результатом квантовой электродинамики (см. IV, § 76).

§ 76. Флуктуации электромагнитного поля

Как уже было указано в начале предыдущего параграфа, при рассмотрении флуктуаций электромагнитного поля речь идет о колебаниях со временем величин, усредненных только по физически бесконечно малым элементам объема (но не по движению частиц в нем). В таком же смысле надо понимать и квантовомеханические операторы этих величин.

Основные формулы теории электромагнитных флуктуаций могут быть написаны непосредственно исходя из общих формул флуктуационно-диссипационной теоремы (V, § 125). Напомним, что для дискретного набора флуктуирующих величин x_a спектральное распределение флуктуаций выражается через обобщенные восприимчивости $\alpha_{ab}(\omega)$ формулой

$$(x_a x_b)_\omega = \frac{i\hbar}{2} (\alpha_{ba}^* - \alpha_{ab}) \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T},$$

где сама величина $(x_a x_b)_\omega$ представляет собой компоненту фурье-разложения по времени корреляционной функции

$$\varphi_{ab}(t) = \frac{1}{2} \langle \hat{x}_a(t) \hat{x}_b(0) + \hat{x}_b(0) \hat{x}_a(t) \rangle,$$

а $\hat{x}_a(t)$ — гейзенберговские операторы величин x_a . В случае распределенных величин $x_a(\mathbf{r})$ (функции координат точки в теле) эта формула записывается в виде

$$(x_a^{(1)} x_b^{(2)})_\omega = \frac{i\hbar}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} [(\alpha_{ba}^*(\omega; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) - \alpha_{ab}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2))], \quad (76.1)$$

где индексы (1) или (2) означают, что значение величины берется в точке $\mathbf{r}_1$ или $\mathbf{r}_2$.

В предыдущем параграфе было показано, что если величинами x_a являются компоненты векторного потенциала $\mathbf{A}(\mathbf{r})/c$, то соответствующими обобщенными восприимчивостями будут компоненты тензора $-D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2)/\hbar c^2$. Поэтому сразу находим

$$(A_i^{(1)} A_k^{(2)})_\omega = \frac{i}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \{ (D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - [D_{ki}^R(\omega; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)]^* \}. \quad (76.2)$$

Спектральные функции флуктуаций напряженностей поля получаются из (76.2) простым способом. Пусть $\varphi_{ik}^A(t_1, \mathbf{r}_1; t_2, \mathbf{r}_2)$ — корреляционная функция флуктуаций векторного потенциала; выражение (76.2) есть компонента фурье-разложения этой функции по $t = t_1 - t_2$. Поскольку электрическая напряженность

$$\mathbf{E} = -\frac{\dot{\mathbf{A}}}{c},$$

то такая же функция для компонент $\mathbf{E}$

$$\varphi_{ik}^E = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t_1 \partial t_2} \varphi_{ik}^A = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \varphi_{ik}^A,$$

или, в фурье-компонентах:

$$(E_i^{(1)} E_k^{(2)})_\omega = \frac{\omega^2}{c^2} (A_i^{(1)} A_k^{(2)})_\omega. \quad (76.3)$$

Аналогичным образом, учитывая связь $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$, получим

$$(B_i^{(1)} B_k^{(2)})_\omega = \text{rot}_{il}^{(1)} \text{rot}_{km}^{(2)} (A_l^{(1)} A_m^{(2)})_\omega, \quad (76.4)$$

$$(E_i^{(1)} B_k^{(2)})_\omega = \frac{i\omega}{c} \text{rot}_{km}^{(2)} (A_i^{(1)} A_m^{(2)})_\omega. \quad (76.5)$$

Выражая корреляционные функции электромагнитных флуктуаций через запаздывающую функцию Грина, формулы (76.2)–(76.5) сводят задачу об их вычислении к решению дифференциального уравнения (75.15) или (75.16) с надлежащими краевыми условиями на заданных границах тел¹⁾.

Ниже мы будем считать, что среда немагнитоактивна. Тогда функция D_{ik} обладает свойством симметрии (75.12) и выражение (76.2) принимает вид

$$(A_i^{(1)} A_k^{(2)})_\omega = -\text{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \text{Im} D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (76.6)$$

Обратим внимание на то, что выражение (76.6) вещественно. Вместе с ним вещественны и (76.3), (76.4), а (76.5) — мнимо. Это значит, что функции временной корреляции компонент $\mathbf{E}$ и компонент $\mathbf{B}$ друг с другом четны по времени $t = t_1 - t_2$ (как и должно быть для корреляции между величинами, которые обе четны или обе нечетны по отношению к обращению времени). Функция же временной корреляции компонент $\mathbf{E}$ с компонентами $\mathbf{B}$ нечетна по времени (как и должно быть для двух величин, из которых одна четна, а другая нечетна относительно обращения времени). Отсюда следует, что значения $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$ в одинаковый момент времени не коррелированы друг с другом (нечетная функция t обращается в нуль при $t = 0$). Вместе с корреляционной функцией обращаются в нуль также и средние значения от любых билинейных по (взятым в одинаковый момент времени) $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$ выражений, например, от вектора Пойнтинга. Последнее обстоятельство, впрочем, заранее очевидно: в теле находящемся в тепловом равновесии и инвариантном относительно обращения времени, не может быть внутренних макроскопических потоков энергии.

§ 77. Электромагнитные флуктуации в неограниченной среде

В однородной неограниченной среде функции $D_{ik}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ зависят только от разности $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$, причем четны по этой переменной (уравнение (75.15) содержит только вторые производные

¹⁾ Теория электромагнитных флуктуаций была развита в другой форме С. М. Рытовым (1953), а в форме, эквивалентной (76.2)–(76.5), — М. Л. Левинным и С. М. Рытовым (1967).

по координатам, и потому $D_{ik}(\omega; \mathbf{r})$ и $D_{ik}(\omega; -\mathbf{r})$ удовлетворяют одному и тому же уравнению). Взяв фурье-компоненты по $\mathbf{r}$ от обеих сторон равенства (76.2), получим

$$(A_i^{(1)} A_k^{(2)})_{\omega \mathbf{k}} = \frac{i}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T} \{D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}) - [D_{ki}^R(\omega, \mathbf{k})]^*\}. \quad (77.1)$$

Для немагнитоактивных сред, с учетом (75.12), эта формула записывается в виде

$$(A_i^{(1)} A_k^{(2)})_{\omega \mathbf{k}} = -\operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T} \operatorname{Im} D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}). \quad (77.2)$$

В изотропной немагнитной ($\mu = 1$) среде функция $D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k})$ дается формулой (75.20). Задача же об определении пространственной корреляционной функции флуктуаций сводится к вычислению интеграла

$$D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}) = \int D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (77.3)$$

Интегрирование осуществляется формулами

$$\begin{aligned} \int \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{k^2 + \kappa^2} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} &= \frac{e^{-\kappa r}}{4\pi r}, \\ \int \frac{k_i k_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{k^2 + \kappa^2} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} &= -\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \frac{e^{-\kappa r}}{4\pi r}, \end{aligned} \quad (77.4)$$

из которых первая получается путем взятия компонент Фурье от известного равенства

$$(\Delta - \kappa^2) \frac{e^{-\kappa r}}{r} = -4\pi \delta(\mathbf{r}), \quad (77.5)$$

а вторая получается дифференцированием первой. В результате найдем

$$D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}) = -\hbar \left[\delta_{ik} + \frac{c^2}{\omega^2 \varepsilon} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \right] \frac{1}{r} \exp \left(-\frac{\omega}{c} \sqrt{-\varepsilon} r \right), \quad (77.6)$$

где $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, а корень $\sqrt{-\varepsilon}$ должен быть взят с таким знаком, чтобы было $\operatorname{Re} \sqrt{-\varepsilon} > 0$; для пустоты надо положить $\varepsilon = 1$, $\sqrt{-\varepsilon} = -i$ (см. ниже).

Отсюда, согласно (76.6) и (76.3), сразу находим

$$\begin{aligned} (E_i^{(1)} E_k^{(2)})_{\omega} &= \\ &= \hbar \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\varepsilon \omega^2}{c^2} \delta_{ik} + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \right] \frac{1}{r} \exp \left(-\frac{\omega}{c} \sqrt{-\varepsilon} r \right) \right\} \end{aligned} \quad (77.7)$$

(С. М. Рытов, 1953). Свернув это выражение по индексам i, k (и воспользовавшись формулой (77.5)), получим

$$(\mathbf{E}^{(1)} \mathbf{E}^{(2)})_{\omega} = 2\hbar \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\varepsilon\omega^2}{c^2 r} \exp\left(-\frac{\omega}{c} \sqrt{-\varepsilon} r\right) + 2\pi\delta(\mathbf{r}) \right] \right\}. \quad (77.8)$$

Аналогичным образом, вычисление по формуле (76.4) приводит к выражениям для корреляционных функций магнитного поля, отличающихся от (77.7), (77.8) отсутствием множителя $1/\varepsilon$ перед квадратной скобкой; при этом член с δ -функцией под знаком Im в (77.8) становится вещественным и выпадает из ответа. Связь выражений (77.7), (77.8) с мнимой частью ε ясно подчеркивает связь электромагнитных флуктуаций с поглощением в среде. Но если произвести переход к пределу $\operatorname{Im} \varepsilon \rightarrow 0$ в формулах (77.7), (77.8), мы получим конечные, отличные от нуля выражения. Это обстоятельство связано с порядком перехода к двум пределам — бесконечным размерам среды и равной нулю $\operatorname{Im} \varepsilon$. Поскольку в бесконечной среде уже сколь угодно малое $\operatorname{Im} \varepsilon$ приводит в конце концов к поглощению, то при использованном нами порядке перехода к пределам получающийся результат относится к физической прозрачной среде, в которой, как и во всякой реальной среде, сколько-нибудь отличное от нуля поглощение все же имеется.

Произведем, например, указанный переход в формуле (77.8). Для этого замечаем, что при малом положительном $\operatorname{Im} \varepsilon$ (при $\omega > 0$)

$$\sqrt{-\varepsilon} \approx -i\sqrt{\operatorname{Re} \varepsilon} \left(1 + i \frac{\operatorname{Im} \varepsilon}{2\operatorname{Re} \varepsilon}\right)$$

(с учетом требования $\operatorname{Re} \sqrt{-\varepsilon} > 0$). Поэтому в пределе $\operatorname{Im} \varepsilon \rightarrow 0$ получим

$$(\mathbf{E}^{(1)} \mathbf{E}^{(2)})_{\omega} = \frac{1}{n^2} (\mathbf{H}^{(1)} \mathbf{H}^{(2)})_{\omega} = \frac{2\omega^2 \hbar}{c^2 r} \sin \frac{\omega n r}{c} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T}, \quad (77.9)$$

где $n = \sqrt{\varepsilon}$ — вещественный показатель преломления. Ввиду отсутствия члена с δ -функцией это выражение остается конечным и при совпадающих точках $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$:

$$(\mathbf{E}^{(2)})_{\omega} = \frac{1}{n^2} (\mathbf{H}^{(2)})_{\omega} = \frac{2\omega^2 \hbar n}{c^3} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T}. \quad (77.10)$$

Предельный переход к случаю прозрачной среды можно было бы произвести и на более ранней стадии вычислений — в гриновской функции. Учтя, что знак $\operatorname{Im} \varepsilon(\omega)$ совпадает со знаком ω ,

найдем, что в этом пределе функция (75.20) принимает вид

$$D_{ik}^R(\omega; \mathbf{k}) = \frac{4\pi\hbar}{\omega^2 n^2 / c^2 - k^2 + i0 \cdot \text{sign } \omega} \left[\delta_{ik} - \frac{c^2 k_i k_k}{\omega^2 n^2} \right] \quad (77.11)$$

(М. И. Рязанов, 1957). Мнимая часть этой функции связана только с правилом обхода полюсов $\omega = \pm ck/n$; отделив ее с помощью формулы (8.11) и подставив в (77.2), получим

$$(E_i^{(1)} E_k^{(2)})_{\omega \mathbf{k}} = \frac{2\pi^2 \hbar}{k} \left(\frac{\omega^2}{c^2} \delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{n^2} \right) \left\{ \delta \left(\frac{n\omega}{c} - k \right) - \delta \left(\frac{n\omega}{c} + k \right) \right\} \text{cth} \frac{\hbar\omega}{2T}. \quad (77.12)$$

Аргументы δ -функции в этом выражении имеют простой физический смысл: они показывают, что флуктуации поля с заданным значением $\mathbf{k}$ распространяются в пространстве со скоростью c/n , совпадающей со скоростью распространения электромагнитных волн в данной среде. Фурье-обращением выражения (77.12) можно, разумеется, снова получить (77.7).

Энергия флуктуационного электромагнитного поля в прозрачной среде $\mu = 1$ в спектральном интервале $d\omega$ дается (в единице объема пространства) выражением

$$\frac{1}{8\pi} \left[2 (\mathbf{E}^2)_{\omega} \frac{d(\omega\varepsilon)}{d\omega} + 2 (\mathbf{H}^2)_{\omega} \right] \frac{d\omega}{2\pi}$$

(см. VIII, § 80)¹). Подставив сюда (77.10), получим после простого преобразования

$$\left[\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right] \frac{\omega^2 n^2}{\pi^2 c^3} \frac{d(n\omega)}{d\omega} d\omega. \quad (77.13)$$

Первый член в скобках связан с нулевыми колебаниями поля. Второй же член дает энергию термодинамически равновесного электромагнитного излучения в прозрачной среде, т. е. энергию *черного излучения*. Эту часть формулы можно было бы получить и без рассмотрения флуктуаций, путем соответствующего обобщения формулы Планка для черного излучения в пустоте.

¹) Полная энергия получается интегрированием по $d\omega$ от 0 до ∞ ; множители же 2 в квадратных скобках связаны с тем, что по принятому нами определению спектральных функций флуктуаций среднее значение $\langle x^2 \rangle$ получается интегрированием $\langle x^2 \rangle_{\omega}$ по $d\omega/2\pi$ от $-\infty$ до ∞ (см. V, (122.6)).

Согласно последней, энергия черного излучения (в единице объема) в интервале волновых векторов d^3k дается формулой

$$\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \frac{2d^3k}{(2\pi)^3}$$

(множитель 2 учитывает два направления поляризации). Соответственно для получения спектральной плотности энергии надо заменить d^3k на $4\pi k^2 dk$ и подставить $k = \omega/c$. Для перехода же от пустоты к прозрачной среде достаточно положить $k = n\omega/c$, т. е. написать

$$k^2 dk = k^2 \frac{dk}{d\omega} d\omega = \frac{\omega^2 n^2}{c^3} \frac{d(n\omega)}{d\omega} d\omega,$$

что и дает требуемый результат.

Задачи

1. Найти флуктуации электромагнитного поля вдали от тела, погруженного в прозрачную разреженную среду, с которой оно находится в тепловом равновесии; длина волны излучения и расстояние от тела к точке наблюдения велики по сравнению с размерами тела. Тело обладает анизотропной электрической поляризуемостью $\alpha_{ik}(\omega)$.

Решение. Разреженную прозрачную среду рассматриваем как вакуум. Искомые флуктуации определяются малым (на больших расстояниях) изменением вакуумной функции Грина, вызванным присутствием тела. Для вычисления этого изменения исходим из аналогии, согласно которой вакуумную функцию $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ (при заданном индексе k) можно формально рассматривать как электрическое поле $E_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, создаваемое в точке $\mathbf{r}$ некоторым источником, находящимся в точке $\mathbf{r}'$. Эта аналогия основана на том, что поле $E_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ (как и его потенциал $A_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$) удовлетворяет при $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ такому же уравнению, как и функция $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — уравнение (75.16) с $\varepsilon = 1$. Пусть тело находится в точке $\mathbf{r} = 0$. Поле

$$E_l(0, \mathbf{r}') = D_{lk}^R(\omega; 0, \mathbf{r}') \equiv D_{lk}^R(\omega; \mathbf{r}')$$

(где $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r})$ — гриновская функция в пустоте в отсутствие тела, даваемая выражением (77.6) с $\varepsilon = 1$) поляризует тело, создавая тем самым в точке $\mathbf{r} = 0$ дипольный момент $d_i = \alpha_{il} D_{lk}^R(\omega; 0, \mathbf{r}')$. Поле же, создаваемое, в свою очередь, этим дипольным моментом в точке $\mathbf{r}$, и дает искомое изменение $\delta D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Согласно известной из электродинамики формуле (см. II, § 72), поле, создаваемое в точке $\mathbf{r}$ находящимся в точке $\mathbf{r} = 0$ дипольным моментом $\mathbf{d}$ (зависящим от времени как $e^{-i\omega t}$), есть

$$E_i = d_l \left[\frac{\omega^2}{c^2} \delta_{il} + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_l} \right] \frac{e^{i\omega r/c}}{r},$$

причем расстояние r должно быть большим только по сравнению с размером

тела, но не с длиной волны; это выражение можно представить в виде

$$E_i = -\frac{\omega^2}{\hbar c^2} D_{il}^R(\omega; \mathbf{r}) d_l$$

(напомним, что функция $D_{il}^R(\omega; \mathbf{r})$ четна по переменной $\mathbf{r}$). С написанным выше дипольным моментом находим, следовательно,

$$\delta D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{\omega^2}{\hbar c^2} D_{il}^R(\omega; \mathbf{r}) \alpha_{lm} D_{mk}^R(\omega; \mathbf{r}').$$

Искомые корреляционные функции флуктуаций даются теперь общими формулами (76.3)–(76.6) с δD_{ik}^R вместо D_{ik}^R . Окончательно получаем

$$\delta(A_i^{(1)} A_k^{(2)})_\omega = \frac{2\omega^2}{\hbar c^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right\} \text{Im} [D_{il}^R(\omega; \mathbf{r}_1) \alpha_{lm} D_{mk}^R(\omega; \mathbf{r}_2)]. \quad (1)$$

Напомним, что тело находится в точке $\mathbf{r} = 0$, а $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ — две точки вдали от тела. Отметим, что вклад во флуктуации возникает не только от мнимой, но и от вещественной части поляризуемости; последний можно рассматривать как результат рассеяния на теле черного излучения, заполняющего прозрачную среду.

2. То же для тела с магнитной поляризуемостью $\alpha_{ik}(\omega)^1$.

Решение. В этом случае рассматриваем $\text{rot}_{il} D_{lk}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ как магнитное поле $H_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, создаваемое в точке $\mathbf{r}$ источником, находящимся в точке $\mathbf{r}'$ (уравнение того же вида, что и для функции D_{ik}^R , удовлетворяет не само поле H_i , а его потенциал A_i). Это поле намагничивает тело, создавая в точке $\mathbf{r} = 0$ магнитный момент

$$m_i = -\alpha_{il} \text{rot}'_{lm} D_{mk}^R(\omega; 0, \mathbf{r}')$$

(дифференцирование по $\mathbf{r}$ заменено дифференцированием по $\mathbf{r}'$ с учетом того, что D_{mk}^R зависит только от разности $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$). Искомое же изменение гриновской функции совпадает с векторным потенциалом магнитного поля, создаваемого этим магнитным моментом в точке $\mathbf{r}$:

$$A_i = \text{rot}_{il} \left[\frac{1}{r} m_l e^{i\omega r/c} \right]$$

(см. II, § 72, задача 1). Таким образом,

$$\delta D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \left(\text{rot}_{il} \frac{e^{i\omega r/c}}{r} \right) \alpha_{lm} \text{rot}'_{mn} D_{nk}^R(\omega; 0, \mathbf{r}').$$

Наконец, подставив D_{nk}^R из (77.6), находим

$$\delta D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \hbar \left(\text{rot}_{il} \frac{e^{i\omega r/c}}{r} \right) \alpha_{lm} \text{rot}'_{mk} \frac{e^{i\omega r'/c}}{r'} \quad (2)$$

(использовано, что $\text{rot}_{mn} \nabla_n = e_{mkn} \nabla_k \nabla_n \equiv 0$).

¹) Наличие магнитной поляризуемости не обязательно означает, что тело состоит из магнитного материала. Так, речь может идти о вытеснении магнитного поля из тела за счет скин-эффекта.

3. Определить флуктуации электромагнитного поля в условиях задачи 1, считая, однако, что температура среды много ниже температуры тела.

Решение. Вычисленное в задаче 1 поле естественно делится, в соответствии с наличием двух членов в фигурной скобке в (1), на нулевые флуктуации и тепловое черное излучение. Последнее, в свою очередь, состоит из двух частей — теплового излучения самого тела и поля, возникшего при рассеянии черного излучения среды на теле. Если температура среды низка, вторая часть отсутствует. Для решения задачи мы вычислим ее отдельно, а затем вычтем из (1). Положим $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}^{(0)} + \mathbf{A}^{(s)}$, где $\mathbf{A}^{(0)}$ — флуктуационное поле в отсутствие тела, а $\mathbf{A}^{(s)}$ — поле, рассеянное телом. На больших расстояниях, где $\mathbf{A}^{(s)}$ мало, можно при вычислении $\delta(A_{i1}A_{k2})_\omega$ пренебречь членами квадратичными по $\mathbf{A}^{(s)}$. Для вклада от рассеяния имеем поэтому

$$\delta^{(s)}(A_{i1}A_{k2})_\omega \approx (A_{i1}^{(s)}A_{k2}^{(0)})_\omega + (A_{i1}^{(0)}A_{k2}^{(s)})_\omega = (A_{i1}^{(s)}A_{k2}^{(0)})_\omega + (A_{k2}^{(s)}A_{i1}^{(0)})_\omega^*.$$

Рассеянное поле снова дается формулой из II, § 72, но теперь под дипольным моментом надо понимать просто момент, индуцированный черным излучением: $d_i = \alpha_{ik}A_k^{(0)}(0)$. Введя опять гриновскую функцию в вакууме в отсутствие тела, имеем

$$A_i^{(s)}(\mathbf{r}_1) = -\frac{\omega^2}{\hbar c^2} D_{il}^R(\omega; \mathbf{r}_1) \alpha_{lm}(\omega) A_m^{(0)}(0),$$

так что

$$(A_{il}^{(s)}A_{k2}^{(0)})_\omega = -\frac{\omega^2}{\hbar c^2} D_{il}^R(\omega; \mathbf{r}_1) \alpha_{lm}(\omega) (A_m^{(0)}(0)A_k^{(0)}(\mathbf{r}_2))_\omega.$$

Корреляционную функцию $(A_{m1}^{(0)}A_{k2}^{(0)})_\omega$ берем снова из (76.2). При этом, поскольку нас интересует только тепловое излучение, надо опустить в этой формуле нулевые колебания, т. е. заменить

$$\frac{1}{2} \coth \frac{\hbar\omega}{2T} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} + \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1}.$$

В результате находим для вклада рассеянного черного излучения в корреляционную функцию

$$\begin{aligned} \delta^{(s)}(A_{i1}A_{k2})_\omega = & \frac{2\omega^2}{\hbar c^2(e^{\hbar\omega/T} - 1)} [D_{il}^R(\omega; \mathbf{r}_1) \alpha_{lm} \operatorname{Im} D_{mk}^R(\omega; \mathbf{r}_2) + \\ & + D_{kl}^{R*}(\omega; \mathbf{r}_2) \alpha_{lm}^* \operatorname{Im} D_{mi}^R(\omega; \mathbf{r}_1)]. \quad (3) \end{aligned}$$

Окончательно, чтобы найти флуктуационное поле в холодной среде, надо вычесть (3) из (1). После простых преобразований с использованием симметрии тензоров D_{ik} и α_{ik} получим

$$\delta^{(T)}(A_{i1}A_{k2})_\omega = \frac{2\omega^2}{\hbar c^2(e^{\hbar\omega/T} - 1)} D_{il}^R(\omega; \mathbf{r}_1) [\operatorname{Im} \alpha_{lm}(\omega)] D_{mk}^{R*}(\omega; \mathbf{r}_2) \quad (4)$$

(T — температура тела). Здесь выписан лишь тепловой член; член с нулевыми колебаниями в (1) остается без изменений. Обратим внимание на то, что выражение (4), определяющее тепловое излучение тела, зависит от мнимой части поляризуемости. Поток энергии, вычисленный по выражению (4), уже не равен нулю, а дает интенсивность теплового излучения нагретого тела в окружающую холодную среду.

§ 78. Флуктуации тока в линейных цепях

Еще одно интересное применение флуктуационно-диссипационной теоремы представляет вопрос о флуктуациях тока в линейных цепях, впервые рассмотренный *Найквистом* (*Н. Nyquist*, 1928).

Флуктуации тока представляют собой свободные (т. е. происходящие в отсутствие приложенной извне электродвижущей силы) электрические колебания в проводнике. В линейной замкнутой цепи наибольший интерес представляют, естественно, те колебания, при которых возникает текущий вдоль провода полный ток J . Ниже мы предполагаем выполненным условие квазистационарности — размеры цепи малы по сравнению с длиной волны $\lambda \sim c/\omega$. Тогда полный ток J одинаков во всех участках цепи и является функцией лишь от времени.

Выберем этот ток J в качестве величины $x(t)$, фигурирующей в общей формулировке флуктуационно-диссипационной теоремы в V, § 124. Для того чтобы выяснить смысл соответствующей обобщенной восприимчивости α , предположим, что в цепи действует внешняя электродвижущая сила $\mathcal{E}$. Тогда диссипация энергии в цепи $Q = J\mathcal{E}$. Сравнив с выражением $Q = -\bar{x}\dot{f}$, служащим определением «силы» f (см. V, (123.10), мы видим, что $\dot{f} = -\mathcal{E}$ или для фурье-компонент $\mathcal{E}_\omega = i\omega f_\omega$. С другой стороны, ток и ЭДС в линейной цепи связаны соотношением $\mathcal{E}_\omega = Z(\omega)J_\omega$, где $Z(\omega)$ — комплексное сопротивление (импеданс) цепи. Поэтому имеем

$$J_\omega = \mathcal{E}_\omega / Z = i\omega f_\omega / Z$$

и, сравнив с определением обобщенной восприимчивости в соотношении $(\bar{x})_\omega = \alpha(\omega)f$, находим $\alpha(\omega) = i\omega / Z(\omega)$. Ее мнимая часть:

$$\text{Im } \alpha = \text{Im } \frac{i\omega}{Z} = \frac{\omega}{|Z|^2} R(\omega),$$

где $R = \text{Re } Z$.

Согласно флуктуационно-диссипационной теореме,

$$(x^2)_\omega = \hbar \text{cth } \frac{\hbar\omega}{2T} \cdot \text{Im } \alpha(\omega),$$

находим теперь для спектральной функции флуктуаций тока

$$(J^2)_\omega = \frac{\hbar\omega}{|Z(\omega)|^2} R(\omega) \text{cth } \frac{\hbar\omega}{2T}. \quad (78.1)$$

Эту формулу можно представить в другом виде, описывая флуктуации тока как результат действия «случайной» ЭДС $\mathcal{E}_\omega = ZJ_\omega$. Для нее имеем

$$(\mathcal{E}^2)_\omega = \hbar\omega R(\omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T}. \quad (78.2)$$

В классическом случае ($\hbar\omega \ll T$)

$$(\mathcal{E}^2)_\omega = 2TR(\omega). \quad (78.3)$$

Подчеркнем лишний раз, что эти формулы совершенно не зависят от природы явлений, ответственных за дисперсию сопротивления цепи.

§ 79. Температурная функция Грина фотона в среде

Температурная функция Грина фотона в среде строится по мацубаровским операторам потенциалов электромагнитного поля подобно тому, как временная функция Грина (75.2) строится из гейзенберговских операторов:

$$\mathcal{D}_{ik} = -\langle T_\tau \hat{A}_i^M(\tau_1, \mathbf{r}_1) \hat{A}_k^M(\tau_1, \mathbf{r}_2) \rangle. \quad (79.1)$$

Здесь учтено, что в силу эрмитовости предингерговских операторов поля мацубаровские операторы $\hat{\mathbf{A}}^M$ и $\hat{\bar{\mathbf{A}}}^M$ (определенные согласно (37.1)) совпадают друг с другом. Эти операторы, однако (в отличие от гейзенберговских), сами уже не эрмитовы; ввиду вещественности параметра τ имеем

$$[\hat{\mathbf{A}}^M(\tau, \mathbf{r})]^+ = [e^{\tau\hat{H}'/\hbar} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) e^{-\tau\hat{H}'/\hbar}]^+ = e^{-\tau\hat{H}'/\hbar} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) e^{\tau\hat{H}'/\hbar}$$

или

$$[\hat{\mathbf{A}}^M(\tau, \mathbf{r})]^+ = \hat{\mathbf{A}}^M(-\tau, \mathbf{r}).$$

Поскольку функция (79.1) зависит только от разности $\tau = \tau_1 - \tau_2$ (ср. § 37), то можно написать (положив, например, $\tau > 0$)

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{ik}(\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= -\langle \hat{A}_i^M(\tau; \mathbf{r}_1) \hat{A}_k^M(0, \mathbf{r}_2) \rangle, \\ \mathcal{D}_{ik}(-\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= -\langle \hat{A}_k^M(\tau; \mathbf{r}_2) \hat{A}_i^M(0, \mathbf{r}_1) \rangle. \end{aligned}$$

Из сравнения этих двух выражений видно, что

$$\mathcal{D}_{ik}(-\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{D}_{ki}(\tau; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (79.2)$$

Функция $\mathcal{D}_{ik}$ может быть разложена в ряд Фурье по переменной τ :

$$\mathcal{D}_{ik}(\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-i\zeta_s \tau}, \quad (79.3)$$

причем «частоты» ζ_s пробегают (ввиду статистики Бозе, которой подчиняются фотоны) значения $\hbar\zeta_s = 2\pi sT$ (ср. (37.8)). Для компонент этого разложения из (79.2) следует аналогичное соотношение

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{D}_{ki}(-\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (79.4)$$

Согласно общему соотношению (37.12) эти компоненты связаны с запаздывающей функцией Грина равенством

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = D_{ik}^R(i\zeta_s; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

при положительных ζ_s . В §75 было показано, что функции $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ можно в известном смысле рассматривать как обобщенные восприимчивости, фигурирующие в общей теории отклика макроскопической системы на внешнее воздействие. Отсюда следовало свойство симметрии этих функций, выражаемое (для немагнитоактивных сред) равенством (75.12), а ввиду связи между функциями D_{ik}^R и $\mathcal{D}_{ik}$ таким же свойством обладают и последние:

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{D}_{ki}(\zeta_s; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (79.5)$$

Из этого равенства, вместе с равенством (79.4), следует теперь, что функции $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ четны по дискретной переменной ζ_s , так что при всех (положительных и отрицательных) ее значениях имеем

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = D_{ik}^R(i|\zeta_s|; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (79.6)$$

Далее, функция $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, как и всякая обобщенная восприимчивость, вещественна на верхней мнимой полуоси ω (см. V, § 123); из (79.6) следует поэтому, что функция $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ вещественна при всех значениях ζ_s . Наконец, из этих свойств следует, в свою очередь, что и исходная функция $\mathcal{D}_{ik}(\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ вещественна и четна по переменной τ :

$$\mathcal{D}_{ik}(\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{D}_{ik}(-\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (79.7)$$

Связь (79.6) между температурной и запаздывающей функциями Грина позволяет сразу написать дифференциальное уравнение, которому должна удовлетворять функция $\mathcal{D}_{ik}$ в неоднородной среде; для этого достаточно произвести замену $\omega \rightarrow i|\zeta_s|$

в уравнении (75.15) или (75.16). Так, для изотропной немагнито-активной среды с $\mu = 1$ находим уравнение

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_l} - \delta_{il} \Delta + \frac{\zeta_s^2}{c^2} \varepsilon(i|\zeta_s|, \mathbf{r}) \delta_{il} \right] \mathcal{D}_{lk}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\hbar \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (79.8)$$

Для однородной неограниченной среды функция $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ разлагается в интеграл Фурье по разности $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Компоненты этого разложения удовлетворяют системе алгебраических уравнений

$$\frac{1}{4\pi\hbar} \left[k_i k_l - \delta_{il} k^2 - \delta_{il} \frac{\zeta_s^2}{c^2} \varepsilon(i|\zeta_s|) \right] \mathcal{D}_{lk}(\zeta_s; \mathbf{k}) = \delta_{ik} \quad (79.9)$$

и даются формулой¹⁾

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{k}) = -\frac{4\pi\hbar}{\zeta_s^2 \varepsilon(i|\zeta_s|)/c^2 + k^2} \left[\delta_{ik} + \frac{c^2 k_i k_k}{\zeta_s^2 \varepsilon(i|\zeta_s|)} \right]. \quad (79.10)$$

Поскольку функция $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{k})$ выражается (в длинноволновой области $ka \ll 1$) через $\varepsilon(\omega)$, то диаграммная техника для ее вычисления становится самым техникой для вычисления диэлектрической проницаемости среды. При этом последняя имеет также и определенный диаграммный смысл, который будет сейчас выяснен.

Будем изображать точную $\mathcal{D}$ -функцию жирной, а функцию $\mathcal{D}^{(0)}$ в вакууме — тонкой штриховой линией по правилу²⁾

$$\text{-----} = -\mathcal{D}_{ik}, \quad \text{-----} = -\mathcal{D}_{ik}^{(0)}. \quad (79.11)$$

Вся совокупность диаграмм, изображающих $\mathcal{D}$ -функцию, может быть изображена рядом (вполне аналогичным ряду (14.3) для функции G):

$$\text{-----} = \text{-----} + \text{---} \bigcirc \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} + \dots, \quad (79.12)$$

где кружок изображает совокупность диаграммных блоков, не распадающихся на две части, связанные только одной штриховой линией; обозначим эту совокупность через $-\mathcal{P}_{ik}/4\pi$.

¹⁾ В реальных применениях (ср. § 80) функция $\mathcal{D}_{ik}$ всегда фигурирует в произведении с ζ_s^2 ; поэтому расходимость при $\zeta_s=0$ фактически устраняется.

²⁾ Использование штриховой линии для обозначения $\mathcal{D}$ -функций не может вызвать здесь недоразумений, так как в этом и следующем параграфах не будет фигурировать в явном виде энергия парного взаимодействия частиц среды (для которой ранее использовалось это обозначение).

Функцию $\mathcal{P}_{ik}$ (аналогичную собственно-энергетической части гриновской функции частиц) называют *поляризационным оператором*.

Диаграммное равенство (79.12) эквивалентно уравнению

$$\text{-----} = \text{-----} + \text{---} \bigcirc \text{---} \quad (79.13)$$

(ср. переход от (14.3) к (14.4)). В аналитическом виде оно дает

$$\mathcal{D}_{ik} = \mathcal{D}_{ik}^{(0)} + \mathcal{D}_{il}^{(0)} \frac{\mathcal{P}_{lm}}{4\pi} \mathcal{D}_{mk} \quad (79.14)$$

(все множители — функции одинаковых аргументов $\zeta_s, \mathbf{k}$). Умножив это равенство справа на обратный тензор $\mathcal{D}^{-1}$ и слева — на $\mathcal{D}^{(0)-1}$, перепишем его в виде

$$\mathcal{D}_{ik}^{-1} = \mathcal{D}_{ik}^{(0)-1} - \frac{\mathcal{P}_{ik}}{4\pi}. \quad (79.15)$$

Наконец, взяв $\mathcal{D}_{ik}^{-1}$ из левой стороны уравнения (79.9) и такое же выражение с $\varepsilon = 1$ для $\mathcal{D}_{ik}^{(0)-1}$, найдем

$$\mathcal{P}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{k}) = -\frac{\zeta_s^2}{\hbar c^2} [\varepsilon(i|\zeta_s|) - 1] \delta_{ik}, \quad (79.16)$$

чем и определяется диаграммный смысл функции $\varepsilon(\omega) - 1$ в дискретном множестве точек на верхней мнимой полуоси ω . Аналитическое продолжение функции $\varepsilon(i|\zeta_s|)$ на всю верхнюю полуплоскость должно, в принципе, производиться с учетом того, что $\varepsilon(\omega)$ не должна иметь особенностей в этой полуплоскости и что $\varepsilon(\omega) \rightarrow 1$ при $|\omega| \rightarrow \infty^1$.

В неоднородной среде поляризационный оператор является (как и $\mathcal{D}_{ik}$) функцией координат двух точек. Повторив весь вывод в координатном представлении, получим вместо (79.14) уравнение

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{ik}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \\ &= \mathcal{D}_{ik}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \frac{1}{4\pi} \int \mathcal{D}_{il}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) \mathcal{P}_{lm}(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) \mathcal{D}_{mk}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_2) d^3x_3 d^3x_4 \end{aligned}$$

¹⁾ Для анизотропной среды надо писать

$$\mathcal{P}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{k}) = (\zeta_s^2/\hbar c^2) [\varepsilon_{ik}(i|\zeta_s|) - \delta_{ik}].$$

Отметим, что в таком виде это выражение остается справедливым и при наличии пространственной дисперсии, когда ε_{ik} зависит не только от частоты, но и от волнового вектора.

(аргументы ζ_s для краткости не выписываем). Подействовав на это равенство слева оператором

$$\frac{\partial^2}{\partial x_{1n} \partial x_{1l}} - \delta_{nl} \Delta_1 + \frac{\zeta_s^2}{c^2} \delta_{nl}$$

и учтя, что $D^{(0)}$ удовлетворяет уравнению (79.8) с $\varepsilon = 1$, получим

$$\int \mathcal{P}_{il}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \mathcal{D}_{lk}(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2) d^3 x' = [\varepsilon(\mathbf{r}_1) - 1] \frac{\zeta_s^2}{\hbar c^2} \mathcal{D}_{ik}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

откуда

$$\mathcal{P}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\zeta_s^2}{\hbar c^2} \delta_{ik} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) [\varepsilon(i|\zeta_s|, \mathbf{r}_1) - 1]. \quad (79.17)$$

Структура конденсированной среды, а с нею и ее диэлектрические свойства определяются силами, действующими между ее частицами на расстояниях порядка атомных размеров a . На этих расстояниях можно (при нерелятивистских скоростях частиц) пренебречь запаздыванием взаимодействий, которое становится существенным лишь для длинноволновых (в смысле $ka \ll 1$) компонент поля; другими словами, при вычислении поляризационного оператора можно пренебречь длинноволновой частью поля. В диаграммах же для самой гриновской функции $\mathcal{D}_{ik}$ длинноволновое поле фигурирует лишь через тонкие штриховые линии в правой стороне (79.12).

Рассмотренный в этом параграфе трехмерный тензор $\mathcal{P}_{ik}$ является, конечно, лишь пространственной частью поляризационного 4-тензора $\mathcal{P}_{\mu\nu}$. Подчеркнем, во избежание недоразумений, что его временная $\mathcal{P}_{00}$ и смешанные $\mathcal{P}_{0i}$ компоненты отнюдь не равны нулю. Более того, как и в квантовой электродинамике, этот 4-тензор вообще не зависит от калибровки потенциалов. В нерелятивистской теории эта калибровочная инвариантность очевидна уже из указанной только что возможности вычисления поляризационного оператора с учетом одних только незапаздывающих сил, не зависящих от калибровки длинноволнового поля.

Компоненты $\mathcal{P}_{00}$ и $\mathcal{P}_{0i}$ можно найти из условия поперечности 4-тензора: $\mathcal{P}_{\mu\nu} k^\mu = 0$, где $k^\mu = (i\zeta_s, \mathbf{k})$ — волновой 4-вектор:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{00} &= -\frac{\mathbf{k}^2}{\hbar c^2} [\varepsilon(i|\zeta_s|) - 1], \\ \mathcal{P}_{0i} &= \frac{i\zeta_s k_i}{\hbar c^2} [\varepsilon(i|\zeta_s|) - 1]. \end{aligned} \quad (79.18)$$

§ 80. Тензор напряжений ван-дер-ваальсовых сил

Хотя структура конденсированных тел в основном определяется (как было отмечено в конце предыдущего параграфа) силами, действующими между его частицами на атомных расстояниях, определенный вклад в термодинамические величины тела (скажем, в его свободную энергию) вносят также и так называемые *ван-дер-ваальсовы силы* — силы, действующие между атомами на расстояниях, больших по сравнению с атомными размерами a . Напомним, что для свободных атомов энергия этого взаимодействия убывает с расстоянием, — как r^{-6} (см. III, § 89), а после того, как становятся существенными эффекты запаздывания, — как r^{-7} (см. IV, § 85). В конденсированной среде, разумеется, ван-дер-ваальсовы силы не сводятся к взаимодействию отдельных пар атомов. В то же время тот факт, что их радиус действия велик по сравнению с межатомными расстояниями, позволяет подойти к вопросу об их влиянии на термодинамические свойства тел с макроскопической точки зрения.

В макроскопической теории ван-дер-ваальсово взаимодействие в материальной среде рассматривается как осуществляющееся через длинноволновое электромагнитное поле (*Е. М. Лифшиц*, 1954); напомним, что это понятие включает в себя не только тепловые флуктуации, но и нулевые колебания поля. Важное свойство вклада этого взаимодействия в свободную энергию состоит в его неаддитивности: он не просто пропорционален объему тел, а зависит еще и от параметров, характеризующих их форму и взаимное расположение. Именно эта неаддитивность связанная с дальнедействующим характером ван-дер-ваальсовых сил, является тем свойством, которое выделяет их вклад в свободную энергию от гораздо большей ее аддитивной части. В макроскопической картине происхождение этого свойства связано с тем, что всякое изменение электрических свойств среды в некоторой области приводит в силу уравнений Максвелла к изменению флуктуационного поля и вне этой области. Фактически, конечно, эффекты неаддитивности оказываются заметными лишь при достаточно малых (хотя и больших по сравнению с атомными размерами) характерных размерах: для тонких пленок, для тел, разделенных узкой щелью, и т. п.

При вычислении вклада электромагнитных флуктуаций в свободную энергию каждый раз существенны длины волн порядка величины характерных размеров неоднородности среды (толщина пленки, ширина щели и т. п.). Именно это обстоятельство является в макроскопической теории причиной степенного закона убывания ван-дер-ваальсовых сил; если бы были существенны флуктуации с некоторой фиксированной длиной волны λ_0 , то это

привело бы к экспоненциальному закону убывания сил с показателем $\sim r/\lambda_0$. Далее, поскольку характерные размеры, а с ними и характерные длины волн флуктуаций много больше атомных размеров, все свойства этих флуктуаций и их вклад в свободную энергию полностью выражаются через комплексную диэлектрическую проницаемость тел.

Наша цель будет состоять в вычислении макроскопических сил, действующих в неоднородной среде¹). В качестве предварительного этапа вывода начнем с определения изменения свободной энергии среды при малом изменении ее диэлектрической проницаемости (магнитными свойствами вещества будем пренебрегать, т. е. магнитная проницаемость $\mu = 1$). Будем считать, что изменение ϵ вызывается изменением гамильтониана системы на некоторое малое δH . Тогда изменение свободной энергии

$$\delta F = \langle \delta \hat{H} \rangle, \quad (80.1)$$

где усреднение производится (при заданных температуре и объеме системы) по распределению Гиббса с невозмущенным гамильтонианом $\hat{H}$. Представим последний в виде²)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{дл}}, \quad \hat{V}_{\text{дл}} = - \int \hat{\mathbf{j}} \hat{\mathbf{A}} d^3x, \quad (80.2)$$

где $\hat{V}_{\text{дл}}$ описывает взаимодействие частиц с длинноволновым электромагнитным полем, а в $\hat{H}_0$ включены все остальные взаимодействия вместе с членами, отвечающими свободным частицам и фотонам (строго говоря, в интеграле в (80.2) должно подразумеваться обрезание на некотором волновом векторе $k_0 \ll 1/a$; в окончательный результат, однако, параметр обрезания не входит). Оператор $\hat{\mathbf{A}}$ — оператор векторного потенциала длинноволнового поля; существенно, что ответственный за изменение диэлектрической проницаемости оператор $\delta \hat{H}$ не содержит себе $\hat{\mathbf{A}}$, поскольку диэлектрическая проницаемость определяется лишь взаимодействием частиц на атомных расстояниях.

Перейдем теперь в (80.1) к мацубаровским операторам в представлении, которое можно назвать «длинноволновым представлением взаимодействия»: зависимость операторов от τ в этом представлении определяется всеми членами в гамильтониане,

¹) Излагаемая ниже теория принадлежит И. Е. Дзялошинскому и Л. П. Питаевскому (1959).

²) В этом параграфе полагаем $\hbar = 1$, $c = 1$.

за исключением лишь $\hat{V}_{\text{дл}}$. Тем же способом, как и при выводе (38.7), получим

$$\delta F = \frac{1}{\langle \hat{\sigma} \rangle_0} \langle T_\tau \delta \hat{H}^M \hat{\sigma} \rangle_0, \quad \hat{\sigma} = T_\tau \exp \int_0^{1/T} \hat{\mathbf{j}}^M \hat{\mathbf{A}}^M d^3x d\tau, \quad (80.3)$$

где $\langle \dots \rangle_0$ означает усреднение по распределению Гиббса с гамильтонианом $\hat{H}_0$. Согласно смыслу выбранного представления, мацубаровские операторы определены как

$$\hat{\mathbf{A}}^M(\tau, \mathbf{r}) = \exp(\tau \hat{H}_0) \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \exp(-\tau \hat{H}_0) \quad (80.4)$$

и аналогично для $\delta \hat{H}^M$ и для ψ -операторов, из которых составляется оператор тока частиц $\hat{\mathbf{j}}^{M1}$). Поскольку $\hat{H}_0$ не содержит взаимодействия длинноволновых фотонов с чем бы то ни было, то $\hat{\mathbf{A}}^M$ совпадает с оператором (мацубаровским) свободного фотонного поля; для ψ -операторов частиц это, конечно, не так, поскольку $\hat{H}_0$ включает в себя взаимодействие между частицами.

Следуя общим принципам построения диаграммной техники, разложим экспоненту в (80.3) по степеням $\hat{V}_{\text{дл}}^2$. При этом в каждом члене разложения произведение операторов свободного поля $\hat{\mathbf{A}}_M$ обычным образом усредняется в виде попарных сверток согласно теореме Вика. Нулевой член разложения, не содержащий $\hat{\mathbf{A}}^M$, дает δF_0 — изменение свободной энергии без учета длинноволновых флуктуаций. Следующий, линейный по $\hat{\mathbf{A}}^M$ член обращается в результате усреднения в нуль. В квадратичном же по полю члене свертка двух операторов $\langle \hat{A}_i^M \hat{A}_k^M \rangle$ дает $\mathcal{D}_{ik}^{(0)}$ — гриновскую функцию свободных фотонов; этот член можно изобразить диаграммой

$$\delta F^{(2)} = \frac{1}{2} \cdot \text{---} \circ \text{---} \quad (80.5)$$

(выделен численный множитель $1/2!$, возникающий при разложении экспоненты). Светлая штриховая кривая обозначает

¹⁾ Индекс 0, которым следовало бы снабдить дополнительно операторы в этом представлении, опускаем во избежание загромождения обозначений.

²⁾ Достаточно проследить за разложением числителя в выражении δF . Как обычно, роль множителя $\langle \hat{\sigma} \rangle_0$ в знаменателе сводится к устранению диаграмм, распадающихся на две или более несвязанных друг с другом частей.

где светлый кружок — поляризационный оператор $\mathcal{P}_{ik}/4\pi$. Вариация же этой функции даст, следовательно, диаграмму (80.7) с $\delta\mathcal{P}_{ik}/4\pi$ в качестве заштрихованного кружка.

Все дальнейшие члены разложения в (80.3) представляют собой поправки различных порядков к штриховой линии и к кружку на диаграмме (80.5). Эти поправки превращают штриховую линию в точную функцию $\mathcal{D}_{ik}$. Длинноволновые же поправки к $\delta\mathcal{P}_{ik}$, как уже говорилось, малы, так что под $\delta\mathcal{P}_{ik}$ сразу можно понимать вариацию точного поляризационного оператора.

В аналитическом виде этот результат записывается (после перехода к фурье-разложению по переменной τ) как ¹⁾

$$\delta F = \delta F_0 - \frac{1}{2} \sum_{s=-\infty}^{\infty} T \int \mathcal{P}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \frac{1}{4\pi} \delta \mathcal{P}_{ki}(\zeta_s; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) d^3 x_1 d^3 x_2. \quad (80.8)$$

Согласно (79.17) изменение поляризационного оператора выражается (для изотропной среды) через изменение диэлектрической проницаемости:

$$\delta \mathcal{P}_{ki}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \zeta_s^2 \delta_{ki} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta \varepsilon(i|\zeta_s|, \mathbf{r}_1);$$

наличие здесь δ -функции устраняет одно из интегрирований в (80.8). Учитывая также четность функции $\mathcal{D}_{ik}$ по ζ_s , перепишем (80.8) в виде

$$\delta F = \delta F_0 - \frac{T}{4\pi} \sum_{s=0}^{\infty} \int \zeta_s^2 \mathcal{D}_{ll}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \delta \varepsilon(i|\zeta_s|, \mathbf{r}) d^3 x, \quad (80.9)$$

где суммирование производится только по положительным значениям s ; штрих у знака суммы означает, что нулевой член должен быть взят с множителем $1/2$ (этот член имеет конечное значение: множитель ζ_s^2 устраняет расходимость в $\mathcal{D}_{ll}$ при $\zeta_s = 0$).

Для записи дальнейших формул будет удобно ввести помимо функции $\mathcal{D}_{ik}$ еще две другие функции:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{ik}^E(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -\zeta_s^2 \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}'), \\ \mathcal{D}_{ik}^H(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \text{rot}_{il} \text{rot}'_{km} \mathcal{D}_{lm}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}'), \end{aligned} \quad (80.10)$$

¹⁾ Мы не даем общего правила определения знака диаграмм типа (80.5) (диаграммы без свободных концов). В данном случае его легко установить, записав в явном виде соответствующие члены разложений в (80.3) и (80.6). Достаточно, впрочем, заметить, что этот член в (80.3) содержит одну свертку пары A -операторов, а в (80.6) — две пары; поскольку свертка одной пары дает $-\mathcal{D}_{ik}$, то диаграммы (80.5) и (80.7) имеют противоположные знаки, что и приводит к знаку минус в (80.8).

построенные по аналогии с выражениями (76.3), (76.4). Тогда δF запишется окончательно в виде

$$\delta F = \delta F_0 + \frac{T}{4\pi} \sum_{s=0}^{\infty} \int \mathcal{D}_{ll}^E(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \delta\varepsilon(i|\zeta_s|, \mathbf{r}) d^3x. \quad (80.11)$$

Используем теперь формулу (80.11) для определения сил, действующих в неоднородной среде. Изотропия среды уже была предположена; будем считать теперь ее также и жидкой, так что изменение состояния в каждой ее точке (при заданной температуре) может быть связано лишь с изменением плотности ρ .

Представим себе, что среда подвергнута изотермической малой деформации с вектором смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. Соответствующее изменение ее свободной энергии есть

$$\delta F = - \int \mathbf{f} \mathbf{u} d^3x, \quad (80.12)$$

где $\mathbf{f}$ — объемная плотность действующих на среду сил. С другой стороны, это же изменение можно определить из (80.11), выразив через тот же вектор смещения вариации δF_0 и $\delta\varepsilon$. Пусть $P_0(\rho, T)$ — давление без учета ван-дер-ваальсовых поправок при заданных значениях ρ и T : соответствующая плотность объемных сил есть $\mathbf{f}_0 = -\nabla P_0$, так что

$$\delta F_0 = \int \mathbf{u} \nabla P_0 d^3x.$$

Далее, изменение плотности связано с вектором смещения уравнением непрерывности $\delta\rho = -\operatorname{div}(\rho\mathbf{u})$. Поэтому изменение диэлектрической проницаемости

$$\delta\varepsilon = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho} \delta\rho = -\frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho} \operatorname{div}(\rho\mathbf{u}).$$

Подставив это в (80.11), произведя интегрирование по частям по всему объему тела и сравнив затем получившееся для δF выражение с (80.12), найдем

$$\mathbf{f} = -\nabla P_0 - \frac{T}{4\pi} \sum_{s=0}^{\infty} \rho \operatorname{grad} \left[\mathcal{D}_{ll}^E(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho} \right]. \quad (80.13)$$

Эта формула позволяет, в частности, сразу определить поправку к химическому потенциалу тела. Для этого напомним условие механического равновесия: $\mathbf{f} = 0$. При этом учтем, что при постоянной температуре

$$dP_0(\rho, T) = \frac{\rho}{m} d\mu_0(\rho, T),$$

где $\mu_0(\rho, T)$ — невозмущенный химический потенциал тела (m — масса частицы). Тогда получим это условие в виде $\rho \nabla \mu = 0$, где

$$\mu = \mu_0(\rho, T) + \frac{mT}{4\pi} \sum'_{s=0}^{\infty} \mathcal{D}_{ll}^E(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho}. \quad (80.14)$$

С другой стороны, условием механического равновесия всякого неоднородного тела является постоянство вдоль него химического потенциала; ясно, что выражение (80.14) и определяет этот потенциал.

Наиболее полное описание действующих в среде сил осуществляется, как известно, так называемым тензором напряжений σ_{ik} , связанным с компонентами вектора $\mathbf{f}$ соотношениями

$$f_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}. \quad (80.15)$$

Для преобразования выражения (80.13) к такому виду перепишем его сначала в форме

$$f_i = -\frac{\partial P_0}{\partial x_i} + \frac{T}{4\pi} \sum' \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\varepsilon(\mathbf{r}) - \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right) \mathcal{D}_{ll}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right\} - \\ - \frac{T}{4\pi} \sum' \varepsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x_i} \mathcal{D}_{ll}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r})$$

(в целях краткости аргументы ζ_s в промежуточных формулах не выписываем). Первые два члена уже имеют требуемый вид. Третий же член представим как

$$-\frac{T}{4\pi} \sum' \left\{ \varepsilon(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial x_i} + \varepsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x'_i} \right\} \mathcal{D}_{ll}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}'),$$

разделив дифференцирования по первому и второму аргументу функции $\mathcal{D}_{ll}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$; отождествление $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ произведем в конце вычисления. Вычисление производится путем использования уравнений (см. (79.8))

$$\hat{\Lambda}_{il} \mathcal{D}_{lk}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

$$\hat{\Lambda}'_{il} \mathcal{D}_{kl}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

где

$$\hat{\Lambda}_{il} = \zeta_s^2 \varepsilon(\mathbf{r}) \delta_{il} + \text{rot}_{im} \text{rot}_{ml} = \zeta_s^2 \varepsilon(\mathbf{r}) \delta_{il} + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_l} - \delta_{il} \Delta.$$

В результате получим равенство (при $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$)

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial x_i} \mathcal{D}_{ll}^E = 2 \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\varepsilon \mathcal{D}_{ik}^E + \mathcal{D}_{ik}^H \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} \mathcal{D}_{ll}^H$$

и окончательно следующее выражение для тензора напряжений:

$$\sigma_{ik} = -P_0 \delta_{ik} - \frac{T}{2\pi} \sum_{s=0}^{\infty} \left\{ -\frac{1}{2} \delta_{ik} \left[\varepsilon(i\zeta_s, \mathbf{r}) - \rho \frac{\partial \varepsilon(i\zeta_s, \mathbf{r})}{\partial \rho} \right] \mathcal{D}_{ll}^E(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) + \right. \\ \left. + \varepsilon(i\zeta_s, \mathbf{r}) \mathcal{D}_{ik}^E(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) - \frac{1}{2} \delta_{ik} \mathcal{D}_{ll}^H(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) + \mathcal{D}_{ik}^H(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \right\}. \quad (80.16)$$

Полученные формулы еще не имеют, однако, прямого физического смысла. Дело в том, что функция $\mathcal{D}_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ стремится при $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$ к бесконечности, как $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ (в чем легко убедиться с помощью уравнения (79.8)). Эта расходимость возникает от вклада больших волновых векторов ($k \sim 1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$) и связана лишь с неприменимостью уравнения (79.8) при $k \gtrsim a$. Это затруднение можно устранить, не вводя явным образом обрезания на больших k . Для этого заметим, что коротковолновые флуктуации не имеют отношения к интересующим нас эффектам, связанным с неоднородностью среды. Их вклад в термодинамические величины в каждой данной точке тела одинаков для однородной среды и для среды неоднородной, но с тем же значением $\varepsilon(\mathbf{r})$ в данной точке. Для придания формулам однозначного смысла, не зависящего в действительности от характера обрезания, надо поэтому произвести в формулах соответствующие вычитания. Именно под гриновской функцией $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r})$ надо понимать предел разности

$$\lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} \{ \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') - \overline{\mathcal{D}}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \}, \quad (80.17)$$

где $\overline{\mathcal{D}}_{ik}$ — гриновская функция вспомогательной однородной неограниченной среды, диэлектрическая проницаемость которой совпадает с проницаемостью истинной среды в данной точке $\mathbf{r}$; этот предел уже не расходится. Во избежание излишнего усложнения записи формул оставим их в прежнем виде, подразумевая в них под $\mathcal{D}_{ik}$ уже разность (80.17). При этом $P_0(\rho, T)$ есть давление в неограниченной однородной среде при заданных значениях ρ и T .

Как в формулу (80.16), так и в уравнение (79.8), определяющее гриновскую функцию $\mathcal{D}_{ik}$, свойства среды входят только через $\varepsilon(i\zeta)$ — диэлектрическую проницаемость как функцию мнимой частоты. Напомним в этой связи, что эта функция связана простым соотношением с мнимой частью диэлектрической проницаемости при вещественных частотах:

$$\varepsilon(i\zeta) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega \operatorname{Im} \varepsilon(\omega)}{\omega^2 + \zeta^2} d\omega \quad (80.18)$$

(см. VIII, § 82). Можно сказать поэтому, что единственной макроскопической характеристикой, определяющей ван-дер-ваальсовы силы в материальной среде, является, в конечном итоге, мнимая часть ее диэлектрической проницаемости.

Формула (80.16) по виду в точности соответствует известному из макроскопической электродинамики выражению для максвелловского тензора напряжений в постоянном электромагнитном поле, причем квадратичные комбинации компонент $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ заменены соответствующими функциями $-\mathcal{D}_{ik}^E$ и $-\mathcal{D}_{ik}^H$. Этой аналогии не следует, однако, придавать слишком глубокое значение: она отнюдь не означает существования для переменного электромагнитного поля как такового общего выражения для тензора напряжений в поглощающей среде (содержащего в качестве характеристики среды лишь ее диэлектрическую проницаемость). В данном случае мы имеем дело не с произвольным электромагнитным полем, а с термодинамически равновесным собственным флуктуационным полем в среде.

§ 81. Молекулярные силы взаимодействия между твердыми телами. Общая формула

Применим полученные в предыдущем параграфе общие формулы к вычислению сил, действующих между твердыми телами, поверхности которых сближены до очень малых расстояний, удовлетворяющих лишь одному условию: они должны быть велики по сравнению с межатомными расстояниями в телах. Именно это условие позволяет подойти к вопросу с макроскопической точки зрения, в которой тела рассматриваются как сплошные среды, а их взаимодействие — как осуществляющееся посредством флуктуационного электромагнитного поля. При этом существенны те флуктуации, длины волн которых порядка величины характерных размеров задачи — ширины щели между телами¹⁾.

Будем обозначать индексами 1 и 2 величины, относящиеся к двум твердым телам, а индексом 3 — величины, относящиеся к пространству щели между ними (рис. 17). Щель будем предполагать плоскопараллельной; ось x направим перпендикулярно ее плоскости (так что поверхностями тел 1 и 2 будут плоскости $x = 0$ и $x = l$, где l — ширина щели). Сила F , действующая на единицу площади поверхности, скажем, тела 2, вычисляется как поток импульса, втекающего в тело через эту поверхность. Этот поток дается компонентой

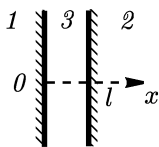


Рис. 17.

¹⁾ Результаты § 81, 82 принадлежат *Е. М. Лифшицу* (1954).

σ_{xx} электромагнитного тензора напряжений в пространстве щели, взятого при $x = l$. В пустоте $\varepsilon = 1$ и выражение σ_{xx} из (80.16) сводится к¹⁾

$$F = \sigma_{xx}(l) = \frac{T}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \{ \mathcal{D}_{yy}^E(\zeta_n; l, l) + \mathcal{D}_{zz}^E(\zeta_n; l, l) - \mathcal{D}_{xx}^E(\zeta_n; l, l) + \\ + \mathcal{D}_{yy}^H(\zeta_n; l, l) + \mathcal{D}_{zz}^H(\zeta_n; l, l) - \mathcal{D}_{xx}^H(\zeta_n; l, l) \} \quad (81.1)$$

(индекс суммирования обозначаем в этом параграфе буквой n).

В силу однородности задачи в направлениях y и z функции $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_n; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ зависят только от разностей $y - y'$ и $z - z'$ (аргументы $y - y'$ и $z - z'$ в (81.1) не выписаны); $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_n, \mathbf{q}; x, x')$ — фурье-компоненты по этим переменным. Тогда

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_n; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \mathcal{D}_{ik}(\zeta_n, \mathbf{q}; x, x') \frac{d^2 q}{(2\pi)^2}. \quad (81.2)$$

Для функций $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_n, \mathbf{q}; x, x')$ уравнения (79.8) принимают вид (ось y направляем вдоль вектора $\mathbf{q}$)

$$\left(\omega^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \mathcal{D}_{zz}(x, x') = -4\pi\delta(x - x'), \\ \left(\omega^2 - q^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \mathcal{D}_{yy}(x, x') + iq \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{xy}(x, x') = -4\pi\delta(x - x'), \\ \omega^2 \mathcal{D}_{xy}(x, x') + iq \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{yy}(x, x') = 0, \\ \omega^2 \mathcal{D}_{xx}(x, x') + iq \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{yx}(x, x') = -4\pi\delta(x - x'),$$

где $\omega = (\varepsilon \zeta_n^2 + q^2)^{1/2}$, а $\varepsilon = \varepsilon(i\zeta_n)$, а x' играет роль параметра (компоненты же $\mathcal{D}_{xz} = \mathcal{D}_{yz} = 0$, поскольку уравнения для них оказываются однородными). Решение этой системы сводится к решению всего двух уравнений

$$\left(\omega^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \mathcal{D}_{zz}(x, x') = -4\pi\delta(x - x'), \quad (81.3)$$

$$\left(\omega^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \mathcal{D}_{yy}(x, x') = \frac{-4\pi\omega^2}{\varepsilon \zeta_n^2} \delta(x - x'), \quad (81.4)$$

¹⁾ В промежуточных вычислениях полагаем $\hbar = 1$, $c = 1$.

после чего $\mathcal{D}_{xy}$ и $\mathcal{D}_{xx}$ определяются как

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{xy}(x, x') &= -\frac{iq}{\omega^2} \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{yy}(x, x'), \\ \mathcal{D}_{xx}(x, x') &= -\frac{iq}{\omega^2} \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{yx}(x, x') - \frac{4\pi}{\omega^2} \delta(x - x').\end{aligned}\quad (81.5)$$

При этом надо учесть, что в силу (79.5) $\mathcal{D}_{yx}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathcal{D}_{xy}(r', r)$, и поэтому $\mathcal{D}_{yx}(\mathbf{q}; x, x') = \mathcal{D}_{xy}(-\mathbf{q}; x', x)$.

Краевые условия, соответствующие непрерывности тангенциальных компонент напряженности электрического и магнитного полей, сводятся к требованию непрерывности величин $\mathcal{D}_{yk}^E$, $\mathcal{D}_{zk}^E$, $\mathcal{D}_{yk}^H$, $\mathcal{D}_{zk}^H$, или, что то же, к непрерывности величин

$$\mathcal{D}_{yk}, \quad \mathcal{D}_{zk}, \quad \text{rot}_{yl} \mathcal{D}_{lk}, \quad \text{rot}_{zl} \mathcal{D}_{lk}.$$

Используя первое из равенств (81.5), получим, что на границе раздела должны быть непрерывны

$$\mathcal{D}_{zz}, \quad \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{zz}, \quad \mathcal{D}_{yy}, \quad \frac{\varepsilon}{\omega^2} \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{yy}. \quad (81.6)$$

Поскольку мы имеем в виду вычислить тензор напряжений лишь в области щели, то можно сразу считать, что $0 < x' < l$. В области $0 < x < l$ функции $\mathcal{D}_{yy}$ и $\mathcal{D}_{zz}$ определяются уравнениями (81.3), (81.4) с $\varepsilon=1$, $\omega=\omega_3=(\zeta_n^2+q^2)^{1/2}$. В областях 1 ($x < 0$) и 2 ($x > l$) они удовлетворяют тем же уравнениям без правых частей (поскольку здесь $x \neq x'$) соответственно с ε_1 , ω_1 и ε_2 , ω_2 в качестве ε , ω .

Необходимое, согласно (80.17), вычитание сводится к тому, что из всех функций $\mathcal{D}_{ik}$ в области щели следует вычесть их значения при $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$. Вследствие этого, в частности, можно сразу опустить второй член справа во втором из равенств (81.5), так что в области щели

$$\mathcal{D}_{xy} = -\frac{iq}{\omega_3^2} \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{yy}, \quad \mathcal{D}_{xx} = -\frac{iq}{\omega_3^2} \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{yx}. \quad (81.7)$$

Прежде чем приступить к решению уравнений, сделаем еще одно замечание. Общее решение уравнений (81.3), (81.4) имеет вид $f^-(x-x') + f^+(x+x')$. Используя уравнения (81.3), (81.4), (81.7) и определение функций $\mathcal{D}_{ik}^E$ и $\mathcal{D}_{ik}^H$, можно показать, что части гриновских функций, зависящие от суммы $x+x'$, не вносят никакого вклада в выражение (81.1) для силы. Мы не останавливаемся здесь на этом, так как этот результат заранее очевиден из физических соображений: положив $x=x'$ в решении вида $f^+(x+x')$, мы бы получили поток импульса в щели, который

зависел бы от координаты — в противоречии с законом сохранения импульса. В дальнейшем мы будем поэтому приводить в результате только выражения для частей гриновских функций $\mathcal{D}_{ik}^-$, не зависящих от $x + x'$.

Перейдем к нахождению функции $\mathcal{D}_{zz}$. Она удовлетворяет уравнениям:

$$\begin{aligned} \left(\omega_1^2 - \frac{d^2}{dx^2}\right) \mathcal{D}_{zz}(x, x') &= 0, \quad x < 0, \\ \left(\omega_2^2 - \frac{d^2}{dx^2}\right) \mathcal{D}_{zz}(x, x') &= 0, \quad x > l, \\ \left(\omega_3^2 - \frac{d^2}{dx^2}\right) \mathcal{D}_{zz}(x, x') &= -4\pi\delta(x - x'), \quad 0 < x < l. \end{aligned} \quad (81.8)$$

Отсюда находим

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{zz} &= A e^{\omega_1 x}, \quad x < 0, \quad \mathcal{D}_{zz} = B e^{-\omega_2 x}, \quad x > l, \\ \mathcal{D}_{zz} &= C_1 e^{\omega_3 x} + C_2 e^{-\omega_3 x} - \frac{2\pi}{\omega - 3} e^{-\omega_3 |x - x'|}, \quad 0 < x < l. \end{aligned}$$

В последнем выражении учтено, что в силу третьего из уравнений (81.8) производная $d\mathcal{D}_{zz}/dx$ испытывает при $x = x'$ скачок, равный 4π . Определив A , B , C_1 , C_2 (функции x') из граничных условий непрерывности $\mathcal{D}_{zz}$ и $d\mathcal{D}_{zz}/dx$, получим

$$\mathcal{D}_{zz}^- = \frac{4\pi}{\omega_3 \Delta} \operatorname{ch} \omega_3 (x - x') - \frac{2\pi}{\omega_3} e^{-\omega_3 |x - x'|}, \quad 0 < x < l,$$

где

$$\Delta = 1 - e^{2\omega_3 l} \frac{(\omega_1 + \omega_3)(\omega_2 + \omega_3)}{(\omega_1 - \omega_3)(\omega_2 - \omega_3)}.$$

Вычтя значение $\mathcal{D}_{zz}^-$ при $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3$ (при этом $1/\Delta = 0$), имеем окончательно

$$\mathcal{D}_{zz}^- = \frac{4\pi}{\omega_3 \Delta} \operatorname{ch} \omega_3 (x - x').$$

Аналогично, решая уравнение для $\mathcal{D}_{yy}$, получим (после вычитания)

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{yy}^- &= \frac{4\pi\omega_3}{\zeta_n^2 \Delta_1} \operatorname{ch} \omega_3 (x - x'), \\ \Delta_1 &= 1 - e^{2\omega_3 l} \frac{(\varepsilon_1 \omega_3 + \omega_1)(\varepsilon_2 \omega_3 + \omega_2)}{(\varepsilon_1 \omega_3 - \omega_1)(\varepsilon_2 \omega_3 - \omega_2)} \end{aligned}$$

и, используя (81.7),

$$\mathcal{D}_{xy}^- = \mathcal{D}_{yx}^- = -\frac{4\pi i q}{\zeta_n^2 \Delta_1} \operatorname{sh} \omega_3(x - x'),$$

$$\mathcal{D}_{xx}^- = -\frac{4\pi q^2}{\zeta_n^2 \omega_3 \Delta_1} \operatorname{ch} \omega_3(x - x').$$

Вычислив теперь функции $\mathcal{D}_{ik}^E$ и $\mathcal{D}_{ik}^H$, преобразовав их затем согласно (81.2) и подставив в (81.1), получим

$$F(l) = -\frac{T}{2\pi} \sum_{n=0}' \int_0^\infty \omega_3 \left(\frac{1}{\Delta} + \frac{1}{\Delta_1} \right) q dq.$$

Наконец, перейдя к новой переменной интегрирования p , согласно $q = \zeta_n \sqrt{p^2 - 1}$, и возвратившись к обычным единицам, мы придем к окончательному выражению для силы F , действующей на единицу площади каждого из двух тел, разделенных щелью шириной l :

$$F(l) = \frac{T}{\pi c^3} \sum_{n=0}' \zeta_n^3 \int_1^\infty p^2 \left\{ \left[\frac{(s_1 + p)(s_2 + p)}{(s_1 - p)(s_2 - p)} \exp\left(\frac{2p\zeta_n l}{c}\right) - 1 \right]^{-1} + \right. \\ \left. + \left[\frac{(s_1 + p\varepsilon_1)(s_2 + p\varepsilon_2)}{(s_1 - p\varepsilon_1)(s_2 - p\varepsilon_2)} \exp\left(\frac{2p\zeta_n l}{c}\right) - 1 \right]^{-1} \right\} dp, \quad (81.9)$$

где

$$s_1 \sqrt{\varepsilon_1 - 1 + p^2}, \quad s_2 \sqrt{\varepsilon_2 - 1 + p^2}, \quad \zeta_n = 2\pi n T / \hbar,$$

$\varepsilon_1, \varepsilon_2$ — функции мнимой частоты $\omega = i\zeta_n$; напомним в этой связи, что $\varepsilon(i\zeta)$ — положительная вещественная величина, монотонно убывающая от своего электростатического значения ε_0 при $\zeta = 0$ до 1 при $\zeta = \infty$ ¹⁾. Положительные значения F соответствуют притяжению тел. Подынтегральное выражение в каждом из членов суммы в (81.9) положительно и при каждом заданных p и ζ_n монотонно убывает с ростом l ²⁾. Отсюда

¹⁾ Формула (81.9) выведена в предположении изотропии обоих тел. Поэтому ее применимость к кристаллам связана с возможностью пренебрежения анизотропией их диэлектрической проницаемости. Хотя это в большинстве случаев вполне допустимо, следует иметь в виду, что анизотропия тел приводит, вообще говоря, еще и к специфическому эффекту — появлению момента сил, стремящегося повернуть тела друг относительно друга.

²⁾ В этом легко убедиться, заметив, что для $s = (\varepsilon - 1 + p^2)^{1/2}$ (где $p \gg 1$) имеют место неравенства $\varepsilon p > s > p$ при $\varepsilon > 1$.

следует, что $F > 0$, $dF/dl < 0$ т. е. тела (разделенные пустой щелью) притягиваются с силой, монотонно убывающей с увеличением расстояния.

Общая формула (81.9) очень сложна. Она, однако, может быть существенно упрощена в связи с тем, что влияние температуры на силу взаимодействия обычно совершенно несущественно¹⁾. Дело в том, что благодаря наличию экспонент в подынтегральных выражениях в (81.9) главную роль в сумме играют лишь те члены, для которых $\zeta_n \sim c/l$ или $n \sim c\hbar/lT$. В случае $lT/c\hbar \ll 1$ существенными будут, таким образом, большие значения n и в (81.9) можно перейти от суммирования к интегрированию по $dn = \hbar d\zeta/2\pi T$. При этом температура исчезает из формулы, и мы приходим к следующему результату:

$$F(l) = \frac{\hbar}{2\pi^2 c^3} \int_0^\infty \int_1^\infty p^2 \zeta^3 \left\{ \left[\frac{(s_1 + p)(s_2 + p)}{(s_1 - p)(s_2 - p)} \exp\left(\frac{2p\zeta}{c} l\right) - 1 \right]^{-1} + \right. \\ \left. + \left[\frac{(s_1 + p\varepsilon_1)(s_2 + p\varepsilon_2)}{(s_1 - p\varepsilon_1)(s_2 - p\varepsilon_2)} \exp\left(\frac{2p\zeta}{c} l\right) - 1 \right]^{-1} \right\} dp d\zeta. \quad (81.10)$$

Согласно сказанному, эта формула применима для расстояний $l \ll c\hbar/T$; уже при комнатных температурах это дает расстояния примерно до 10^{-4} см. Формула (81.10) допускает дальнейшее существенное упрощение в двух предельных случаях.

§ 82. Молекулярные силы взаимодействия между твердыми телами. Предельные случаи

Остановимся сначала на предельном случае «малых» расстояний, под которыми подразумеваются расстояния, малые по сравнению с длинами волн λ_0 , характерными для спектров поглощения данных тел. Температуры, о которых может идти речь для конденсированных тел, во всяком случае малы по сравнению с играющими здесь роль $\hbar\omega_0$ (например, в видимой части спектра), поэтому неравенство a заведомо выполняется.

Благодаря наличию экспоненциального множителя в знаменателях подынтегрального выражения при интегрировании по dp существенна область, в которой $p\zeta l/c \sim 1$. При этом $p \gg 1$, и поэтому при определении главного члена в интеграле можно положить $s_1 \approx s_2 \approx p$. В этом приближении первое слагаемое в

¹⁾ Говоря о влиянии температуры, мы отвлекаемся от того влияния, которое связано просто с зависимостью от температуры самой диэлектрической проницаемости.

фигурных скобках в (81.10) обратится в нуль. Второй же член после введения переменной интегрирования $x = 2p\zeta l/c$ даст

$$F(l) = \frac{\hbar}{16\pi^2 l^3} \iint_0^\infty x^2 \left[\frac{(\varepsilon_1 + 1)(\varepsilon_2 + 1)}{(\varepsilon_1 - 1)(\varepsilon_2 - 1)} e^x - 1 \right]^{-1} dx d\zeta \quad (82.1)$$

(нижний предел интегрирования по dx заменен в этом же приближении нулем)¹⁾.

Сила в этом случае оказывается обратно пропорциональной кубу расстояния, что, впрочем, и следовало ожидать в соответствии с обычным законом ван-дер-ваальсовых сил между двумя атомами (см. ниже примечание на с. 442). Функции $\varepsilon(i\zeta) - 1$ монотонно убывают с увеличением ζ , стремясь к нулю. Поэтому значения ζ , начиная с некоторого $\zeta \sim \zeta_0$, перестают вносить существенный вклад в интеграл; условие малости l означает, что должно быть $l \ll c/\zeta_0$.

Покажем, каким образом можно перейти от макроскопической формулы (82.1) к взаимодействию отдельных атомов в пустоте. Для этого предположим формальным образом оба тела достаточно разреженными. С макроскопической точки зрения это значит, что их диэлектрические проницаемости близки к единице, т. е. разности $\varepsilon_1 - 1$ и $\varepsilon_2 - 1$ малы. Из (82.1) имеем тогда с должной точностью

$$\begin{aligned} F &= \frac{\hbar}{64\pi^2 l^3} \iint_0^\infty x^2 e^{-x} (\varepsilon_1 - 1)(\varepsilon_2 - 1) dx d\zeta = \\ &= \frac{\hbar}{32\pi^2 l^3} \int_0^\infty [\varepsilon_1(i\zeta) - 1][\varepsilon_2(i\zeta) - 1] d\zeta. \end{aligned}$$

¹⁾ Интеграл вида

$$\frac{a}{2} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{ae^x - 1}$$

при изменении a от ∞ до 1 меняется незначительно: от 1 до 1,2. Практически с достаточной точностью можно поэтому представить формулу (82.1) в виде

$$F = \frac{\hbar \bar{\omega}}{8\pi^2 l^3}, \quad \bar{\omega} = \int_0^\infty \frac{[\varepsilon_1(i\zeta) - 1][\varepsilon_2(i\zeta) - 1]}{[\varepsilon_1(i\zeta) + 1][\varepsilon_2(i\zeta) + 1]} d\zeta.$$

Величина $\bar{\omega}$ играет роль некоторой характерной для спектров поглощения обоих тел частоты.

Выразив $\varepsilon(i\zeta)$ через $\text{Im}\varepsilon(\omega)$ на вещественной оси ω , согласно (80.18), получим

$$F = \frac{\hbar}{8\pi^4 l^3} \iiint_0^\infty \frac{\omega_1 \omega_2 \text{Im}\varepsilon_1(\omega_1) \text{Im}\varepsilon_2(\omega_2)}{(\omega_1^2 + \zeta^2)(\omega_2^2 + \zeta^2)} d\zeta d\omega_1 d\omega_2 =$$

$$= \frac{\hbar}{16\pi^3 l^3} \iint_0^\infty \frac{\text{Im}\varepsilon_1(\omega_1) \text{Im}\varepsilon_2(\omega_2)}{\omega_1 + \omega_2} d\omega_1 d\omega_2. \quad (82.2)$$

Эта сила соответствует взаимодействию атомов с энергией

$$U(r) = -\frac{3\hbar}{8\pi^4 n_1 n_2 r^6} \iint \frac{\text{Im}\varepsilon_1(\omega_1) \text{Im}\varepsilon_2(\omega_2)}{\omega_1 + \omega_2} d\omega_1 d\omega_2, \quad (82.3)$$

где r — расстояние между атомами; n_1 , n_2 — плотности чисел атомов в обоих телах¹⁾. Эта формула совпадает с известной квантовомеханической формулой Лондона, получающейся с помощью обычной теории возмущений, примененной к дипольному взаимодействию двух атомов (см. III, § 89, задача). При сравнении следует учесть, что мнимая часть $\varepsilon(\omega)$ связана со спектральной плотностью «сил осцилляторов» $f(\omega)$ соотношением

$$\omega \text{Im}\varepsilon(\omega) = \frac{2\pi^2 e^2}{m} n f(\omega)$$

(e , m — заряд и масса электрона; см. VIII § 82); силы же осцилляторов известным образом выражаются через квадраты матричных элементов дипольного момента атомов (см. III, (149.10)).

Перейдем к обратному случаю «больших» расстояний: $l \gg \lambda_0$. При этом, однако, будем считать, что расстояния все же не столь велики, чтобы нарушилось неравенство $lT/\hbar c \ll 1$.

В формуле (81.10) снова вводим новую переменную интегрирования $x = 2pl\zeta/c$, но в качестве второй переменной оставляем теперь не ζ , а p . Тогда ε_1 и ε_2 окажутся функциями аргумента $i\zeta = ix c/2pl$. Но благодаря наличию e^x в знаменателях подынтегрального выражения в интеграле по dx играют роль значения $x \sim 1$, а поскольку $p \geq 1$, то аргумент функции ε при больших l близок к нулю во всей существенной области переменных. В соответствии с этим можно заменить ε_1 , ε_2 просто их значениями

¹⁾ Если потенциальная энергия взаимодействия атомов 1 и 2 есть $U(r) = -ar^{-6}$, то полная энергия парных взаимодействий всех атомов в двух пространствах, разделенных щелью ширины l , равна $U_{\text{пол}} = -a\pi n_1 n_2 / 12l^2$. Сила же есть $F = dU_{\text{пол}}/dl = a\pi n_1 n_2 / 6l^3$. В этом и заключается соответствие между формулами (82.2) и (82.3).

при $\zeta = 0$, т. е. электростатическими диэлектрическими постоянными ε_{10} , ε_{20} . Таким образом, окончательно

$$F = \frac{\hbar c}{32\pi^{2/4}} \int_0^\infty \int_1^\infty \frac{x^3}{p^2} \left\{ \left[\frac{(s_{10} + p)(s_{20} + p)}{(s_{10} - p)(s_{20} - p)} e^x - 1 \right]^{-1} + \right. \\ \left. + \left[\frac{(s_{10} + p\varepsilon_{10})(s_{20} + p\varepsilon_{20})}{(s_{10} - p\varepsilon_{10})(s_{20} - p\varepsilon_{20})} e^x - 1 \right]^{-1} \right\} dp dx, \quad (82.4)$$

$$s_{10} = \sqrt{\varepsilon_{10} - 1 + p^2}, \quad s_{20} = \sqrt{\varepsilon_{20} - 1 + p^2}.$$

Закон убывания силы с расстоянием (как l^{-4}) соответствует в данном случае закону убывания ван-дер-ваальсовых сил между двумя атомами с учетом запаздывания (см. ниже).

Формула (82.4) сводится к очень простому выражению в случае, когда оба тела — металлы. У металлов функция $\varepsilon(i\zeta) \rightarrow \infty$ при $\zeta \rightarrow 0$; поэтому для них надо считать $\varepsilon_0 = \infty$. Положив $\varepsilon_{10} = \varepsilon_{20} = \infty$, получим

$$F = \frac{\hbar c}{16\pi^{2/4}} \int_0^\infty \frac{x^3 dp dx}{p^2(e^x - 1)} = \frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{l^4} \quad (82.5)$$

(*H. B. G. Casimir*, 1948). Эта сила вообще не зависит от рода металлов (свойство, не имеющее места на малых расстояниях, где сила взаимодействия зависит от поведения функции $\varepsilon(i\zeta)$ при всех значениях ζ , а не только при $\zeta = 0$).

На рис. 18 представлен график функции $\varphi_{\text{дд}}(\varepsilon_0)$, определяющий силу притяжения между двумя одинаковыми диэлектриками ($\varepsilon_{10} = \varepsilon_{20} \equiv \varepsilon_0$); формула (82.4) представлена в виде

$$F = \frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{l^4} \left(\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_0 + 1} \right)^2 \varphi_{\text{дд}}(\varepsilon_0). \quad (82.6)$$

На том же рисунке дан график функции $\varphi_{\text{дм}}(\varepsilon_0)$, определяющий силу притяжения для диэлектрика и металла ($\varepsilon_{10} = \varepsilon_0$, $\varepsilon_{20} = \infty$)

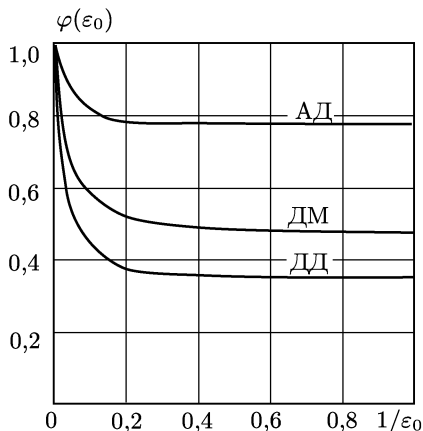


Рис. 18.

по формуле¹⁾

$$F = \frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{l^4} \frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_0 + 1} \varphi_{\text{дм}}(\varepsilon_0). \quad (82.7)$$

Произведем в (82.4) переход к взаимодействию отдельных атомов подобно тому, как это было сделано выше для формулы (82.1). При малых $\varepsilon_0 - 1$ имеем

$$s_0 - p \approx \frac{\varepsilon_0 - 1}{2p}, \quad s_0 - p\varepsilon_0 \approx (\varepsilon_0 - 1) \left(-p + \frac{1}{2p} \right),$$

и интеграл (82.4) принимает вид

$$F = \frac{\hbar c}{32\pi^{2/4}} (\varepsilon_{10} - 1)(\varepsilon_{20} - 1) \int_0^\infty x^3 e^{-x} dx \int_1^\infty \frac{1 - 2p^2 + 2p^4}{8p^6} dp,$$

откуда

$$F = \frac{\hbar c}{l^4} \frac{23}{640\pi^2} (\varepsilon_{10} - 1)(\varepsilon_{20} - 1). \quad (82.8)$$

Эта сила соответствует взаимодействию двух атомов с энергией

$$U(r) = -\frac{23\hbar c}{4\pi r^7} \alpha_1 \alpha_2, \quad (82.9)$$

где α_1, α_2 — статические поляризуемости атомов ($\varepsilon_0 = 1 + 4\pi n\alpha$). Формула (82.9) совпадает с результатом расчета по квантовой электродинамике для притяжения двух атомов на достаточно больших расстояниях, когда становятся существенными эффекты запаздывания (см. IV, § 85).

Наконец, рассмотрим расстояния настолько большие, что имеет место неравенство $lT/\hbar c \ll 1$, обратное тому, которое требовалось для возможности пренебрежения влиянием температуры. В этом случае из всех членов суммы в (81.9) надо сохранить лишь первый. Однако сразу положить в нем $n = 0$ нельзя ввиду возникающей при этом неопределенности (множитель ζ_n^3 обращается в нуль, но интеграл по dp расходится). Это затруднение можно обойти, введя сначала вместо p новую переменную интегрирования $x = 2p\zeta_n l/c$ (в результате чего множитель ζ_n^3 исчезает).

¹⁾ При $\varepsilon_0 \rightarrow 1$ функции $\varphi_{\text{дд}}$ и $\varphi_{\text{дм}}$ стремятся соответственно к значениям 0,35 и 0,46, отвечающим предельным законам (82.8) и (1) в задаче к этому параграфу. При $\varepsilon_0 \rightarrow \infty$ обе функции стремятся к значению 1, отвечающему формуле (82.5).

Положив затем $\zeta_n = 0$, получим

$$F = \frac{T}{16\pi l^3} \int_0^\infty x^2 \left[\frac{(\varepsilon_{10} + 1)(\varepsilon_{20} + 1)}{(\varepsilon_{10} - 1)(\varepsilon_{20} - 1)} e^x - 1 \right]^{-1} dx. \quad (82.10)$$

Таким образом, на достаточно больших расстояниях убывание силы притяжения замедляется и снова происходит по закону l^{-3} , но с коэффициентом, зависящим от температуры (все следующие члены суммы в (81.9) убывают с l экспоненциально). Условие $lT/\hbar c \gg 1$ есть по существу условие классичности ($\hbar\omega \ll T$, где $\omega \sim c/l$). Поэтому естественно, что (82.10) не содержит $\hbar^{-1}$.

Задача

1. Найти закон взаимодействия атома с металлической стенкой на «больших» расстояниях.

Решение. Взаимодействие отдельного атома с конденсированным телом можно найти, рассматривая лишь одно из тел (пусть это будет тело 2) как разреженную среду. Считая $\varepsilon_{20} - 1$ малым и положив $\varepsilon_{10} = \infty$, получим из (82.4)

$$F = \frac{\hbar c(\varepsilon_{20} - 1)}{32\pi^2 l^4} \int_0^\infty x^3 e^{-x} dx \int_1^\infty \frac{dp}{2p^2} = \frac{3\hbar c(\varepsilon_{20} - 1)}{32\pi^2 l^4}. \quad (1)$$

Если энергия взаимодействия атома со стенкой есть $U = -aL^{-4}$ (L — расстояние атома от стенки), то энергия взаимодействия атомов в полупространстве, отделенном от стенки щелью l , есть $U_{\text{пол}} = -an/3l^3$, а сила $F = dU_{\text{пол}}/dl = an/l^4$. По этому полученному значению F соответствует притяжение отдельного атома к стенке с энергией

$$U(L) = -3\alpha_2 \hbar c / (8\pi L^4) \quad (2)$$

(*H. B. G. Casimir, D. Polder, 1948*).

Для взаимодействия атома с диэлектрической стенкой тем же путем получается результат

$$U(L) = -\frac{3\hbar c \alpha_2}{8\pi L^4} \frac{\varepsilon_{10} - 1}{\varepsilon_{10} + 1} \varphi_{\text{ад}}(\varepsilon_{10})$$

с функцией $\varphi_{\text{ад}}$, представленной графически на рис. 18. При $\varepsilon_{10} \rightarrow 1$ она стремится к значению $23/30 = 0,77$, отвечающему формуле (82.8).

¹Полученные в §81, 82 формулы могут быть обобщены таким образом, чтобы включить в себя случай заполненной жидкостью щели между твердыми телами и случай тонкой жидкой пленки на твердой поверхности; см. *И. Е. Дзялошинский, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский* // УФН. 1961. Т. 78. С. 381; *Advances in Phys.*, 1961. V. 10. P. 165.

§ 83. Асимптотическое поведение корреляционной функции в жидкости

Длинноволновые электромагнитные флуктуации приводят также к некоторым специфическим свойствам корреляционной функции флуктуаций плотности в однородной жидкости.

Напомним (см. V, § 116), что корреляционная функция $\nu(r)$ определяется через среднее значение от произведения флуктуаций плотности числа частиц n в двух точках пространства согласно

$$\langle \delta n(\mathbf{r}_1) \delta n(\mathbf{r}_2) \rangle = \bar{n} \delta(\mathbf{r}) + \bar{n} \nu(r), \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \quad (83.1)$$

Корреляционная функция связана со взаимодействием между частицами, и ее асимптотическое поведение на больших расстояниях определяется дальнедействующей, ван-дер-ваальсовой частью этого взаимодействия. Поэтому $\nu(r)$, как и ван-дер-ваальсовы силы, убывает с расстоянием по степенному закону (*J. Enderby, T. Gaskell, N. H. March, 1965*).

Это отражается, разумеется, и на свойствах фурье-компонент корреляционной функции $\nu(\mathbf{k}) \equiv \nu(k)$. Если бы между частицами жидкости действовали только силы с радиусом действия порядка атомных размеров a , то функция $\nu(r)$ убывала бы с расстоянием по экспоненциальному закону с показателем $\sim r/a^1$. В терминах фурье-компонент это значит, что $\nu(k)$ была бы регулярной функцией от ka , разложимой при $ka \ll 1$ по четным степеням ka . Дальнедействующие же силы приводят к появлению в $\nu(k)$ члена (обозначим его $\nu_1(k)$), существенно меняющегося уже в области $k \sim 1/\lambda_0$ (а не $k \sim 1/a$), где λ_0 — характерные длины волн в спектре жидкости ($\lambda_0 \gg a$). В области $ka \ll 1$ параметр $k\lambda_0$ может быть как малым, так и большим; функция $\nu_1(k)$ в этой области имеет сингулярный характер.

Для вычисления корреляционной функции воспользуемся ее связью со второй вариационной производной от свободной энергии тела по его плотности. По определению, эта производная есть функция $\varphi(r)$, фигурирующая в выражении

$$\delta F = \frac{1}{2} \int \varphi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \delta n(\mathbf{r}_1) \delta n(\mathbf{r}_2) d^3x_1 d^3x_2 \quad (83.2)$$

¹⁾ Речь идет о жидкости при температурах $T \sim \Theta$ (где $\Theta \sim \hbar u/a$ — «дебаевская температура» жидкости) и вдали от критической точки. Вблизи критической точки корреляционный радиус неограниченно растет (см. V, § 152, 153). Он растет и при низких температурах, оказываясь при $T \ll \Theta$ порядка величины $\hbar u/T$ (см. ниже § 87).

для изменения свободной энергии, связанного с флуктуациями плотности (при заданной температуре). Фурье-компонента $\varphi(\mathbf{k}) \equiv \varphi(k)$ этой функции связана с искомой функцией $\nu(k)$ соотношением

$$\nu(k) = \frac{T}{\bar{n} \varphi(k)} - 1 \quad (83.3)$$

(см. V, (116.14)). Подчеркнем, что эта формула предполагает классичность флуктуаций, для чего требуется $\hbar\omega \ll T$, где ω — частота колебаний с волновым вектором k . Полагая $\omega \sim ku$ (где u — скорость звука в жидкости), получим условие

$$\hbar ku \ll T, \quad (83.4)$$

что соответствует расстояниям $r \gg \hbar u/T$.

«Регулярная» часть функции $\varphi(k)$, связанная с короткодействующими силами, разложима по степеням k ; ограничиваясь (при $ka \ll 1$) первым членом разложения и обозначив его через b , пишем

$$\varphi(k) \approx b + \varphi_1(k), \quad (83.5)$$

где $\varphi_1(k)$ — интересующая нас «сингулярная» часть функции¹⁾. Ввиду относительной слабости ван-дер-ваальсовых сил $\varphi_1(k) \ll b$, и поэтому результат подстановки (83.5) в (83.3) можно представить в виде

$$\nu(k) = \frac{T}{\bar{n}b} - 1 - \frac{T}{\bar{n}b^2} \varphi_1(k). \quad (83.6)$$

Поскольку связь $\nu(k)$ с $\varphi_1(k)$ оказывается линейной, то функция $\nu(r)$ на больших расстояниях есть просто

$$\nu(r) = -\frac{T}{\bar{n}b^2} \varphi_1(r). \quad (83.7)$$

Первому же (не зависящему от k) члену в (83.6) отвечает координатная функция вида $\text{const} \cdot \delta(\mathbf{r})$, связанная с близкодействующими силами (при пренебрежении их радиусом действия).

¹⁾ Постоянная b выражается через термодинамические величины жидкости согласно $b = \frac{1}{\bar{n}} \left(\frac{\partial P}{\partial \bar{n}} \right)_T$ (см. V, § 152).

Для определения $\varphi_1(r)$ исходим из формулы (80.11) для вариации свободной энергии. Написав в ней

$$\delta\varepsilon(i\zeta_s, \mathbf{r}) = \frac{\partial\varepsilon(i\zeta_s)}{\partial\bar{n}} \delta n(\mathbf{r}), \quad (83.8)$$

мы видим, что выражение

$$-\frac{T}{4\pi\hbar c^2} \sum_{s=0}' \zeta_s^2 \mathcal{D}_{ll}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \frac{\partial\varepsilon(i\zeta_s)}{\partial\bar{n}}$$

представляет собой первую вариационную производную свободной энергии по плотности. Для второго дифференцирования надо, в свою очередь, проварьировать это выражение, т. е. найти¹⁾

$$-\frac{T}{4\pi\hbar c^2} \sum_{s=0}' \zeta_s^2 \delta\mathcal{D}_{ll}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \frac{\partial\varepsilon(i\zeta_s)}{\partial\bar{n}}. \quad (83.9)$$

Сама $\mathcal{D}$ -функция удовлетворяет уравнению (79.8):

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_l} - \delta_{il} \Delta + \frac{\zeta_s^2}{c^2} \varepsilon(i\zeta_s, \mathbf{r}) \delta_{il} \right] \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \\ = -4\pi\hbar \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (83.10)$$

а его варьирование дает уравнение для вариации $\mathcal{D}$ -функции:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_l} - \delta_{il} \Delta + \frac{\zeta_s^2}{c^2} \varepsilon(i\zeta_s) \delta_{il} \right] \delta\mathcal{D}_{lk}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \\ = -\frac{\zeta_s^2}{c^2} \delta\varepsilon(i\zeta_s, \mathbf{r}) \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (83.11)$$

Решение уравнения (83.11) можно написать сразу, заметив, что в силу (83.10) «невозмущенная» функция $\mathcal{D}_{lk}$ является гриновской функцией этого уравнения; поэтому

$$\delta\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\zeta_s^2}{4\pi\hbar c^2} \int \delta\varepsilon(i\zeta_s, \mathbf{r}'') \mathcal{D}_{lk}(\zeta_s; \mathbf{r}'', \mathbf{r}') \mathcal{D}_{li}(\zeta_s; \mathbf{r}'', \mathbf{r}) d^3x''$$

¹⁾ Варьируется только функция $\mathcal{D}_{ll}$. Варьирование функции ε привело бы к члену вида $\text{const} \cdot \delta(\mathbf{r})$ в $\varphi(r)$, не имеющему отношения к дальнедействующим силам.

(здесь использовано также, что $\mathcal{D}_{il}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') = \mathcal{D}_{li}(\mathbf{r}'', \mathbf{r})$). Наконец, подставив сюда (83.8) и затем все вместе в (83.9), получим вторую вариационную производную

$$\varphi_1(r) = -\frac{T}{(4\pi\hbar c)^2} \sum_{s=0}^{\infty} \zeta_s^4 \left[\frac{\partial \varepsilon(i\zeta_s)}{\partial \bar{n}} \right]^2 \mathcal{D}_{lm}^2(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (83.12)$$

($r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$). Эта формула вместе с (83.7) и дает искомое общее выражение корреляционной функции $\nu(r)$ при $r \ll \hbar u/T$ (М. П. Кемоклидзе, Л. П. Путаевский, 1970).

Предположенное уже ранее условие (83.4) для волновых векторов эквивалентно условию $r \gg \hbar u/T$ для расстояний. Если одновременно с этим условием ограничить область значений r также и сверху:

$$\hbar c/T \gg r \gg \hbar u/T, \quad (83.13)$$

то в сумме будут существенны большие значения s , и суммирование по дискретным «частотам» $\zeta_s = 2\pi Ts/\hbar$ можно заменить интегрированием по $ds = \hbar d\zeta/(2\pi T)$:

$$\nu(r) = \frac{T}{\bar{n}b^2\hbar c^4} \int_0^{\infty} \left[\frac{1}{4\pi} \frac{\partial \varepsilon(i\zeta)}{\partial \bar{n}} \right]^2 \zeta^4 \mathcal{D}_{lm}^2(\zeta; \mathbf{r}, \mathbf{r}_2) \frac{d\zeta}{2\pi}. \quad (83.14)$$

Функция $\mathcal{D}_{lm}$ получается из (77.6) заменой $\omega \rightarrow i\zeta$. Произведя дифференцирование и возведя в квадрат, получим

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{lm}^2 &= \frac{2\hbar^2}{r^2} e^{-2\omega} \left(1 + \frac{2}{\omega} + \frac{5}{\omega^2} + \frac{6}{\omega^3} + \frac{3}{\omega^4} \right), \\ \omega &= r\zeta \sqrt{\varepsilon(i\zeta)}/c. \end{aligned} \quad (83.15)$$

Подстановка (83.15) в (83.14) приводит к довольно сложному выражению, которое, однако, упрощается в двух предельных случаях.

В случае «малых» расстояний ($r \ll \lambda_0$, ср. § 81) в интеграле существенна область $\zeta \sim c/\lambda_0$; при этом $r\zeta/c \ll 1$, так что в (83.15) можно заменить экспоненциальный множитель единицей, а в скобках сохранить лишь последний член. Тогда найдем

$$\nu(r) = \frac{A}{r^6}, \quad A = \frac{3\hbar T}{16\pi^3 \bar{n}b^2} \int_0^{\infty} \left[\frac{\partial \varepsilon(i\zeta)}{\partial \bar{n}} \right]^2 \frac{d\zeta}{\varepsilon^2(i\zeta)}, \quad r \ll \lambda_0. \quad (83.16)$$

Фурье-образ этой функции¹⁾

$$\nu(k) = \frac{\pi^2}{12} A k^3, \quad k\lambda_0 \ll 1. \quad (83.17)$$

В обратном случае «больших» расстояний ($r \gg \lambda_0$ в интеграле существенна область $\zeta \sim c/r \ll c/\lambda_0 \sim \omega_0$. Поэтому можно заменить $\varepsilon(i\zeta)$ ее электростатическим значением ε_0 и вынести $(\partial\varepsilon_0/\partial n)^2$ из-под знака интеграла в (83.14). После этого интегрирование производится элементарно (причем все члены в (83.15) дают вклад одинакового порядка величины). В результате получается

$$\nu(r) = \frac{B}{r^7}, \quad B = \frac{23\hbar c T}{64\pi^3 \varepsilon_0^{5/2} \pi b^2} \left(\frac{\partial\varepsilon_0}{\partial n} \right)^2, \quad r \gg \lambda_0. \quad (83.18)$$

Фурье-образ этой функции

$$\nu(k) = -\frac{\pi}{30} B k^4 \ln(k\lambda_0), \quad k\lambda_0 \ll 1. \quad (83.19)$$

§ 84. Операторное выражение для диэлектрической проницаемости

В этом параграфе мы получим полезное представление диэлектрической проницаемости среды через коммутатор оператора плотности зарядов (*Ph. Nozières, D. Pines, 1958*). Эта формула аналогична формуле Кубо с учетом специфики электромагнитного поля.

Будем рассматривать однородную среду, обладающую не только временной, но и пространственной дисперсией диэлектрической проницаемости. Это значит, что индукция $\mathbf{D}(t, \mathbf{r})$ зависит от значений напряженности $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ не только в предыдущие моменты времени, но и в других точках пространства. Такая

¹⁾ Непосредственным интегрированием в сферических координатах в $\mathbf{k}$ -пространстве можно получить

$$I_\nu \equiv \lim_{\lambda \rightarrow +0} \int e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - \lambda k} k^\nu \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = -\frac{\Gamma(\nu+2) \sin(\pi\nu/2)}{2\pi^2 r^{\nu+3}}.$$

Нужный для проверки формулы (83.17) интеграл есть I_3 . Интеграл же, нужный для проверки формулы (83.19) вычисляется как $dI_\nu/d\nu$ при $\nu = 4$.

зависимость может быть представлена в общем виде как

$$D_i(t, \mathbf{r}) = E_i(t, \mathbf{r}) + \iint_0^{\infty} f_{ik}(\tau, \mathbf{r}') E_k(t - \tau, \mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3x' d\tau. \quad (84.1)$$

Для монохроматического поля, в котором $\mathbf{E}, \mathbf{D} \propto \exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)]$, эта связь сводится к

$$D_i = \varepsilon_{ik}(\omega, \mathbf{k}) E_k, \quad (84.2)$$

где

$$\varepsilon_{ik}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ik} + \iint_0^{\infty} f_{ik}(\tau, \mathbf{r}') e^{i(\omega\tau - \mathbf{k}\mathbf{r}')} d^3x' d\tau. \quad (84.3)$$

Мы ограничимся случаем, когда среда не только однородна, но и изотропна и не обладает естественной оптической активностью. Тогда диэлектрическая проницаемость остается тензором, но составленным лишь с помощью вектора $\mathbf{k}$. Общий вид такого тензора

$$\varepsilon_{ik} = \varepsilon_l(\omega, \mathbf{k}) \frac{k_i k_k}{k^2} + \varepsilon_t(\omega, \mathbf{k}) \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right). \quad (84.4)$$

Скалярные функции ε_l и ε_t называют соответственно *продольной* и *поперечной проницаемостями*. Если поле $\mathbf{E}$ потенциально, $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$, то для плоской волны $\mathbf{E}$ параллельно волновому вектору ($\mathbf{E} = -i\mathbf{k}\varphi$) и тогда $\mathbf{D} = \varepsilon_l \mathbf{E}$. Если же поле соленоидально ($\text{div } \mathbf{E} = i\mathbf{k}\mathbf{E} = 0$), то $\mathbf{E}$ перпендикулярно волновому вектору, и тогда $\mathbf{D} = \varepsilon_t \mathbf{E}$.

Напомним (ср. VIII, § 103), что при таком описании свойств среды уже не имеет смысла разделение среднего значения микроскопической плотности тока $\overline{\rho\mathbf{v}}$ (ρ — плотность зарядов) на две части: $\partial\mathbf{P}/\partial t$ и $c \text{ rot } \mathbf{M}$, где $\mathbf{P}$ — электрическая поляризация, а $\mathbf{M}$ — намагниченность среды. Другими словами, уравнения Максвелла записываются в виде

$$\text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \text{rot } \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

без введения (наряду с магнитной индукцией $\mathbf{B}$ — средним значением микроскопической напряженности магнитного поля) еще и вектора $\mathbf{H}$. Все члены, возникающие в результате усреднения

микроскопических токов, предполагаются включенными в определение $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$, $\bar{\rho}\mathbf{v} = \partial\mathbf{P}/\partial t$.

Бóльший интерес в приложениях представляет продольная проницаемость, для которой мы и выведем операторное выражение. Оно получается путем рассмотрения отклика системы на стороннее (т. е. созданное сторонними по отношению к системе источниками) потенциальное электрическое поле $\mathbf{E}_{\text{ст}} = -\nabla\varphi_{\text{ст}}$.

Оператор взаимодействия системы с этим полем записывается как

$$\hat{V} = \int \hat{\rho}(t, \mathbf{r}) \varphi_{\text{ст}}(t, \mathbf{r}) d^3x, \quad (84.5)$$

где $\hat{\rho}(t, \mathbf{r})$ — оператор плотности заряда в системе. Сопоставив это выражение с общей формулой (75.8) и рассматривая $\varphi_{\text{ст}}$ как «обобщенную силу» f , сразу находим, согласно формулам (75.9)–(75.11), для фурье-компонент по времени от средней плотности зарядов

$$\bar{\rho}_{\omega}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} e^{i\omega t} \langle \hat{\rho}(t, \mathbf{r}) \hat{\rho}(0, \mathbf{r}') - \hat{\rho}(0, \mathbf{r}') \hat{\rho}(0, \mathbf{r}) \rangle \varphi_{\omega}^{(\text{ст})}(\mathbf{r}') d^3x' dt.$$

Перейдя здесь также и к фурье-компонентам по пространству и учтя, что в силу однородности системы среднее значение коммутатора зависит только от разности $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, получим

$$\bar{\rho}_{\omega\mathbf{k}} = \alpha(\omega, \mathbf{k}) \varphi_{\omega\mathbf{k}}^{(\text{ст})}, \quad (84.6)$$

где

$$\alpha(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \langle \hat{\rho}(t, \mathbf{r}) \hat{\rho}(0, 0) - \hat{\rho}(0, 0) \hat{\rho}(t, \mathbf{r}) \rangle d^3x dt. \quad (84.7)$$

Средняя плотность зарядов связана с вектором поляризации среды соотношением $\bar{\rho} = -\text{div } \mathbf{P}$ (см. VIII, § 6). Для фурье-компонент отсюда следует

$$\bar{\rho}_{\omega\mathbf{k}} = -i\mathbf{k}\mathbf{P}_{\omega\mathbf{k}} = -i \frac{\varepsilon_l - 1}{4\pi} \mathbf{k}\mathbf{E}_{\omega\mathbf{k}}.$$

С другой стороны, $\Delta\varphi_{\text{ст}} = -4\pi\rho_{\text{ст}}$, где $\rho_{(\text{ст})}$ — плотность зарядов, создающих стороннее поле; индукция же $\mathbf{D}$ связана с этой плотностью уравнением $\text{div } \mathbf{D} = 4\pi\rho_{\text{ст}}$. Из этих двух уравнений находим

$$\varphi_{\omega\mathbf{k}}^{(\text{ст})} = \frac{4\pi}{k^2} \rho_{\omega\mathbf{k}}^{(\text{ст})} = \frac{i\varepsilon_l}{k^2} \mathbf{k}\mathbf{E}_{\omega\mathbf{k}}.$$

Наконец, подставив эти выражения в (84.6), получим искомое выражение продольной проницаемости

$$\frac{1}{\varepsilon_l(\omega, \mathbf{k})} = 1 + \frac{4\pi}{k^2} \alpha(\omega, \mathbf{k}). \quad (84.8)$$

Под $\hat{\rho}(t, \mathbf{r})$ в (84.7) следует понимать, строго говоря, оператор плотности зарядов всех частиц в системе — электронов и ядер. Обычно, однако, во всем существенном интервале значений ω и $\mathbf{k}$ вклад в проницаемость вносят главным образом электроны; поэтому под $\hat{\rho}$ можно понимать $e(\hat{n} - \bar{n})$, где $\hat{n}$ — оператор электронной плотности, а $\bar{n}$ — ее среднее значение.

Формулу (84.7), (84.8) можно преобразовать еще дальше, выразив ее через матричные элементы фурье-компонент оператора $\hat{\rho}$. Для этого предварительно переписываем (84.7) в виде

$$\alpha(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{i}{\hbar V} \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(t) \hat{\rho}_{-\mathbf{k}}(0) - \hat{\rho}_{-\mathbf{k}}(0) \hat{\rho}_{\mathbf{k}}(t) \rangle dt, \quad (84.9)$$

(V — объем системы). Матричные элементы гейзенберговского оператора $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}(t)$ выражаются через матричные элементы прединтергированного оператора согласно

$$(\rho_{\mathbf{k}}(t))_{mn} = e^{i\omega_{mn}t} (\rho_{\mathbf{k}})_{mn}.$$

Раскрыв произведение операторов по правилу матричного умножения и проинтегрировав согласно (31.21), получим окончательно

$$\frac{1}{\varepsilon_l(\omega, \mathbf{k})} = 1 + \frac{4\pi}{\hbar k^2 V} \sum_n |(\rho_{\mathbf{k}})_{n0}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i0} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i0} \right\}, \quad (84.10)$$

где индекс 0 относится к заданному состоянию, для которого ищется проницаемость.

§ 85. Вырожденная плазма

Рассмотрим полностью ионизованную плазму, в которой ионы образуют классический (больцмановский) газ, а электронная компонента уже вырождена. Для этого температура должна удовлетворять условиям

$$\mu_i \ll T \lesssim \mu_e,$$

т. е.

$$\hbar^2 n^{2/3} / m_i \ll T \lesssim \hbar^2 n^{2/3} / m_e \quad (85.1)$$

(μ_e, μ_i — химические потенциалы электронов и ионов в плазме; m_e, m_i — их массы; n — плотность числа частиц; при оценках не делаем различия между n_e и n_i). В то же время будем считать, что плазма лишь слабо неидеальна. Для этого энергия кулоновского взаимодействия двух частиц на расстоянии $l \sim n^{-1/3}$ друг от друга должна быть мала по сравнению с их средней кинетической энергией ε . Для ионов $\varepsilon \sim T$, а для электронов $\varepsilon \sim \mu_e \sim n^{2/3} \hbar^2 / m_e$. Отсюда получаются условия

$$m_e e^2 / \hbar^2 \ll n^{1/3} \ll T / e^2. \quad (85.2)$$

В V, § 80 было показано, что в этих условиях основным источником поправок в термодинамических величинах плазмы (по сравнению с их значениями для идеального газа) является обменное взаимодействие электронов; энергия этого взаимодействия (отнесенная к единице объема плазмы) оказывается величиной $\sim e^2 n^{4/3}$. Корреляционная же поправка (являющаяся основной в классической плазме) в вырожденной плазме мала по сравнению с обменной в отношении $\eta^{1/2}$, где $\eta = m_e e^2 / \hbar^2 n^{1/3} \ll 1$. Тем не менее ее вычисление для вырожденной плазмы представляет методический интерес и дает поучительную иллюстрацию применения диаграммной техники.

Оператор кулоновского взаимодействия частиц плазмы записывается в виде

$$\hat{V} = \frac{e^2}{2} \sum_{a,b} \int \hat{\Psi}_{\alpha\alpha}^{a+} \hat{\Psi}_{b\beta}^{\prime +} \frac{z_a z_b}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \hat{\Psi}_{b\beta}' \hat{\Psi}_{a\alpha} d^3 x d^3 x', \quad (85.3)$$

где индексы a, b нумеруют различные сорта частиц — электроны и разные сорта ионов; $z_a e$ — заряд частиц (для электронов

$z_e = -1$). Взяв ψ -операторы в мацубаровском представлении, мы тем самым получим и оператор взаимодействия в этом представлении. Диаграммная техника для вычисления среднего (по распределению Гиббса) значения $\langle \hat{V} \rangle$ строится затем обычным образом путем перехода к представлению взаимодействия для мацубаровских операторов; возникающий в результате ряд теории возмущений представляет собой разложение $\langle \hat{V} \rangle$ по степеням e^2 .

Выражение (85.3) не содержит «свободных» (по которым не производилось бы интегрирование) переменных. В диаграммной технике это обстоятельство выражается тем, что члены ряда теории возмущений для $\langle \hat{V} \rangle$ изображаются диаграммами, не имеющими свободных концов. Штриховым линиям этих диаграмм (с 4-импульсами $Q = (\zeta_s, \mathbf{q})$) условимся сопоставлять множители¹⁾

$$-\varphi(\mathbf{q}) = -\frac{4\pi}{q^2} \quad (85.4)$$

(не зависящие от ζ_s), т. е. взятую с обратным знаком фурье-компоненту потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ поля единичного заряда. Сплошным линиям должен теперь приписываться (наряду с 4-импульсом $P = (\zeta_s, \mathbf{p})$) еще и индекс a , указывающий сорта частиц, и каждой такой линии сопоставляется множитель $-\mathcal{G}_{a\alpha\beta}^{(0)}$ — взятая с обратным знаком гриновская функция свободных частиц a . При этом сплошные линии диаграммы образуют замкнутые петли, каждая из которых содержит «звенья» с одинаковыми индексами a . Каждой вершине диаграммы — точке пересечения штриховой линии со сплошными линиями сорта a — сопоставляется дополнительно множитель $z_a e$. Каждая фермионная петля вносит дополнительный множитель (-1) . Построенные по этим правилам диаграммы дают члены разложения величины

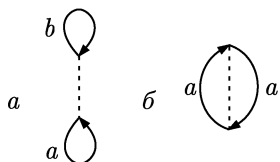
$$-\frac{2}{V} \langle \hat{V} \rangle. \quad (85.5)$$

Множитель V в знаменателе — объем системы; этот множитель возникает в результате того, что подынтегральное выражение в каждом члене ряда зависит только от разностей координат, и поэтому одно из интегрирований по d^3x дает просто объем V . Знак минус в (85.5) — результат определения штриховых линий

¹⁾ Далее в этом параграфе полагаем $\hbar = 1$, $c = 1$ а e обозначает элементарный заряд ($e > 0$).

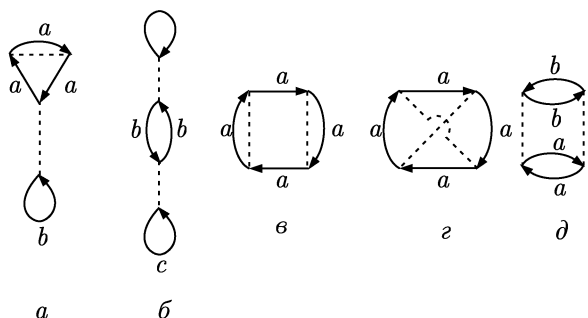
по правилу (85.4), т. е. со знаком минус перед $\varphi(\mathbf{q})$. Множитель же 2 — результат переноса множителя $1/2$ в (85.3) в левую сторону равенства.

В первом порядке теории возмущений имеются диаграммы двух видов:


(85.6)

со всеми возможными a и b . Диаграммы вида (85.6a) возникают от сверток ψ -операторов, взятых в одинаковых точках пространства. Эти диаграммы отвечают прямому кулонову взаимодействию частиц a и b , равномерно распределенных в пространстве: вклады этих диаграмм взаимно сокращаются (при суммировании по всем парам a, b) ввиду электрической нейтральности плазмы. Диаграммы же вида (85.6б) возникают от сверток ψ -операторов разных аргументов и отвечают обменному взаимодействию частиц данного сорта a . Вычисление этой диаграммы приводит к результатам, полученным уже в V § 80.

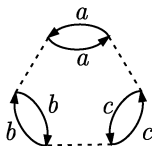
В следующем порядке возникают диаграммы следующих видов:


(85.7)

Диаграммы (85.7a,б) представляют собой поправки к диаграмме (85.6a) и по той же причине взаимно сокращаются при суммировании по всем a, b, c . Диаграммы (85.7в-г) представляют собой малые поправки к энергии обменного взаимодействия и не представляют здесь интереса.

Диаграмма же (85.7d) оказывается «аномально большой» ввиду расходимости соответствующего интеграла. Эта расходимость возникает в результате того, что импульсы $\mathbf{q}$ обеих штриховых линий в диаграмме одинаковы (как это очевидным образом следует из сохранения импульса в вершинах). Поэтому диаграмма содержит интеграл $\int d^3q/q^4$, расходящийся при малых $\mathbf{q}$ как $1/q$.

В следующих приближениях появляются (наряду с диаграммами поправочных типов) также и новые «кольцевые» диаграммы с еще более сильной расходимостью. Так, диаграмма третьего порядка



с тремя штриховыми линиями с одинаковыми импульсами $\mathbf{q}$ содержит интеграл $\int q^{-6} d^3q$, расходящийся, как q^{-3} . Вообще кольцевая диаграмма n -го порядка, образованная n сплошными петлями, соединенными n штриховыми линиями, расходится, как $q^{-(2n-3)}$.

Суммирование бесконечной последовательности кольцевых диаграмм приводит, как мы увидим, к эффективному обрезанию расходимостей на значениях q порядка малости ϵ ; поэтому все эти диаграммы совместно дают вклад в $\langle \hat{V} \rangle$ порядка малости $(e^2)^n / e^{2n-3} = e^3$. Графически этот вклад изобразится суммой (по сортам частиц) скелетных диаграмм

$$\sum_{a,b} \left(\text{diagram with two loops } a \text{ and } b \text{ connected by a thick dashed line} \right), \quad (85.8)$$

где жирная штриховая линия представляет сумму бесконечного множества линейных диаграмм

$$\sum_{a,b,\dots} \text{diagram with two loops } a \text{ and } b \text{ connected by a dashed line} \dots \quad (85.9)$$

с различными числами сплошных петель.

В то время как тонкая штриховая линия изображает потенциал φ кулоновского поля изолированного заряда, толстая штриховая линия представляет потенциал поля, искаженного поляризацией окружающей плазмы; обозначим его посредством Φ . Весь вклад (85.8) и дает, следовательно, искомую корреляционную часть средней энергии взаимодействия в плазме.

Введем обозначение $-\mathcal{P}(\zeta_s, \mathbf{q})/4\pi$ для суммы простых сплошных петель всех родов частиц и будем обозначать эту величину графически светлым кружком:

$$-\frac{\mathcal{P}}{4\pi} = \sum_a \begin{array}{c} \overleftarrow{a} \\ \overrightarrow{a} \end{array} \equiv \bigcirc. \quad (85.10)$$

Отметим, что аргумент ζ_s этой функции пробегает «четные» значения $\zeta_s = 2s\pi T$ независимо от статистики, которой подчиняются частицы a . Действительно, в силу закона сохранения частот в вершине этот аргумент равен разности частот обеих сплошных линий; эта разность «четна» как при «четных», так и при «нечетных» членах разности.

С обозначением (85.10) сумма (85.8) изобразится одной скелетной диаграммой:

$$-\frac{2\langle \hat{V} \rangle_{\text{кор}}}{V} = \text{---} \bigcirc \text{---}. \quad (85.11)$$

Сама же жирная штриховая линия удовлетворяет диаграммному уравнению

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} \quad (85.12)$$

(вполне аналогичному уравнениям (14.4) и (79.13)). В аналитическом виде это уравнение имеет вид

$$-\Phi(\zeta_s, \mathbf{q}) = -\varphi(\mathbf{q}) - \varphi(\mathbf{q}) \frac{\mathcal{P}(\zeta_s, \mathbf{q})}{4\pi} \Phi(\zeta_s, \mathbf{q}),$$

откуда

$$\Phi(\zeta_s, \mathbf{q}) = \frac{4\pi}{q^2 - \mathcal{P}(\zeta_s, \mathbf{q})}. \quad (85.13)$$

На эти формулы полезно взглянуть с несколько иной точки зрения, чтобы установить связь с диаграммами в § 79. Дело в том, что кулоново взаимодействие между зарядами можно рассматривать как результат обмена виртуальными фотонами. При этом, однако, удобнее использовать не калибровку (75.1), а так называемую «кулонову» (см. IV, § 76), в которой $-D_{00}$ как раз равна фурье-компоненте кулоновского потенциала. Пространственная же часть D_{ik} в этой калибровке описывает запаздывание и магнитное взаимодействие, и ею в нерелятивистской плазме можно пренебречь. Поэтому можно считать, что штриховым линиям на диаграмме (85.11) соответствует мацубаровская D_{00} , а функция $\mathcal{P}$ есть не что иное, как компонента $\mathcal{P}_{00}$ поляризационного оператора. Согласно (79.18) можно, следовательно, написать $\mathcal{P}(\zeta_s, \mathbf{q}) = -q^2[\varepsilon_l(i|\zeta_s|, \mathbf{q}) - 1]$ (легко видеть, что при наличии пространственной дисперсии в (79.18) входит именно продольная проницаемость ε_l). Подставляя это выражение в (85.13), находим

$$\Phi(\zeta_s, \mathbf{q}) = \frac{4\pi}{q^2 \varepsilon_l(i|\zeta_s|, \mathbf{q})}, \quad (85.14)$$

т. е., как и следовало, фурье-компоненту потенциала единичного заряда в среде.

Раскрыв по общим правилам мацубаровской техники диаграмму (85.11), находим

$$\begin{aligned} \langle \hat{V} \rangle_{\text{корр}} &= -\frac{VT}{2} \sum_s \int \frac{\mathcal{P}^2(\zeta_s, \mathbf{q})}{(4\pi)^2} \varphi(\mathbf{q}) \Phi(\zeta_s, \mathbf{q}) \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} = \\ &= -\frac{VT}{2} \sum_s \int \frac{\mathcal{P}^2(\zeta_s, \mathbf{q})}{q^2 [q^2 - \mathcal{P}(\zeta_s, \mathbf{q})]} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}. \end{aligned} \quad (85.15)$$

Мы увидим ниже, что основную роль в сумме играет член с $s = 0$, причем соответствующий интеграл определяется областью малых $\mathbf{q}$. Поэтому для вычисления (85.15) фактически достаточно знать предельное значение $\mathcal{P}(0, \mathbf{q})$ при $\mathbf{q} \rightarrow 0$. Эту величину легко определить из простых физических соображений, даже не прибегая к прямому вычислению по диаграммам (85.10).

При $\zeta_s = 0$ функция $\varphi(0, \mathbf{q})$ представляет собой фурье-образ потенциала $\Phi(r)$ электростатического поля единичного заряда в плазме. Невозмущенный потенциал $\varphi(r)$ удовлетворяет уравнению Пуассона с δ -функцией в правой части: $\Delta\varphi = -4\pi\delta(\mathbf{r})$. Уравнение же для потенциала Φ , искаженного поляризацией

плазмы, получается добавлением в правой стороне изменения $\delta\rho$ плотности зарядов в плазме под влиянием самого поля:

$$\Delta\Phi = -4\pi[\delta(\mathbf{r}) + \delta\rho]. \quad (85.16)$$

С другой стороны, при $\mathbf{q} \rightarrow 0$ мы имеем дело с полем, медленно меняющимся вдоль объема плазмы. В таком поле справедливо термодинамическое условие равновесия

$$\mu_a + ez_a\Phi = \text{const} = \mu_a^{(0)}, \quad (85.17)$$

где μ_a — химический потенциал частиц сорта a , $\mu_a^{(0)}$ — его значение в отсутствие поля. Из этого условия находим для изменения плотности частиц n_a :

$$\delta\mu_a = \left(\frac{\partial\mu_a}{\partial n_a} \right)_{T,V} \delta n_a = -ez_a\Phi$$

и затем для изменения плотности заряда:

$$\delta\rho = \sum_a ez_a \delta n_a = - \sum_a (ez_a)^2 \left(\frac{\partial n_a}{\partial \mu_a} \right)_{T,V} \Phi.$$

Подставив это выражение в (85.16), получим уравнение

$$\Delta\Phi - \kappa^2\Phi = -4\pi\delta(\mathbf{r}), \quad (85.18)$$

где введено обозначение

$$\kappa^2 = 4\pi e^2 \sum_a z_a^2 \left(\frac{\partial n_a}{\partial \mu_a} \right)_{T,V}. \quad (85.19)$$

Из (85.18) видно, что $1/\kappa$ есть дебаевский радиус экранирования поля в плазме (ср. V, § 78). Наконец, взяв фурье-компоненту от обеих сторон уравнения (85.18), найдем, что

$$\Phi(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{q^2 + \kappa^2}$$

и сравнение этого выражения с (85.13) дает

$$\mathcal{P}(0, \mathbf{q})|_{\mathbf{q} \rightarrow 0} = -\kappa^2. \quad (85.20)$$

Производя теперь интегрирование в (85.15) с этим значением $\mathcal{P}$, находим

$$\langle \widehat{V} \rangle_{\text{кор}} = -\frac{VT\kappa^4}{2(2\pi)^3} \int \frac{4\pi q^2 dq}{q^2(q^2 + \kappa^2)} = -\frac{VT\kappa^3}{8\pi}. \quad (85.21)$$

Отметим прежде всего, что интеграл оказывается сходящимся на нижнем пределе и основную роль в нем играют $q \sim \kappa$. Для невырожденной ионной компоненты плазмы имеем $\partial n_i / \partial \mu_i = n_i / T$, а для электронов $\partial n_e / \partial \mu_e \sim n_e / \mu_e$. Легко видеть, что в силу условий (85.2) $\kappa \ll n^{1/3}$, а потому и $q \ll n^{1/3}$, т. е. $1/q$ велико по сравнению с межчастичными расстояниями. Этим оправдывается использование условия равновесия (85.17). Для оправдания же пренебрежения всеми членами суммы в (85.15) кроме члена с $s = 0$ замечаем, что, согласно (85.14), поляризация плазмы при отличных от нуля частотах описывается диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_l(\omega, \mathbf{q})$. Согласно известному асимптотическому выражению при больших частотах, $\varepsilon_l(\omega) \approx 1 - 4\pi n_e e^2 / (m_e \omega^2)$, а потому

$$\varepsilon_l(i|\zeta_s|) = 1 + \frac{4\pi n_e e^2}{m_e \zeta_s^2}$$

(см. VIII, § 78). В силу условий (85.1), (85.2) все отличные от нуля частоты $\zeta_s = 2s\pi T \ll (n_e e^2 / m_e)^{1/2}$, и потому для них можно уже считать $\varepsilon(i|\zeta_s|) = 1$, т. е. поляризация плазмы отсутствует и $\mathcal{P}$ мало.

Формула (85.21) выражена через термодинамические переменные T, V, μ_a . Поэтому термодинамический потенциал Ω плазмы может быть найден прямым интегрированием равенства

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial e^2} \right)_{T, V, \mu_a} = \frac{1}{e^2} \langle \widehat{V} \rangle \quad (85.22)$$

(см. V, (80.4)). В результате найдем для корреляционной части Ω следующее выражение (обычные единицы):

$$\Omega_{\text{кор}} = -\frac{VT\kappa^3}{12\pi} = -\frac{2\sqrt{\pi}VT\epsilon^3}{3} \left[\sum_a z_a^2 \left(\frac{\partial n_a}{\partial \mu_a} \right)_{V, T} \right]^{3/2} \quad (85.23)$$

(А. А. Ведынов, 1959). Согласно общей теореме о малых добавках, эта же формула, выраженная через другие термодинамические переменные, дает поправку к другим термодинамическим потенциалам.

Для невырожденной плазмы все производные $\partial n_a / \partial \mu_a = n_a / T$, и тогда (85.23) переходит в формулу

$$F_{\text{кор}} = -\frac{2\sqrt{\pi}Ve^3}{3\sqrt{T}} \left(\sum_a z_a^2 n_a \right)^{3/2} \quad (85.24)$$

для поправки к свободной энергии, совпадающую с V , (78.12).

В случае сильного вырождения электронов в плазме ($T \ll \mu_e$) производная $\partial n_e / \partial \mu_e \sim n_e / \mu_e \ll n_e / T$. В сумме по a в (85.23) можно тогда вообще пренебречь электронным членом, и мы снова получаем формулу (85.24) с той лишь разницей, что сумма в ней берется лишь по сортам ионов в плазме. Таким образом, при сильном вырождении электроны вообще не влияют на радиус экранирования и на корреляционную часть термодинамических величин плазмы.

ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ ФЛУКТУАЦИИ

§ 86. Динамический формфактор жидкости

Рассмотренная в V, § 116 корреляционная функция флуктуаций плотности является частным случаем более общей функции, связывающей флуктуации плотности не только в различных точках пространства, но и в различные моменты времени. В классической теории эта функция определяется как среднее значение

$$\bar{n}\sigma(t; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \delta n(t_1, \mathbf{r}_1) \delta n(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle, \quad (86.1)$$

где $t = t_1 - t_2$; из определения σ вынесен множитель $\bar{n} = N/V$ — средняя плотность числа частиц. Для однородной и изотропной среды (жидкость, газ) функция (86.1) зависит от $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ только через расстояние $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ между двумя точками, что и будет предполагаться ниже.

В квантовой теории аналогичная функция определяется с помощью симметризованного произведения зависящих от времени (гейзенберговских) операторов плотности как

$$\bar{n}\tilde{\sigma}(t, r) = \frac{1}{2} \langle \delta\hat{n}(t_1, \mathbf{r}_1) \delta\hat{n}(t_2, \mathbf{r}_2) + \delta\hat{n}(t_2, \mathbf{r}_2) \delta\hat{n}(t_1, \mathbf{r}_1) \rangle \quad (86.2)$$

(в соответствии с общим способом определения согласно V, (118.4)). Некоторые преимущества, однако, имеет в данном случае несимметричное определение

$$\bar{n}\sigma(t, r) = \langle \delta\hat{n}(t_1, \mathbf{r}_1) \delta\hat{n}(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle, \quad (86.3)$$

для которого сохраним обозначение $\sigma(t, r)$ ¹⁾. В противоположность функции $\tilde{\sigma}(t, r)$ функция $\sigma(t, r)$ не является четной по переменной t ; очевидно, что

$$\tilde{\sigma}(t, r) = \frac{1}{2} [\sigma(t, r) + \sigma(-t, r)]. \quad (86.4)$$

¹⁾ Именно эта функция является непосредственно наблюдаемой величиной, например, при неупругом рассеянии нейтронов в жидкости — см. задачу.

Фурье-образ функции $\sigma(t, r)$ по времени и координатам

$$\sigma(\omega, \mathbf{k}) \equiv \sigma(\omega, k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega t - \mathbf{r}\mathbf{k})} \sigma(t, r) dt d^3x \quad (86.5)$$

называют *динамическим фактором* среды. Ввиду изотропии функции $\sigma(t, r)$ он зависит только от абсолютной величины волнового вектора. Из (86.4) следует, что фурье-образ функции $\tilde{\sigma}(t, r)$

$$\tilde{\sigma}(\omega, k) = \frac{1}{2} [\sigma(\omega, k) + \sigma(-\omega, k)]. \quad (86.6)$$

Чисто пространственная корреляция флуктуаций плотности жидкости определяется функцией (86.1) при $t = 0$: $\sigma(r) = \sigma(t = 0, r) = \tilde{\sigma}(t = 0, r)$. Эта функция связана с введенной в V, § 116 (и использованной в § 83) функцией $\nu(r)$ согласно $\sigma(r) = \nu(r) + \delta(\mathbf{r})$; их фурье-образы: $\sigma(k) = \nu(k) + 1$. Функцию $\sigma(k)$ или $\nu(k)$ называют *статистическим фактором* жидкости. Функции $\sigma(\omega, k)$ и $\sigma(k)$ связаны друг с другом интегральным соотношением

$$\sigma(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\omega, k) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} \Big|_{t=0} = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (86.7)$$

Шредингеровский (не зависящий от времени) оператор плотности дается суммой

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a), \quad (86.8)$$

взятой по всем частицам среды; координаты частиц $\mathbf{r}_a$ играют роль параметров (ср. (24.4)). Нам понадобятся ниже компоненты фурье-разложения этого оператора по координатам

$$\hat{n}_k = \int \hat{n}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3x = \sum_a e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_a}. \quad (86.9)$$

Переход к зависящему от времени (гейзенберговскому) оператору происходит по общему правилу

$$\hat{n}(t, \mathbf{r}) = \exp(i\hat{H}t/\hbar) \hat{n}(\mathbf{r}) \exp(-i\hat{H}t/\hbar), \quad (86.10)$$

где $\hat{H}$ — гамильтониан системы. Этот оператор может быть представлен выражениями (86.8), (86.9) с заменой в них $\mathbf{r}_a$ на $\hat{\mathbf{r}}_a(t)$ — гейзенберговские операторы координат частиц.

Согласно основным принципам статистики, усреднение $\langle \dots \rangle$ можно понимать по-разному, в зависимости от того, через какие термодинамические переменные должен быть выражен результат. Так, если функция σ определяется при заданных полной энергии и числе частиц системы, то усреднение производится по определенному (m -му) стационарному состоянию, т. е. взятием соответствующего диагонального матричного элемента. Для однородной системы (жидкость) зависимость матричных элементов оператора $\delta\hat{n}(t, \mathbf{r})$ от времени и координат дается формулой

$$\langle m | \delta\hat{n}(t, \mathbf{r}) | l \rangle = \langle m | \delta\hat{n}(0) | l \rangle \exp[i(\omega_{ml}t - \mathbf{k}_{ml}\mathbf{r})], \quad (86.11)$$

вполне аналогичной (8.4) (в правой части стоит матричный элемент шредингеровского оператора $\delta\hat{n}(\mathbf{r})$, взятого в точке $\mathbf{r} = 0$). С учетом этой формулы пишем

$$\begin{aligned} \bar{n}\sigma(t, r) &= \sum_l \langle m | \delta\hat{n}(t_1, \mathbf{r}_1) | l \rangle \langle l | \delta\hat{n}(t_2, \mathbf{r}_2) | m \rangle = \\ &= \sum_l |\langle m | \delta\hat{n}(0) | l \rangle|^2 \exp[i(\omega_{ml}t - \mathbf{k}_{ml}\mathbf{r})]. \end{aligned}$$

Фурье-образ этой функции

$$\bar{n}\sigma(\omega, k) = (2\pi)^4 \sum_l |\langle m | \delta\hat{n}(0) | l \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{lm}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_{lm}). \quad (86.12)$$

Суммирование в этих формулах производится по всем состояниям системы с заданным (N_m) числом частиц (поскольку оператор $\delta\hat{n}$ не меняет этого числа).

Если же мы хотим выразить формфактор через температуру и химический потенциал жидкости, то выражение (86.12) должно еще быть усреднено по распределению Гиббса:

$$\begin{aligned} \bar{n}\sigma(\omega, k) &= \\ &= (2\pi)^4 \sum_{l, m} \exp \frac{\Omega - E_m - \mu N_m}{T} |\langle m | \delta\hat{n}(0) | l \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{lm}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_{lm}) \end{aligned} \quad (86.13)$$

(причем во всех членах суммы $N_l = N_m$). Выписав такую же формулу для $\sigma(-\omega, -\mathbf{k}) \equiv \sigma(-\omega, k)$, взаимно переобозначив в ней индексы суммирования l и m и заменив в экспоненциальном множителе $E_l = E_m + \hbar\omega_{lm} = E_m + \hbar\omega$ (последнее равенство — следствие наличия δ -функции), получим

$$\sigma(-\omega, k) = \sigma(\omega, k) e^{-\hbar\omega/T} \quad (86.14)$$

и затем, согласно (86.6),

$$\tilde{\sigma}(\omega, k) = \frac{1}{2} (1 + e^{-\hbar\omega/T}) \sigma(\omega, k). \quad (86.15)$$

Отметим, что из (86.13) (или (86.12)) следует, что функция $\sigma(\omega, k) \geq 0$ при всех значениях ее аргументов. Из соотношения же (86.14) следует, что при нулевой температуре

$$\sigma(\omega, k) = 0 \quad \text{при } \omega < 0, \quad T = 0. \quad (86.16)$$

В макроскопическом пределе ($N, V \rightarrow \infty$ при заданном отношении N/V) «частоток» δ -функций в (86.13) размывается в непрерывную функцию, но δ -функциональные пики в $\sigma(\omega, k)$ остаются при значениях $\omega = \omega(k)$, отвечающих незатухающим элементарным возбуждениям (как это следует из рассуждений, подобных изложенным в § 8). Такие пики возникают, однако, лишь для возбуждений без изменения числа частиц¹).

Покажем, каким образом формфактор жидкости может быть связан с величинами, фигурирующими в общей формулировке флуктуационно-диссипационной теоремы (*D. Pines, Ph. Nozières, 1958*).

Пусть на каждую частицу жидкости действует некоторое внешнее поле, сообщающее частице потенциальную энергию $U(t, \mathbf{r})$. Тогда оператор возбуждения, действующий на жидкость в целом, будет

$$\hat{V}(t) = \int \hat{n}(t, \mathbf{r}) U(t, \mathbf{r}) d^3x. \quad (86.17)$$

Подвергнув все входящие сюда величины фурье-разложению по времени, представим отклик системы (т. е. среднее значение вызванного возмущением изменения плотности) выражением вида

$$\delta \bar{n}(\omega, \mathbf{r}_1) = - \int \alpha(\omega, |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) U(\omega, \mathbf{r}_2) d^3x_2, \quad (86.18)$$

где функция $\alpha(\omega, r)$ играет роль обобщенной восприимчивости. Фурье-компонента по времени от корреляционной функции $\tilde{\sigma}(t, r)$ есть, в обозначениях флуктуационно-диссипационной теоремы:

$$\bar{n} \tilde{\sigma}(\omega, r) = (\delta n(\mathbf{r}_1) \delta n(\mathbf{r}_2))_{\omega}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

¹) Так, в ферми-жидкости $\sigma(\omega, k)$ имеет δ -функциональную особенность при $\omega = ku_0$ (u_0 — скорость нулевого звука), но не имеет таких особенностей, отвечающих фермионной ветви спектра — см. § 91.

Согласно этой теореме эта функция выражается через обобщенную восприимчивость формулой

$$\bar{n}\tilde{\sigma}(\omega, r) = \hbar \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \operatorname{Im} \alpha(\omega, r). \quad (86.19)$$

Такой же формулой выражается фурье-компонента по координатам $\tilde{\sigma}(\omega, k)$ через $\alpha(\omega, k)$ после чего, согласно (86.15), находим для динамического формфактора

$$\bar{n}\sigma(\omega, k) = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\hbar\omega/T}} \operatorname{Im} \alpha(\omega, k). \quad (86.20)$$

Важность этих формул связана прежде всего с тем, что ими устанавливается связь динамического формфактора с функцией с известными общими аналитическими свойствами (по переменной ω); для функции $\alpha(\omega, k)$ эти свойства описаны в V, § 123. Они позволяют также применить к вычислению формфактора общую формулу (ср. (75.11)), согласно которой

$$\begin{aligned} \alpha(\omega, k) = \\ = \frac{i}{\hbar} \iint_0^\infty e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \langle \hat{n}(t, \mathbf{r}) \hat{n}(0, 0) - \hat{n}(0, 0) \hat{n}(t, \mathbf{r}) \rangle dt d^3x. \end{aligned} \quad (86.21)$$

Выразив операторы плотности через ψ -операторы ($n = \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}$), можно привести это выражение к виду двухчастичной функции Грина, для вычисления которой применима диаграммная техника.

Задача

1. Выразить через динамический формфактор вероятность неупругого рассеяния медленных нейтронов в жидкости, состоящей из одинаковых атомов (*G. Placzek*, 1952).

Решение. Согласно методу псевдопотенциала (см. III, § 151), рассеяние медленных нейтронов может быть описано как результат взаимодействия с потенциальной энергией

$$U(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{M} a \hat{n}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где $\hat{n}(\mathbf{r})$ — оператор плотности (86.8); M — приведенная масса атома и нейтрона; a — длина рассеяния медленного нейтрона на отдельном атоме (т. е. взятое с обратным знаком предельное значение амплитуды рассеяния). Вероятность перехода из некоторого начального (i) состояния системы жидкость + нейтрон в конечное (f) состояние в некотором интервале $d\nu_f$ есть

$$d\omega_{fi} = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} U_{fi}(t) dt \right|^2 d\nu_f \quad (2)$$

(см. III, (40.5); для недиагональных матричных элементов U_{fi} в (1) можно писать $\delta\hat{n}$ вместо $\hat{n}$. Волновую функцию начального состояния нейтрона (с импульсом $\mathbf{p}$ и энергией ε) нормируем на одну частицу в объеме V , а волновую функцию конечного состояния (импульс $\mathbf{p}'$ и энергия ε') нормируем на δ -функцию от $\mathbf{p}/2\pi$. Тогда $d\nu_f = d^3p'/(2\pi\hbar)^3$, а матричный элемент возмущения

$$U_{fi}(t) = \frac{2\pi\hbar^2 a}{M\sqrt{V}} \int \delta n_{fi}(t, \mathbf{r}) e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)} d^3x,$$

где $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$, а $\hbar\omega = \varepsilon - \varepsilon'$, а δn_{fi} — матричный элемент по отношению к волновым функциям жидкости. Подставив это выражение в $d\omega_{fi}$, просуммируем вероятность перехода по всем возможным конечным состояниям жидкости. При этом квадрат модуля интеграла записываем в виде двойного интеграла (по $dt dt' d^3x d^3x'$) и замечаем, что

$$\begin{aligned} \sum_f \delta n_{fi}(t, \mathbf{r}) \delta n_{fi}(t', \mathbf{r}')^* &= \sum_f \delta n_{if}(t', \mathbf{r}') \delta n_{fi}(t, \mathbf{r}) = \\ &= \langle i | \delta\hat{n}(t', \mathbf{r}') \delta\hat{n}(t, \mathbf{r}) | i \rangle = \bar{n}\sigma(t' - t, \mathbf{r}' - \mathbf{r}) \end{aligned}$$

(причем σ выражено в функции от полной энергии жидкости в состоянии i). Интегрирование по $d(t' - t) d^3(x' - x)$ дает $\sigma(\omega, k)$, а еще одно интегрирование (скажем, по $dt d^3x$) дает просто объем V и полный интервал времени t . Опустив множитель t , получим в результате вероятность рассеяния в единицу времени

$$w = \frac{4\pi^2\hbar^2}{M^2} \bar{n} a^2 \sigma(\omega, k) \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (3)$$

Это выражение остается, конечно, справедливым и после усреднения по распределению Гиббса, т. е. при формфакторе, выраженном через температуру.

Отметим, что свойство формфактора (86.16) в применении к рассеянию нейтронов выражает собой тот факт, что при $T = 0$ жидкость может только приобретать, но не отдавать энергию. Соотношение же (86.14) выражает собой принцип детального равновесия, так как процессы рассеяния с передачей энергии и импульса $(\omega, \mathbf{k})$ и $(-\omega, -\mathbf{k})$ являются взаимно обратными.

§ 87. Правила сумм для формфактора

Динамический формфактор удовлетворяет определенным интегральным (по частотам ω) соотношениям — *правилам сумм*.

Вывод одного из них основан на правиле коммутации между операторами $\hat{n}_{\mathbf{k}}(t)$ и $\hat{n}_{\mathbf{k}}(t)$. Коммутатор гейзенберговских операторов, взятых в одинаковый момент времени, совпадает с коммутатором шредингеровских операторов $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ и $\hat{n}_{\mathbf{k}}$. Оператор $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ определяется выражением (86.9) и требуемый коммутатор

дается формулой

$$\hat{n}_{\mathbf{k}}\hat{n}_{\mathbf{k}}^+ - \hat{n}_{\mathbf{k}}^+\hat{n}_{\mathbf{k}} = -\frac{i\hbar}{m}k^2 N, \quad (87.1)$$

где m — масса частицы жидкости¹⁾.

Исходим из выражения компоненты фурье-разложения функции $\sigma(t, r)$ только по координатам

$$\bar{n}\sigma(t, k) = \int e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \langle \delta\hat{n}(t_1, \mathbf{r}_1) \delta\hat{n}(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle d^3(x_1 - x_2).$$

Имея в виду, что подынтегральное выражение зависит только от $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, заменяем интегрирование по $d^3(x_1 - x_2)$ интегрированием по $d^3x_1 d^3x_2/V$; произведя его под знаком усреднения, получим

$$\sigma(t, k) = \frac{1}{N} \langle \delta\hat{n}_{\mathbf{k}}(t_1) \delta\hat{n}_{-\mathbf{k}}(t_2) \rangle. \quad (87.2)$$

Вычислим значение производной $\partial\sigma(t, k)/\partial t$ при $t = 0$. Поскольку $\sigma(t, k)$ зависит только от разности $t = t_1 - t_2$, то

$$\frac{\partial\sigma(t, k)}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\sigma}{\partial t_1} - \frac{\partial\sigma}{\partial t_2} \right)$$

и после подстановки сюда (87.2)

$$\frac{\partial\sigma(t, k)}{\partial t} = \frac{1}{2N} \langle \delta\hat{n}_{\mathbf{k}}(t_1) \delta\hat{n}_{-\mathbf{k}}(t_2) - \delta\hat{n}_{\mathbf{k}}(t_1) \delta\hat{n}_{-\mathbf{k}}(t_2) \rangle.$$

Каждый из двух членов этого выражения зависит только от абсолютной величины вектора $\mathbf{k}$; на этом основании заменим во втором члене $\mathbf{k}$ на $-\mathbf{k}$. Положив затем $t_1 = t_2$ и учтя, что $\hat{n}_{-\mathbf{k}} = \hat{n}_{\mathbf{k}}^+$, найдем, что разность в угловых скобках совпадает с коммутатором (87.1). Таким образом, находим

$$\left. \frac{\partial\sigma(t, k)}{\partial t} \right|_{t=0} = -\frac{i\hbar}{2m} k^2.$$

¹⁾ Вычисление этого коммутатора совпадает с вычислением, произведенным в III, § 149 в связи с выводом правила сумм (149.5); вместо числа электронов Z теперь фигурирует полное число частиц жидкости N .

С другой стороны, представив $\sigma(t, k)$ в виде фурье-интеграла по частотам, имеем

$$\left. \frac{\partial \sigma(t, k)}{\partial t} \right|_{t=0} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi} \Big|_{t=0} = -i \int_{-\infty}^{\infty} \omega \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Сравнив оба выражения производной, получим искомое соотношение

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (87.3)$$

(*G. Placzek*, 1952). Подчеркнем, что оно справедливо при любых k . Для перехода в этом соотношении к классическому пределу ($\hbar \rightarrow 0$) надо записать интеграл в его левой стороне в виде

$$\int_0^{\infty} \omega [\sigma(\omega, k) - \sigma(-\omega, k)] \frac{d\omega}{2\pi}$$

и, согласно (86.14), подставить в него

$$\sigma(\omega, k) - \sigma(-\omega, k) \approx \frac{\hbar \omega}{T} \sigma(\omega, k).$$

После этого множители $\hbar$ в обеих сторонах равенства сокращаются и остается

$$\int_0^{\infty} \omega^2 \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi} = T \frac{k^2}{2m}.$$

Применим формулу (87.3) к бозе-жидкости при $T = 0$ и рассмотрим область малых значений k . При $k \rightarrow 0$ главный вклад в интеграл дает δ -функционный пик в формфакторе $\sigma(\omega, k)$, возникающий в (86.13) от переходов с рождением одного фонона (поскольку в основном состоянии жидкости фононы отсутствуют, то переходов с уничтожением фонона при $T = 0$ нет). Этот член имеет вид $A\delta(\omega - uk)$, где $\hbar uk$ — энергия фонона (u — скорость звука). Подставив же его в качестве $\sigma(\omega, k)$ в (87.3) найдем коэффициент A , и в результате

$$\sigma(\omega, k) = \frac{\pi \hbar k}{m u} \delta(\omega - uk). \quad (87.4)$$

Интегрирование этого выражения по формуле (86.7) дает статистический формфактор

$$\sigma(k) = \frac{\hbar k}{2mu} \quad (87.5)$$

(*R. P. Feynman*, 1954)¹). Поскольку эта формула относится к области малых значений k , то ее фурье-обращение дает асимптотическое выражение корреляционной функции при больших r :

$$\nu(r) = -\frac{\hbar}{2\pi^2 m u r^4} \quad (87.6)$$

(для проверки этой формулы см. интеграл, приведенный в примечании на с. 450). При $T = 0$ формула (87.6) справедлива до сколь угодно больших расстояний. При низких, но конечных температурах она верна вплоть до расстояний $r \sim \hbar u/T$, на которых флуктуации перестают быть чисто квантовыми. На еще больших расстояниях закон (87.6) сменяется экспоненциальным убыванием (если отвлечься от вклада ван-дер-ваальсовых сил — см. § 83)²).

Еще одно правило сумм можно получить из установленной в § 86 связи формфактора с некоторой обобщенной восприимчивостью $\alpha(\omega, k)$. Эта связь дается формулой (86.20), которая при $T = 0$ сводится (для $\omega > 0$) к

$$\bar{n}\sigma(\omega, k) = 2\hbar \operatorname{Im} \alpha(\omega, k). \quad (87.7)$$

¹) Формула (87.5), записанная в виде $\sigma(k) = \hbar^2 k^2 / (2m\varepsilon(k))$ ($\varepsilon(k)$ — энергия квазичастицы), строго справедлива лишь при $k \rightarrow 0$. При увеличении k все большую роль играют вклады в $\sigma(k)$ от переходов с рождением нескольких квазичастиц. Если все же пренебречь этим вкладом, можно считать, что эта формула дает связь между формфактором и энергией квазичастиц в бозе-жидкости. При этом максимуму, который σ имеет при $k \sim 1/a$ (a — межатомные расстояния в жидкости), отвечает «ротонный» минимум на кривой $\varepsilon(k)$.

²) Корреляционная функция (87.6) отрицательна (что соответствует отталкиванию между частицами) в противоположность корреляционной функции идеального бозе-газа, где она положительна (см. V, § 117). В связи с этим напомним (§ 25), что в слабо неидеальном бозе-газе энергетический спектр имеет фоновый вид лишь при $k \ll mu/\hbar$ (причем $\hbar/mu \gg a$). Соответствующие расстояния $r \sim 1/k \ll \hbar/mu$, так что при переходе к идеальному газу ($u \rightarrow 0$) область применимости формулы (87.6) отодвигается на бесконечность.

Согласно формулам Крамерса–Кронига (см. V, (123.15))

$$\operatorname{Re} \alpha(\omega, k) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} \alpha(\omega', k)}{\omega' - \omega} d\omega'.$$

Положив здесь $\omega=0$ и учтя, что величина $\alpha(0, k)$ вещественна¹⁾, имеем

$$\alpha(0, k) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{1}{\omega} \operatorname{Im} \alpha(\omega, k) d\omega. \quad (87.8)$$

В пределе $k \rightarrow 0$ имеет место соотношение

$$\alpha(0, k \rightarrow 0) = \left(\frac{\partial \bar{n}}{\partial \mu} \right)_{T=0} = \bar{n} \left(\frac{\partial \bar{n}}{\partial P} \right)_{T=0}. \quad (87.9)$$

Оно следует из того, что в статическом медленно меняющемся в пространстве слабом поле U имеет место условие равновесия $\mu + U = \text{const}$, так что включение внешнего поля эквивалентно изменению химического потенциала на $-U$. В пределе $k \rightarrow 0$ имеем поэтому из (86.18)

$$\delta \bar{n} = - \frac{\partial \bar{n}}{\partial \mu} U \approx -U \int \alpha(0, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d^3(x_1 - x_2) = -U \alpha(0, k=0),$$

откуда и следует (87.9).

Собирая полученные формулы (87.7)–(87.9), найдем, таким образом, следующее правило сумм для формфактора жидкости при $T=0$:

$$\frac{1}{\pi \hbar} \int_0^{\infty} \sigma(\omega, k \rightarrow 0) \frac{d\omega}{\omega} = \frac{\partial \bar{n}}{\partial P} \quad (87.10)$$

(*D. Pines, Ph. Nozières, 1958*).

Задача

1. Найти корреляционную функцию $\nu(r)$ в бозе-жидкости на расстояниях $r \gtrsim \hbar u/T$ при температурах $T \ll T_\lambda$.

Решение. Искомая корреляционная функция определяется формфактором при значениях $k \sim 1/r \lesssim T/\hbar u \ll 1/a$, для которых энергетический спектр жидкости — фононный. При $T \neq 0$ в $\sigma(\omega, k)$ имеется член с $\delta(\omega + ku)$,

¹⁾ Величина $\alpha(\omega=0, \mathbf{r})$ вещественна в силу общих свойств обобщенной восприимчивости. Вещественность фурье-компоненты $\alpha(\omega=0, \mathbf{k})$ следует отсюда ввиду четности функции $\alpha(\omega, \mathbf{r})$ по $\mathbf{r}$.

отвечающий поглощению фонона, наряду с членом с $\delta(\omega - ku)$, отвечающим испусканию фонона. Коэффициенты в этих членах можно определить с помощью (86.14) и (87.3):

$$\sigma(\omega, k) = \frac{\pi \hbar k}{mu} [1 - e^{-\hbar ku/T}]^{-1} \{ \delta(\omega - ku) + e^{-\hbar ku/T} \delta(\omega + ku) \}. \quad (1)$$

Интегрируя это выражение, находим

$$\sigma(k) = \frac{\hbar k}{2mu} \operatorname{cth} \frac{\hbar ku}{2T} \quad (2)$$

и затем

$$\nu(r) = \int e^{ikr} \sigma(k) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{\hbar}{8\pi^2 i m u r} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikr} k^2 \operatorname{cth} \frac{\hbar ku}{2T} dk.$$

Замыкая путь интегрирования по dk бесконечно удаленной полуокружностью в верхней полуплоскости комплексного k , сводим интеграл к сумме вычетов в полюсах (расположенных на мнимой оси). При $r \ll \hbar u/T$ главный вклад в интеграл возникает от вычета в полюсе при $\hbar ku/2T = i\pi$:

$$\nu(r) = -\frac{2\pi T^3}{mu^4 \hbar^2 r} \exp\left(-\frac{2\pi T}{\hbar u} r\right). \quad (3)$$

При условии $aT/\hbar u \ll 1$ характерное расстояние затухания функции $\nu(r)$ оказывается много большим межатомных расстояний, на которых убывают эффекты, связанные с прямым взаимодействием между атомами. При этом в формулу (3) существенно входит $\hbar$, так что описываемая ею корреляция имеет квантовый характер. Отметим, что при выводе мы пренебрегли вкладом ван-дер-ваальсовых сил. Как следует из результатов § 83, этот вклад имеет степенной характер и является главным на достаточно больших расстояниях. Расстояния, на которых происходит переход от (3) к (83.16), зависят от конкретного соотношения между коэффициентами, но область применимости формулы (3) всегда имеется при достаточно низких температурах, поскольку на границе области применимости при $r \sim \hbar u/T$, согласно (3), $\nu \propto T^4$, а согласно (83.16), $\nu \propto T^7$.

§ 88. Гидродинамические флуктуации

В предыдущих параграфах мы рассматривали флуктуации плотности жидкости при произвольных частотах ω и волновых векторах $\mathbf{k}$. При этом, разумеется, конкретный вид корреляционной функции не мог быть найден в общем случае. Это можно, однако, сделать в гидродинамическом пределе, когда длина волны флуктуаций велика по сравнению с характерными микроскопическими размерами (межатомными расстояниями в жидкости, длиной свободного пробега в газе).

Вычисление одновременных корреляционных функций флуктуаций плотности, температуры, скорости и т. п. в неподвижной

жидкости не требует особого исследования: эти флуктуации (в классическом, т. е. неквантовом пределе) описываются обычными термодинамическими формулами, справедливыми для любой среды, находящейся в тепловом равновесии. Корреляции между одновременными флуктуациями в различных точках пространства распространяются на длины порядка величины межатомных расстояний (при этом мы пренебрегаем слабыми дальнедействующими ван-дер-ваальсовыми силами). Но эти расстояния рассматриваются в гидродинамике как бесконечно малые. Поэтому в гидродинамическом пределе одновременные флуктуации в различных точках не коррелированы. Формально это утверждение следует из аддитивности термодинамической величины — минимальной работы $R_{\min}$, требуемой для осуществления флуктуации. Поскольку вероятность флуктуации пропорциональна $\exp(-R_{\min}/T)$, то, представив $R_{\min}$ в виде суммы членов, относящихся к отдельным физически бесконечно малым объемам, мы найдем, что вероятности флуктуаций в этих объемах независимы друг от друга.

Имея в виду эту независимость, можно сразу переписать известные формулы для средних квадратов флуктуаций термодинамических величин в заданной точке пространства (см. V, § 112) в виде формул для корреляционных функций. Так, согласно формуле

$$\langle (\delta T)^2 \rangle = \frac{T^2}{\rho c_v V}$$

для флуктуаций температуры в объеме V (ρ — плотность; c_v — теплоемкость, отнесенная к единице массы среды) пишем сначала

$$\langle \delta T(\mathbf{r}_a) \delta T(\mathbf{r}_b) \rangle = \frac{T^2}{\rho c_v V_a} \delta_{ab},$$

где флуктуации относятся к двум малым объемам V_a и V_b . Устремив затем величину объемов к нулю, получим¹⁾

$$\langle \delta T(\mathbf{r}_1) \delta T(\mathbf{r}_2) \rangle = \frac{T^2}{\rho c_v} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (88.1)$$

¹⁾ Эта и следующие формулы для одновременных корреляций в случае газов справедливы для флуктуаций с длинами волн, большими лишь по сравнению с межмолекулярными расстояниями, но не обязательно большими по сравнению с длиной пробега. Последнее условие требуется, однако, для разновременных корреляционных функций в гидродинамическом приближении (поскольку микроскопический механизм распространения возмущений в газах определяется именно длиной пробега частиц).

Аналогичным образом записываются формулы для флуктуаций других термодинамических величин:

$$\langle \delta \rho(\mathbf{r}_1) \delta \rho(\mathbf{r}_2) \rangle = \rho T \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (88.2)$$

$$\langle \delta P(\mathbf{r}_1) \delta P(\mathbf{r}_2) \rangle = \rho T \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_S \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \rho T u^2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (88.3)$$

$$\langle \delta s(\mathbf{r}_1) \delta s(\mathbf{r}_2) \rangle = \frac{c_p}{\rho} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (88.4)$$

(P — давление; s — энтропия единицы массы среды); при этом флуктуации пар величин ρ , T и P , s независимы. Выпишем также формулу для флуктуаций макроскопической скорости жидкости $\mathbf{v}$ (равной нулю в равновесии):

$$\langle \delta v_i(\mathbf{r}_1) \delta v_k(\mathbf{r}_2) \rangle = \frac{T}{\rho} \delta_{ik} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (88.5)$$

Специфичным для гидродинамики является вопрос о временных корреляциях флуктуаций, а также вопрос о флуктуациях в движущейся жидкости. Решение этих вопросов требует учета диссипативных процессов в жидкости — вязкости и теплопроводности.

Построение общей теории флуктуационных явлений в гидродинамике сводится к составлению «уравнений движения» для флуктуирующих величин. Это может быть сделано путем введения соответствующих дополнительных членов в гидродинамические уравнения (*Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, 1957*).

Уравнения гидродинамики, написанные в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (88.6)$$

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \rho v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma'_{ik}}{\partial x_k}, \quad (88.7)$$

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla s \right) = \frac{1}{2} \sigma'_{ik} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) - \operatorname{div} \mathbf{q} \quad (88.8)$$

без спецификации вида тензора напряжений σ'_{ik} и вектора потока тепла $\mathbf{q}$, выражают собой просто сохранение массы, импульса и энергии. Поэтому в такой форме они справедливы для любого движения, в том числе для флуктуационных изменений состояния жидкости. При этом под ρ , P , $\mathbf{v}$, ... надо понимать сумму значений величин ρ_0 , P_0 , $\mathbf{v}_0$, ... в основном движении и их флуктуационных колебаний $\delta \rho$, δP , $\delta \mathbf{v}$, ... (по последним, конечно, уравнения всегда могут быть линеаризованы).

Обычные выражения для тензора напряжений и потока тепла связывают их соответственно с градиентами скорости и градиентом температуры. При флуктуациях в жидкости возникают также местные спонтанные напряжения и потоки тепла, не связанные с указанными градиентами; обозначим их через s_{ik} и g и будем называть «случайными». Таким образом, запишем

$$\sigma'_{ik} = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \operatorname{div} \mathbf{v} \right) + \zeta \delta_{ik} \operatorname{div} \mathbf{v} + s_{ik}, \quad (88.9)$$

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T + \mathbf{g} \quad (88.10)$$

(η, ζ — коэффициенты вязкости; κ — коэффициент теплопроводности).

Задача заключается теперь в установлении свойств s_{ik} и $\mathbf{g}$ — в определении их корреляционных функций. Для простоты проведем все рассуждения для естественного в гидродинамике случая некантовых флуктуаций; это значит, что частоты флуктуационных колебаний предполагаются удовлетворяющими условию $\hbar\omega \ll T$. При этом коэффициенты вязкости и теплопроводности будем считать не диспергирующими, т. е. не зависящими от частоты колебаний.

В общей теории флуктуаций (изложенной в V, § 119–122) рассматривается дискретный ряд флуктуирующих величин $x_1, x_2, \dots$, между тем как здесь мы имеем дело с непрерывным рядом (значения $\rho, P, \dots$ в каждой точке жидкости). Это несущественное затруднение мы обойдем, разделив объем тела на малые, но конечные участки ΔV и рассматривая некоторые средние значения величин в каждом из них; переход к бесконечно малым элементам произведем в окончательных формулах.

Будем рассматривать формулы (88.9), (88.10) в качестве уравнений

$$\dot{x}_a = - \sum_b \gamma_{ab} X_b + y_b \quad (88.11)$$

общей теории квазистационарных флуктуаций (см. V, (122.20)), причем в качестве величин $\dot{x}_a$ выберем значения компонент тензора σ'_{ik} и вектора $\mathbf{q}$ в каждом из участков ΔV ; тогда величинами y_a являются s_{ik} и g :

$$\begin{aligned} \dot{x}_a &\rightarrow \sigma'_{ik}, & q_i, \\ y_a &\rightarrow s_{ik}, & g_i. \end{aligned} \quad (88.12)$$

Смысл же термодинамически взаимных величин X_a выясняется путем привлечения формулы для скорости изменения полной

энтропии жидкости S . Обычным путем (ср. IV, § 49) с помощью уравнений (88.8)–(88.10) находим

$$\dot{S} = \int \left\{ \frac{\sigma'_{ik}}{2T} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) - \frac{\mathbf{q} \nabla T}{T^2} \right\} dV. \quad (88.13)$$

Заменив этот интеграл суммой по участкам ΔV и сравнив его затем с выражением

$$\dot{S} = - \sum_a \dot{x}_a X_a,$$

найдем, что

$$X_a \rightarrow -\frac{1}{2T} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) \Delta V, \quad \frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_i} \Delta V. \quad (88.14)$$

Теперь легко найти коэффициенты γ_{ab} , непосредственно определяющие искомые корреляции согласно формулам

$$\langle y_a(t_1) y_b(t_2) \rangle = (\gamma_{ab} + \gamma_{ba}) \delta(t_1 - t_2) \quad (88.15)$$

(см. V, (122.21a)).

Прежде всего замечаем, что в формулах (88.9), (88.10) нет членов, которые связали бы σ'_{ik} с градиентом температуры, а $\mathbf{q}$ — с градиентами скоростей. Это значит, что соответствующие коэффициенты $\gamma_{ab} = 0$ и в силу (88.15) имеем

$$\langle s_{ik}(t_1, \mathbf{r}_1) g_l(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle = 0, \quad (88.16)$$

т. е. значения s_{ik} и $\mathbf{g}$ вообще не коррелированы друг с другом.

Далее, коэффициенты, связывающие значения q_i со значениями $(\Delta V/T^2) \partial T / \partial x_i$, равны нулю, если эти величины взяты в разных участках ΔV , и равны $\gamma_{ik} = \kappa T^2 \delta_{ik} / \Delta V$, если они берутся в одном и том же участке. С этими значениями γ_{ab} по формуле (88.15) получим после перехода к пределу $\Delta V \rightarrow 0$:

$$\langle g_i(t_1, \mathbf{r}_1) g_k(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle = 2\kappa T^2 \delta_{ik} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2). \quad (88.17)$$

Аналогичным образом получаются формулы для корреляционных функций случайного тензора напряжений

$$\begin{aligned} \langle s_{ik}(t_1, \mathbf{r}_1) s_{lm}(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle = \\ = 2T \left[\eta (\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) + \left(\zeta - \frac{2\eta}{3} \right) \delta_{ik} \delta_{lm} \right] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2). \end{aligned} \quad (88.18)$$

Формулы (88.16)–(88.18) решают, в принципе, поставленный вопрос о вычислении гидродинамических флуктуаций в любом конкретном случае. Ход решения задач при этом таков. Рассматривая s_{ik} и $\mathbf{g}$ как заданные функции координат и времени, решаем формально линейаризованные уравнения (88.6)–(88.8) относительно величин $\delta\rho$, $\delta\mathbf{v}$, учитывая при этом необходимые гидродинамические граничные условия. В результате получим эти величины, выраженные в виде некоторых линейных функционалов от s_{ik} , $\mathbf{g}$. Соответственно любая квадратичная по $\delta\rho$, $\delta\mathbf{v}$, ... величина выражается через квадратичные функционалы от s_{ik} , $\mathbf{g}$, после чего их среднее значение вычисляется с помощью формул (88.16)–(88.18), и вспомогательные величины s_{ik} , $\mathbf{g}$ выпадают из ответа.

Выпишем формулы (88.16)–(88.18) также и в фурье-компонентах по частотам, причем сделаем это сразу в виде, обобщающем формулы на случай квантовых флуктуаций. Согласно общим правилам флуктуационно-диссипационной теоремы, такое обобщение достигается путем введения дополнительного множителя $(\hbar\omega/2T) \operatorname{cth}(\hbar\omega/2T)$ (обращающегося в единицу в классическом случае, $\hbar\omega \ll T$). При наличии дисперсии вязкости и теплопроводности величины η , ζ , κ являются комплексными функциями частоты; при этом в формулах для флуктуаций η , ζ , κ заменяются вещественными частями этих функций:

$$(s_{ik}^{(1)} g_l^{(2)})_\omega = 0, \quad (88.19)$$

$$(g_i^{(1)} g_k^{(2)})_\omega = \delta_{ik} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hbar\omega T \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \cdot \operatorname{Re} \kappa(\omega), \quad (88.20)$$

$$(s_{ik}^{(1)} s_{lm}^{(2)})_\omega = \hbar\omega \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \times \\ \times \left[\left(\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \delta_{lm} \right) \operatorname{Re} \eta(\omega) + \delta_{ik} \delta_{lm} \operatorname{Re} \zeta(\omega) \right]. \quad (88.21)$$

§ 89. Гидродинамические флуктуации в неограниченной среде

В этом параграфе мы рассмотрим гидродинамические флуктуации в неограниченной неподвижной жидкости. Эта задача может быть, конечно, решена изложенным в предыдущем параграфе методом. Мы, однако, сделаем это здесь другим способом, проиллюстрировав тем самым альтернативный метод решения задач о гидродинамических флуктуациях.

Этот метод использует общую теорию квазистационарных флуктуаций в ее более ранней стадии, до введения случайных

сил. Напомним относящиеся сюда общие формулы (см. V, § 122). Пусть

$$\dot{x}_a = - \sum_b \lambda_{ab} x_b \quad (89.1)$$

— макроскопические «уравнения движения» для набора величин $x_a(t)$, описывающих неравновесное состояние системы (в равновесии все $x_a = 0$); эти уравнения справедливы, если величины x_a велики по сравнению с их средними флуктуациями (но в то же время настолько малы, чтобы была допустима линеаризация уравнений движения). Тогда можно утверждать, что таким же уравнениям удовлетворяют (при $t > 0$) корреляционные функции флуктуаций

$$\frac{d}{dt} \langle x_a(t) x_c(0) \rangle = - \sum_b \lambda_{ab} \langle x_b(t) x_c(0) \rangle, \quad t > 0. \quad (89.2)$$

Начальным условием к этим уравнениям служат равенства

$$\langle x_a(t) x_c(0) \rangle|_{t=+0} = \langle x_a x_c \rangle, \quad (89.3)$$

где $\langle x_a x_c \rangle$ — одновременная корреляционная функция, предполагаемая известной. В область $t < 0$ корреляционные функции продолжаются по правилу

$$\langle x_a(t) x_c(0) \rangle = \pm \langle x_a(-t) x_c(0) \rangle, \quad (89.4)$$

причем верхний знак относится к случаю, когда обе величины x_a и x_c четны (или обе нечетны) по отношению к обращению времени, а нижний знак — к случаю, когда одна из величин четна, а другая нечетна. Решение уравнения (89.2) с условием (89.3) осуществляется путем одностороннего преобразования Фурье: умножив уравнение на $e^{i\omega t}$ и проинтегрировав по t в пределах от 0 до ∞ (причем интеграл в левой стороне уравнения преобразуется по частям), получим систему уравнений

$$-i\omega (x_a x_c)_\omega^{(+)} = - \sum_b \lambda_{ab} (x_b x_c)_\omega^{(+)} + \langle x_a x_c \rangle \quad (89.5)$$

для величин (функций частоты)

$$(x_a x_b)_\omega^{(+)} = \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle x_a(t) x_b(0) \rangle dt. \quad (89.6)$$

Обычные же фурье-компоненты корреляционной функции выражаются через величины (89.6) согласно

$$\begin{aligned} (x_a x_b)_\omega &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle x_a(t) x_b(0) \rangle dt = \\ &= (x_a x_b)_\omega^{(+)} \pm [(x_a x_b)_\omega^{(+)}]^* = (x_a x_b)_\omega^{(+)} + (x_b x_a)_{-\omega}^{(+)}, \end{aligned} \quad (89.7)$$

где знаки $\pm$ отвечают знакам в (89.4).

Переходя к поставленной задаче о флуктуациях в неподвижной жидкости, прежде всего линеаризуем гидродинамические уравнения (88.6)–(88.8) с σ'_{ik} и $\mathbf{q}$ из (88.9), (88.10) (без последних членов). Положив $\rho = \rho_0 + \delta\rho$, $\mathbf{v} = \delta\mathbf{v}$, ... и отбрасывая нелинейные члены, получим

$$\frac{\partial \delta\rho}{\partial t} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (89.8)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \delta P + \eta \Delta \mathbf{v} + \left(\zeta + \frac{\eta}{3} \right) \nabla \operatorname{div} \mathbf{v}, \quad (89.9)$$

$$\frac{\partial \delta s}{\partial t} = \frac{\kappa}{\rho T} \Delta \delta T \quad (89.10)$$

(после линеаризации индекс 0 у постоянных величин $\rho_0, \dots$ отбрасываем). В уравнениях (89.8)–(89.10) будет удобным сразу разделить скорость на потенциальную («продольную») и вихревую («поперечную») части $\mathbf{v}^{(l)}$ и $\mathbf{v}^{(t)}$ согласно определению

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^{(l)} + \mathbf{v}^{(t)}, \quad (89.11)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{v}^{(t)} = 0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{v}^{(l)} = 0.$$

В (89.8) остается только продольная скорость:

$$\frac{\partial \delta\rho}{\partial t} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v}^{(l)} = 0, \quad (89.12)$$

а (89.9), распадается на два уравнения

$$\frac{\partial \mathbf{v}^{(t)}}{\partial t} = \frac{\eta}{\rho} \Delta \mathbf{v}^{(t)}, \quad (89.13)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}^{(l)}}{\partial t} = -\nabla \delta P + \left(\zeta + \frac{4\eta}{3} \right) \nabla \operatorname{div} \mathbf{v}^{(l)}. \quad (89.14)$$

Уравнение для поперечной скорости независимо от остальных уравнений. Соответственно этому, и для корреляционной функции ее флуктуаций имеем одно уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle v_i^{(t)}(t, \mathbf{r}) v_k^{(l)}(0, 0) \rangle - \nu \Delta \langle v_i^{(t)}(t, \mathbf{r}) v_k^{(l)}(0, 0) \rangle = 0 \quad (89.15)$$

(где $\nu = \eta/\rho$ — кинематическая вязкость). Подвергнув его одностороннему преобразованию Фурье, получим

$$-i\omega(v_i^{(t)}(\mathbf{r})v_k^{(t)}(0))_{\omega}^{(+)} - \nu\Delta(v_i^{(t)}(\mathbf{r})v_k^{(t)}(0))_{\omega}^{(+)} = \langle v_i^{(t)}(\mathbf{r})v_k^{(t)}(0) \rangle$$

(где справа стоит одновременная корреляционная функция), или, переходя к фурье-компонентам по координатам:

$$(v_i^{(t)}v_k^{(t)})_{\omega\mathbf{k}} = \frac{(v_i^{(t)}v_k^{(t)})_{\mathbf{k}}}{\nu k^2 - i\omega}.$$

Одновременная корреляционная функция флуктуаций скорости дается формулой (88.5); перейдя в ней к фурье-компонентам и отделив поперечную часть, имеем

$$(v_i^{(t)}v_k^{(t)})_{\mathbf{k}} = \frac{T}{\rho} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right). \quad (89.16)$$

Подставив это в предыдущую формулу, окончательно получим¹⁾.

$$(v_i^{(t)}v_k^{(t)})_{\omega\mathbf{k}} = 2 \operatorname{Re} (v_i^{(t)}v_k^{(t)})_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} = \frac{T}{\rho} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) \frac{\nu k^2}{\omega^2 + \nu^2 k^4}. \quad (89.17)$$

Для остальных переменных имеем систему связанных друг с другом уравнений (89.10), (89.12), (89.14). Эта система, однако, упрощается в предельных случаях больших или малых частот. Дело в том, что возмущения продольной скорости и давления распространяются в жидкости со скоростью звука u , а возмущенная энтропия — согласно уравнению теплопроводности. Последний механизм требует времени $\sim 1/\chi k^2$ для распространения возмущения на расстояние $\sim 1/k$ ($\chi = \kappa/\rho c_p$ — температуропроводность среды). Поэтому для частот, удовлетворяющих (при заданном значении волнового вектора) условию

$$\chi k^2 \ll \omega \sim ku, \quad (89.18)$$

¹⁾ Легко видеть, что путем интегрирования выражения (89.17) по $d\omega/2\pi$ мы вернемся, как и следовало, к одновременной корреляционной функции.

можно считать, что флуктуируют только $\mathbf{v}^{(l)}$ и P при постоянной энтропии. Напротив, при

$$\chi k^2 \sim \omega \ll ku \quad (89.19)$$

происходят изобарические флуктуации энтропии¹⁾.

Рассмотрим сначала первую, высокочастотную область (89.18) и определим, например, флуктуации давления.

Уравнение (89.14), переписанное для корреляционных функций, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{v}^{(l)}(t, \mathbf{r}) \delta P(0, 0) \rangle = & -\text{grad} \langle \delta P(t, \mathbf{r}) \delta P(0, 0) \rangle + \\ & + \left(\zeta + \frac{4\eta}{3} \right) \text{grad div} \langle \mathbf{v}^{(l)}(t, \mathbf{r}) \delta P(0, 0) \rangle, \end{aligned}$$

а начальным условием к нему служит равенство нулю одно-временной корреляции $\mathbf{v}^{(l)}$ и δP . Произведя одностороннее преобразование Фурье по времени и полное преобразование по координатам, получим отсюда

$$-i\omega\rho(\mathbf{v}^{(l)}\delta P)_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} = -i\mathbf{k}(\delta P^2)_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} - \left(\zeta + \frac{4\eta}{3} \right) \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{v}^{(l)}\delta P)_{\omega\mathbf{k}}^{(+)}. \quad (89.20)$$

Далее, в уравнении (89.12) пишем

$$\delta\rho = \left(\frac{\partial\rho}{\partial P} \right)_s \delta P + \left(\frac{\partial\rho}{\partial s} \right)_P \delta s = \frac{1}{u^2} \delta P - \rho^2 \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_s \delta s,$$

а $\partial\delta s/\partial t$ выражаем с помощью уравнения (89.10), написанного в виде

$$\frac{\partial\delta s}{\partial t} = \frac{\varkappa}{\rho T} \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_s \Delta\delta P$$

(членом с $\Delta\delta s$ в правой стороне пренебрегаем по сравнению с $\partial\delta s/\partial t$ в силу условия $\chi k^2 \ll \omega$). Это приводит к уравнению

$$\frac{1}{u^2} \frac{\partial\delta P}{\partial t} - \frac{\varkappa\rho}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_s^2 \Delta\delta P + \rho \text{div} \mathbf{v}^{(l)} = 0.$$

Соответствующее уравнение для корреляционных функций снова получается отсюда заменой δP и $\mathbf{v}^{(l)}$ соответственно на

¹⁾ Неравенство $\chi k^2 \ll ku$ выполняется в гидродинамической области всегда. Так, в газах $u \sim v_T$ и $\chi \sim v_T l$, где v_T — средняя тепловая скорость частиц, а l — их длина пробега. Поэтому неравенство $\chi k \ll u$ эквивалентно условию $kl \ll 1$.

$\langle \delta P(t, \mathbf{r}) \delta P(0, 0) \rangle$ и $\langle \mathbf{v}^{(l)}(t, \mathbf{r}) \delta P(0, 0) \rangle$, а начальным условием к нему служит (88.3). После фурье-преобразований это уравнение дает

$$\left[-\frac{i\omega}{u^2} + \frac{k^2 \kappa \rho}{T} \left(\frac{\partial P}{\partial P} \right)_s \right] (\delta P^2)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} + i\rho (\mathbf{k} \mathbf{v}^{(l)} \delta P)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} = \rho T. \quad (89.21)$$

Из двух уравнений (89.20), (89.21) находим после некоторых преобразований

$$(\delta P^2)_{\omega \mathbf{k}} = 2 \operatorname{Re} (\delta P^2)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} = 2 \operatorname{Re} \frac{k^2 \rho T u^4 (i + 2\gamma_T \omega / u k^2)}{\omega (\omega^2 - k^2 u^2 + 2i\omega u \gamma)}, \quad (89.22)$$

где

$$\gamma = \frac{k^2}{2\rho u} \left[\zeta + \frac{4\eta}{3} + \frac{\kappa u^2 \rho^2}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_s \right] \quad (89.23)$$

— коэффициент поглощения звука в среде (см. VI, § 79), а γ_T — его часть, связанная с теплопроводностью. Выпишем окончательный ответ для области частот вблизи значений $\omega = \pm k u$, где флуктуации особенно велики:

$$(\delta P^2)_{\omega \mathbf{k}} = \frac{\rho T u^3 \gamma}{(\omega \mp k u)^2 + u^2 \gamma^2}. \quad (89.24)$$

Эта формула справедлива при $|\omega \mp k u| \lesssim u \gamma^{\frac{1}{2}}$.

В низкочастотной области (89.19) достаточно рассмотреть, как уже было указано, флуктуации энтропии, пренебрегая при этом флуктуациями давления. Это значит, что в уравнении (89.10) можно положить

$$\delta T \approx \left(\frac{\partial T}{\partial s} \right)_P \delta s = \frac{T}{c_p} \delta s$$

(теплоемкость c_p относится к единице массы). Поэтому для искомой корреляционной функции имеем уравнение того же типа, что и (89.15), а начальное условие к нему дается выражением (88.4). В результате найдем

$$(\delta s^2)_{\omega \mathbf{k}} = \frac{2c_p}{\rho} \frac{\chi k^2}{\omega^2 + \chi^2 k^4}. \quad (89.25)$$

¹⁾ Напомним (см. VI, § 79), что гидродинамический коэффициент поглощения звука всегда мал в газах (неравенство $\gamma \ll k$ автоматически следует из условия $kl \ll 1$) и мал в жидкостях, в которых нет существенной дисперсии звука.

Задача

1. Найти корреляционную функцию флуктуаций числа растворенных частиц в слабом растворе.

Решение. Плотность n числа растворенных частиц удовлетворяет уравнению диффузии

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \Delta n$$

(D — коэффициент диффузии). В слабом растворе одновременные значения плотности в различных точках пространства не коррелированы друг с другом (подобно отсутствию одновременной корреляции для плотности идеального газа); поэтому одновременная корреляционная функция

$$\langle \delta n(\mathbf{r}_1) \delta n(\mathbf{r}_2) \rangle = \bar{n} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

Аналогично формуле (89.25), находим

$$(\delta n^2)_{\omega \mathbf{k}} = \frac{2\bar{n}k^2 D}{\omega^2 + k^4 D}.$$

В этом решении мы пренебрегаем термодиффузией, вследствие чего флуктуации n могут рассматриваться независимо от флуктуаций температуры.

2. Найти корреляционную функцию флуктуаций давления в жидкости, обладающей большой диспергирующей второй вязкостью $\zeta(\omega)$ (связанной с медленной релаксацией некоторого параметра).

Решение. Наличие медленных процессов релаксации приводит к появлению второй вязкости вида

$$\zeta(\omega) = \frac{\tau \rho}{1 - i\omega \tau} (u_\infty^2 - u_0^2),$$

где τ — время релаксации; u_0 — равновесная скорость звука; u_∞ — скорость звука при постоянном значении релаксационного параметра (см. VI, § 81). Уравнения (89.20), (89.21), а с ними и (89.22) справедливы также и при наличии дисперсии. Положив $\zeta = \zeta(\omega)$ и пренебрегая членами, происходящими от η и κ , получим после вычисления

$$(\delta P^2)_{\omega \mathbf{k}} = \frac{2T\tau\rho u_0^4(u_\infty^2 - u_0^2)}{(u_0^2 - \omega^2/k^2)^2 + \omega^2\tau^2(u_\infty^2 - \omega^2/k^2)^2}.$$

§ 90. Операторные выражения для кинетических коэффициентов

Полученным в § 88 формулам (89.20), (89.21) можно придать новый аспект, прочтя их «справа налево», т. е. рассматривая их как выражения для коэффициентов теплопроводности и вязкости. При этом корреляционные функции в левых частях равенства можно выразить, согласно их определению, через операторы некоторых величин, имеющих микроскопический смысл; в результате через эти операторы оказываются выраженными кинетические коэффициенты жидкости.

Прежде всего надо учесть, что отсутствие корреляции между флуктуациями «случайных» потоков энергии и импульса в различных точках пространства (δ -функция $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ в формулах (89.20), (89.21)) является следствием гидродинамического приближения; последнее справедливо лишь при малых значениях волнового вектора. Чтобы выразить это условие в явном виде, запишем формулы в компонентах фурье-разложения по пространственным координатам (что сводится к замене множителей $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ единицей) и перейдем к пределу $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Так, формулу (88.20), свернутую по паре индексов i, k ,

$$(\mathbf{g}^{(1)} \mathbf{g}^{(2)})_{\omega} = 3 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hbar \omega T \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T} \cdot \operatorname{Re} \kappa(\omega)$$

запишем в виде

$$\operatorname{Re} \kappa(\omega) = \frac{1}{3\hbar\omega T} \operatorname{th} \frac{\hbar\omega}{2T} \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} (\mathbf{g}^2)_{\omega \mathbf{k}}. \quad (90.1)$$

Легко видеть, что при такой записи можно заменить в этой формуле «случайный» поток тепла $\mathbf{g}$ на полный поток энергии, который обозначим через $\mathbf{Q}$. Последний, как известно из гидродинамики, складывается из потока конвективного переноса энергии и потока тепла $\mathbf{q}$:

$$\mathbf{Q} = \left(\frac{v^2}{2} + w \right) \rho \mathbf{v} + \mathbf{q} \approx \rho w \mathbf{v} - \kappa \nabla T + \mathbf{g} \quad (90.2)$$

(w — тепловая функция единицы массы жидкости; в последнем выражении опущен член с более высокой степенью флуктуационной скорости $\mathbf{v}$). Но при малых $\mathbf{k}$ флуктуации реальных физических величин ($\mathbf{v}$, T , ρ и т. п.) содержат, по сравнению с флуктуациями случайных потоков, лишнюю степень $\mathbf{k}$, и потому в пределе $\mathbf{k} \rightarrow 0$ флуктуации $\mathbf{g}$ совпадают с флуктуациями $\mathbf{Q}$. Это сразу очевидно уже из того, что в уравнении движения гидродинамических флуктуаций (88.6)–(88.8) потоки $\mathbf{g}$ и s_{ik} входят только под знаком пространственных производных, а указанные физические величины — также и в виде производных по времени; после перехода к фурье-компонентам, следовательно, вторые оказываются порядка k/ω по отношению к первым.

В отличие от $\mathbf{g}$, полный поток энергии $\mathbf{Q}$ есть величина, имеющая прямой механический смысл, и ей отвечает определенный квантовомеханический оператор $\hat{\mathbf{Q}}(t, \mathbf{r})$, выражающийся через операторы динамических переменных частиц среды. Вспомнив определение корреляционной функции через операторы (гейзенберговские) соответствующей величины, приходим, таким

образом, к формуле

$$\operatorname{Re} \kappa(\omega) = \frac{1}{6\hbar\omega T} \operatorname{th} \frac{\hbar\omega}{2T} \times \\ \times \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \int \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \langle \hat{\mathbf{Q}}(t, \mathbf{r}) \hat{\mathbf{Q}}(0, 0) + \hat{\mathbf{Q}}(0, 0) \hat{\mathbf{Q}}(t, \mathbf{r}) \rangle dt d^3x \quad (90.3)$$

(*M. S. Green*, 1954).

Более целесообразное представление функции $\kappa(\omega)$ получится, однако, если воспользоваться формулой, выражающей корреляционную функцию через коммутатор соответствующих операторов.

Если $x_a(\mathbf{r})$, $x_b(\mathbf{r})$ — две флуктуирующие величины (равные нулю в равновесии и ведущие себя одинаковым образом при обращении времени), то их корреляционная функция, согласно (76.1) и (75.11), может быть представлена в виде

$$(x_a^{(1)} x_b^{(2)})_{\omega} = \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} e^{i\omega t} \langle \{ \hat{x}_a(t, \mathbf{r}_1), \hat{x}_b(0, \mathbf{r}_2) \} \rangle dt,$$

где скобки $\{.,.\}$ означают коммутатор. Перейдя к фурье-разложению по координатам $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, получим формулу

$$(x_a x_b)_{\omega \mathbf{k}} = \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \cdot \operatorname{Re} \int \int_0^{\infty} e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \langle \{ \hat{x}_a(t, \mathbf{r}), \hat{x}_b(0, 0) \} \rangle dt d^3x. \quad (90.4)$$

Применив эту формулу к корреляционной функции $(\mathbf{Q}^2)_{\omega \mathbf{k}}$ и подставив в (90.1), получим

$$\operatorname{Re} \kappa(\omega) = \frac{1}{3\omega T} \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \operatorname{Re} \int \int_0^{\infty} e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \langle \{ \hat{\mathbf{Q}}(t, \mathbf{r}), \hat{\mathbf{Q}}(0, 0) \} \rangle dt d^3x.$$

Справа и слева в этой формуле под знаком Re стоят функции ω , стремящиеся к нулю при $\omega \rightarrow \infty$ и не имеющие особенностей в верхней полуплоскости комплексной переменной ω . Из равенства вещественных частей таких функций на вещественной оси ω следует также и равенство самих функций, и мы приходим к окончательной формуле:

$$\kappa(\omega) = \frac{1}{3\omega T} \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \int \int_0^{\infty} e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \langle \{ \hat{\mathbf{Q}}(t, \mathbf{r}), \hat{\mathbf{Q}}(0, 0) \} \rangle dt d^3x. \quad (90.5)$$

Чтобы получить статическое значение коэффициента теплопроводности, надо затем перейти и к пределу $\omega \rightarrow 0$.

Аналогичным образом можно преобразовать формулу (88.21) и получить операторное выражение для коэффициентов вязкости.

Если ввести полный поток импульса $\sigma_{ik} = -P\delta_{ik} + \sigma'_{ik}$ (σ_{ik} из (88.9)), то в пределе $\mathbf{k} \rightarrow 0$ флуктуации всех членов, кроме s_{ik} , обратятся в нуль, так что в этом пределе можно заменить корреляционную функцию $(s_{ik}s_{lm})_{\omega\mathbf{k}}$ на $(s_{ik}s_{lm})_{\omega\mathbf{k}}$. В результате получим формулу

$$\begin{aligned} \eta(\omega) \left(\delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl} - \frac{2}{3}\delta_{ik}\delta_{lm} \right) + \zeta(\omega)\delta_{ik}\delta_{lm} = \\ = \frac{1}{\omega} \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \int \int_0^\infty e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \langle \{\hat{\sigma}_{ik}(t, \mathbf{r}), \sigma_{lm}(0, 0)\} \rangle dt d^3x, \quad (90.6) \end{aligned}$$

где $\hat{\sigma}_{ik}(t, \mathbf{r})$ — оператор плотности потока импульса (*H. Mori*, 1958). Свернув это равенство по парам индексов i, k и l, m или i, l и k, m , получим отдельные выражения соответственно для 9ζ или $10\eta + 3\zeta$.

§ 91. Динамический формфактор ферми-жидкости

К ферми-жидкости неприменимы формулы (87.4)–(87.6) для формфактора при $T = 0$, поскольку их вывод предполагает существование (при малых ω и k) лишь фононной ветви спектра элементарных возбуждений. Неприменима к ферми-жидкости также и развитая в § 88, 89 гидродинамическая теория флуктуаций: она требует выполнения условия $kl \ll 1$ (l — длина свободного пробега квазичастиц), заведомо нарушающегося в ферми-жидкости, поскольку $l \propto T^{-2}$ и стремится при $T \rightarrow 0$ к бесконечности. Поэтому для вычисления формфактора ферми-жидкости надо обратиться к кинетическому уравнению.

При этом удобно исходить из формул (86.17)–(86.20), устанавливающих связь формфактора с обобщенной восприимчивостью по отношению к воздействию на жидкость некоторого поля $U(t, \mathbf{r})$. В компонентах Фурье также и по координатам определение (86.18) записывается как

$$\delta\bar{n}(\omega, \mathbf{k}) = -\alpha(\omega, \mathbf{k})U_{\omega\mathbf{k}}. \quad (91.1)$$

Мы ограничимся случаем $T = 0$. Тогда динамический формфактор выражается через $\alpha(\omega, \mathbf{k})$ согласно

$$\bar{n}\sigma(\omega, \mathbf{k}) = \begin{cases} 2\hbar \operatorname{Im} \alpha(\omega, \mathbf{k}), & \omega > 0, \\ 0 & , \quad \omega < 0. \end{cases} \quad (91.2)$$

Возмущение же плотности $\delta\bar{n}(\omega, \mathbf{k})$ вычисляется с помощью кинетического уравнения, причем в нем можно (при $T \rightarrow 0$) пренебречь интегралом столкновений. Эти вычисления отличаются от произведенных в § 4 для нулевого звука лишь тем, что в энергии квазичастицы добавляется член

$$U(t, \mathbf{r}) = U_{\omega\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}.$$

Соответственно в производной $\partial\varepsilon/\partial\mathbf{r}$ (4.3) добавляется член $\partial U/\partial\mathbf{r} = i\mathbf{k}U$, а в левой стороне кинетического уравнения (4.8) — член

$$-i\mathbf{k}U \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} = i\mathbf{k}\mathbf{v}U \delta(\varepsilon - \varepsilon_F).$$

Решение кинетического уравнения ищем в виде

$$\begin{aligned} \delta n(\mathbf{p}) &= \delta n_{\omega\mathbf{k}}(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \\ \delta n_{\omega\mathbf{k}}(\mathbf{p}) &= -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* p_F} \chi(\mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{p}. \end{aligned} \quad (91.3)$$

Это фурье-компонента возмущения импульсного распределения квазичастиц. Искомое же изменение плотности полного числа квазичастиц (совпадающей с плотностью числа истинных частиц) дается интегралом

$$\delta\bar{n}(\omega, \mathbf{k}) = \int \delta n_{\omega\mathbf{k}}(\mathbf{p}) \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = -\frac{1}{2\hbar} \int \chi(\mathbf{n}) \frac{d\omega}{4\pi} \cdot U_{\omega\mathbf{k}}.$$

Определение функции $\chi(\mathbf{n})$ в (91.3) отличается от определения $\nu(\mathbf{n})$ в (4.9) нормировкой: она выбрана здесь так, что формула (91.2) принимает вид

$$\bar{n}\sigma(\omega, \mathbf{k}) = \operatorname{Im} \int \chi(\mathbf{n}) \frac{d\omega}{4\pi}, \quad \omega > 0. \quad (91.4)$$

Для самой же функции $\chi(\mathbf{n})$ получается уравнение

$$(\omega - v_F \mathbf{k}\mathbf{n}) \chi(\mathbf{n}) - v_F \mathbf{k}\mathbf{n} \int F(\vartheta) \chi(\mathbf{n}') \frac{d\omega'}{4\pi} = -\mathbf{k}\mathbf{n} \frac{2p_F^2}{\pi^2 \hbar^2}, \quad (91.5)$$

отличающееся от (4.11) своей правой частью.

Уравнение (91.5) не содержит в явном виде мнимых величин. Появление мнимой части в его решении $\chi(\mathbf{n})$ связано поэтому лишь с обходами полюсов в возникающих в процессе решения интегралах. Правило этих обходов определяется требованием, чтобы наложенное на систему поле $U \propto e^{-i\omega t}$ адиабатически включалось, начиная от $t = -\infty$; для этого надо заменить его частоту $\omega \rightarrow \omega + i0$.

Конкретный вид решения зависит от вида функции взаимодействия квазичастиц $F(\vartheta)$. Продемонстрируем ход решения и его свойства на простейшем примере функции $F = \text{const} \equiv F_0$.

В этом случае решение уравнение (91.5) имеет вид

$$\chi(\mathbf{n}) = C \frac{v_F \mathbf{k}\mathbf{n}}{v_F \mathbf{k}\mathbf{n} - \omega - i0}, \quad (91.6)$$

где C — постоянная. Последняя определяется обратной подстановкой выражения (91.6) в (91.5), дающей

$$C(1 + IF_0) = \frac{2m^* p_F}{\pi^2 \hbar^2}, \quad (91.7)$$

где

$$I = \int \frac{\mathbf{k}\mathbf{n}' v_F}{\mathbf{k}\mathbf{n}' v_F - \omega - i0} \frac{d\omega'}{4\pi}.$$

Подынтегральное выражение зависит только от угла между $\mathbf{n}'$ и $\mathbf{k}$, и после очевидной подстановки находим

$$I(s) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{x dx}{x - s - i0} = 1 - \frac{s}{2} \ln \left| \frac{s+1}{s-1} \right| + \begin{cases} is\pi/2, & s < 1, \\ 0, & s > 1, \end{cases} \quad (91.8)$$

где $s = \omega/kv_F$ (мнимая часть интеграла отделяется по правилу (8.11)).

Подставив функцию $\chi(\mathbf{n})$ из (91.6)–(91.8) в (91.4), получим динамический формфактор

$$\bar{n}\sigma(\omega, k) = \frac{2m^* p_F}{\pi^2 \hbar^2} \text{Im} \frac{I(s)}{1 + F_0 I(s)} \quad (91.9)$$

(А. А. Абрикосов, И. М. Халатников, 1958). В силу (91.8) он отличен от нуля при $s < 1$, т. е. при всех $\omega < kv_F$.

Если $F_0 > 0$, то в ферми-жидкости возможно распределение нулевого звука со скоростью u_0 , определяемой уравнением (4.15):

$$1 + F_0 I(s_0) = 0, \quad s_0 = u_0/v_F.$$

При значениях s вблизи s_0 выражение (91.9) принимает вид

$$\text{const} \cdot \text{Im} \frac{1}{s - s_0},$$

причем, согласно сказанному выше, $s = \omega/kv_F$ надо понимать, как $s + i0$. Это значит, что в $\sigma(\omega, k)$ появляется еще и δ -функциональный член вида $\text{const} \cdot \delta(s - s_0)$, или

$$\sigma(\omega, k) = \text{const} \cdot k\delta(\omega - ku_0). \quad (91.10)$$

Этот член представляет собой вклад в формфактор, обязанный нуль-звуковой ветви энергетического спектра ферми-жидкости; он вполне аналогичен фононному вкладу (87.4) в формфактор бозе жидкости.

Существование такого члена не связано, конечно, с предположением $F = \text{const}$ и является общим свойством ферми-жидкости, в которой возможно распространение нулевого звука; от закона взаимодействия квазичастиц зависит лишь значение постоянного коэффициента в (91.10). Без правой части уравнение (91.5) совпадает с уравнением нулевого звука; поэтому решение неоднородного уравнения имеет полюс при $\omega/k = u_0$.

Из вида уравнения (91.5) ясно, что его решение зависит от параметров ω и k лишь в виде отношения ω/k . Функцией этого отношения будет, следовательно, и динамический формфактор. Статический же формфактор

$$\sigma(k) = \int_0^\infty \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi}$$

будет, следовательно, иметь вид

$$\sigma(k) = \text{const} \cdot k. \quad (91.11)$$

Это значит, что одновременная пространственная корреляционная функция флуктуаций плотности при $T = 0$ в ферми-жидкости (как и в бозе-жидкости) следует закону $\nu(r) \propto r^{-4}$.

Отметим, наконец, что динамический формфактор идеального ферми-газа может быть получен из (91.9) переходом к пределу $F_0 \rightarrow 0$:

$$\sigma(\omega, k) = \frac{m^2 \omega}{\pi \hbar^2 \bar{n} k}, \quad 0 < \omega < kv_F.$$

При этом статический формфактор

$$\sigma(k) = \int_0^{kv_F} \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{p_F^2 k}{(2\pi \hbar)^2} \bar{n}$$

(в согласии с результатом задачи 1 в V, § 117).

НЕКОТОРЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

Векторные индексы обозначаются латинскими буквами $i, k, \dots$; спинные — греческими — $\alpha, \beta, \dots$. По всем дважды повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

«4-векторы» (см. примечание на с. 71) обозначаются заглавными буквами $X, P, \dots$.

Элемент объема dV или d^3x .

Предел при стремлении величины к нулю сверху или снизу: $+0$ или -0 .

Операторы обозначаются буквами со шляпкой $\hat{}$.

Гамильтониан $\hat{H}$, $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$. Оператор возмущений $\hat{V}$. ψ -операторы в шредингеровском представлении: $\hat{\psi}$, $\hat{\psi}^+$; в гейзенберговском — $\hat{\Psi}$, $\hat{\Psi}^+$; в мацубаровском — $\hat{\Psi}^M$, $\hat{\bar{\Psi}}^M$.

Гриновские функции G , D . Температурные гриновские функции $\mathcal{G}$, $\mathcal{D}$.

Термодинамические величины обозначаются так же, как в томе V: температура T , объем V , давление P , химический потенциал μ .

Напряженность и индукция магнитного поля $\mathbf{H}$ и $\mathbf{B}$; внешнее магнитное поле $\mathcal{H}$.

Ссылки на номера параграфов и формул других томов этого курса снабжены римскими цифрами: I — «Механика», 1988; II — «Теория поля», 1989; III — «Квантовая механика», 1989; IV — «Квантовая электродинамика», 1989; V — «Статистическая физика», ч. 1, 1995; VI — «Гидродинамика», 1986; VIII — «Электродинамика сплошных сред», 1982.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ¹⁾

- Аномальные функции Грина 159, 216
Антиферромагнитный резонанс 398
Асимптотика корреляционной функции 450, 471, 473, 490
- Бесщелевые полупроводники 361
— сверхпроводники 281
- Взаимодействие атомов с металлической поверхностью 445
Вика теорема 68, 75, 76, 163, 201
Вихревые кольца 149
— нити в сверхпроводниках 251, 258
— — точечные 185
Волновая функция сверхпроводящих пар 217, 227, 228, 233, 285
Восприимчивость парамагнетика 386, 387
- Галилеевское преобразование 21, 102, 119
Гамильтониан гейзенберговский 382
— спиновый, антиферромагнитное состояние 400–405
Глубина проникновения 230, 231, 238, 277
- Дайсона уравнение 84
Деформационный потенциал 340
Диаманитные домены 340
Длина рассеяния 35, 130, 204, 207
- Запаздывающие функции Грина 189–192, 198, 407
Затухание возбуждений бозевских 173–176
— — фермиевских 16, 17, 56, 111, 112, 346
- Зоны энергетические 288
— — в одномерном случае 293–297
- Калибровочная инвариантность 99, 228, 235, 266, 298, 406
Квазиимпульс 289
— обобщенный 299
Квантование магнитного потока 232
Колебания вихревой нити 151
Компенсированные металлы 324
Конденсат 129, 134, 156
Корреляционная поправка в плазме 454, 461
- Критическая скорость 149
Критическое поле 235
— — верхнее и нижнее 247
— — пленки 239
— — третье 250
— — шара 250
Купера эффект 203, 281
- Латтинжера теорема 323
Лондонов уравнение 229
Лондоновский случай 231
- Магнитный пробой 304, 306, 309
Магнитоактивные тела 409
Магнитостатическая энергия 372
Массовый оператор 77
Матрица плотности 48, 49, 137
Мацубаровские операторы 195
Мейсснера эффект 229
- Намагниченность парамагнетика 388
Неполные вершины 164
Номинальная намагниченность 378
- Обменные интегралы 382

¹⁾ Этот указатель дополняет оглавление книги, не повторяя его. В указатель включены термины и понятия, непосредственно не отраженные в оглавлении.

- Параметр Гинзбурга-Ландау 238, 245
Перенормировка амплитуды рассеяния 35, 130, 207
Перенормировочная постоянная 56, 112
Пиппардовский случай 231
Поверхности Ферми 321
— — электронные и дырочные 323
Поверхностное натяжение жидкого гелия 123
Поглощение звука в металлах 348
Подзоны Ландау 308
Подрешетки магнитные 394
Полуметаллы 324
Поляризационный оператор 425, 459
Потенциальное вращение 145
Примеси в сверхтекучей жидкости 122–124
Продольная и поперечная проникаемости 451
Пространственная дисперсия 450

Рассеяние нейтронов в жидкости 467
Ротоны 115

Сверхпроводящая щель 208, 220
Сверхтекучая и нормальная части 120, 121, 123, 214, 227
Сверхтекучесть двумерных систем 182–188
Сила взаимного трения 149

Скелетная диаграмма 78, 88
Случайные потоки 476

Устойчивость ферми-жидкости 23, 24, 98

Ферромагнитный резонанс 374
Флуктуации концентрации в растворах 484
— магнитного момента 381
Флуктуационно-диссипативная теорема 413, 421, 466, 477
Форм-фактор динамический 464
— — статический 467
Функция взаимодействия квазичастиц 19, 25, 32, 41, 42

Циклотронная масса 305, 315, 336

Экситоны 350, 352
Экстремальные сечения ферми-поверхности 336
Электронные и дырочные траектории 305
— — ферми-поверхности 323
Электроны и дырки в диэлектрике 351, 352
— проводимости 322
Эффективная масса 17, 18, 22, 41, 122

λ-точка 122, 141–144, 187

Учебное издание

ЛИФШИЦ Евгений Михайлович
ПИТАЕВСКИЙ Лев Петрович

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Часть 2

Теория конденсированного состояния

(Серия: «Теоретическая физика», том IX)

Редакторы: *Ю. Г. Рудой, Д. А. Миртова*
Оригинал-макет: *Е. Ю. Морозов*

ЛР №071930 от 06.07.99

Подписано в печать 24.04.01. Формат 60×90¹/₁₆

Бумага офсетная №1. Печать офсетная

Усл. печ. л. 31. Уч.-изд. л. 30

Заказ №

Издательская фирма
«Физико-математическая литература»
МАИК «Наука/Интерпериодика»
117997 Москва, Профсоюзная ул., 90

Отпечатано с диапозитивов
в РГУП «Чебоксарская типография № 1»
428019 Чебоксары, пр. И. Яковлева, 15

ДЛЯ ЗАМЕТОК

ДЛЯ ЗАМЕТОК
