# ДИАГРАММАТИКА

## Лекции по избранным задачам теории конденсированного состояния

Издание второе, переработанное и дополненное

**М. В. Садовский**
Институт электрофизики УрО РАН,
Екатеринбург, 620016, Россия,
E-mail: sadovski@iep.uran.ru

## Предисловие

В конце 50-х, начале 60-х годов прошлого века в теории конденсированного состояния (чаще называвшейся тогда теорией твердого тела и квантовых жидкостей) произошел переворот, связанный с применением методов, разработанных десятилетием раньше в квантовой теории поля, в основном – метода фейнмановских диаграмм. С тех пор эти методы составляют основу данного раздела теоретической физики, их знание необходимо каждому грамотному теоретику.

Существует ряд хороших книг и учебников, где достаточно подробно излагается общая сторона дела – введение диаграммного подхода для различных типов взаимодействий [1, 2]. Разумеется, в этих книгах излагаются и конкретные приложения к тем или иным физическим задачам. Вместе с тем, до настоящего времени практически отсутствуют книги, в которых достаточно подробно, со всеми деталями вычислений и методических приемов, разбирались-бы примеры применения этой техники к решению конкретных задач на уровне, заведомо доступном для начинающего теоретика [1]. За прошедшие десятилетия таких задач решалось великое множество и результаты разбросаны по многочисленным оригинальным статьям, обзорам и монографиям.

Целью настоящих лекций является именно демонстрация того, как диаграммные методы применяются к решению конкретных задач теории конденсированного состояния, которые уже достаточно давно вошли в "золотой фонд" этой теории, а соответствующие понятия и приемы составляют рабочий "фольклор" современного теоретика. Выбор примеров обусловлен как их важностью, так и личными научными интересами автора. Многие из этих задач еще не решены "до конца" и дальнейшее развитие результатов, излагаемых почти в каждом разделе, может составить предмет самостоятельного исследования. Мы сознательно ограничились только избранными задачами электронной теории твердого тела, опустив вопросы теории бозе – жидкости, большинство задач теории магнетизма и теорию критических явлений. Нужно четко понимать, что каждая из глав этих лекций могла-бы составить предмет самостоятельного спецкурса и, в этом смысле, наше изложение не претендует на сколько – нибудь замкнутый обзор этих направлений теории. Разумеется, применение полевых методов в теории конденсированного состояния не исчерпывается только диаграммными методами. В частности, велик был соблазн уделить внимание методам, основанным на функциональном интегрировании и ренормализационной группе. Тем не менее, мы решили ограничиться только диаграммным подходом и задачами, которые решаются в рамках теории возмущений, практически опуская современные вопросы теории сильно коррелированных систем.

Для понимания лекций необходимо владение основами диаграммной техники, примерно в объеме Гл. II и III знаменитой книги "АГД" [1], изложение в которых до сих пор остается непревзойденным образцом.

В настоящем новом издании лекций, публикуемом на английском языке в издательстве World Scientific, существенно расширено Введение, где кратко излагаются основы метода функций Грина, что делает изложение более замкнутым. Существенные дополнения сделаны также в Главе 6 и в Приложении 1. Исправлены замеченные в первом издании опечатки и устранен ряд неточных утверждений.

*М.В.Садовский, Екатеринбург, 2005 г.*

---

[1] Автору известна только одна такая попытка [3], остававшаяся долгое время не опубликованной. Почти всеобъемлющий обзор применений полевых методов к различным задачам теории твердого тела и квантовых жидкостей содержится в [4], но это именно обзор, а не учебник.

.

*Необходимо преодолеть мистицизм в отношении техники...*

Председатель Мао-Цзэдун

*Oh? The man works and doesn't tell his assistant what he is doing...?*
*He will never give that seminar.*

W.Pauli to R.P.Feynman

*Л.П.Горьков, А.А.Абрикосов, И.Е.Дзялошинский, Argonne, USA, 1998*

# Оглавление

# Глава 1

# ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известна определяющая роль, которую в современной теории конденсированного состояния играет концепция квазичастиц. Полное обоснование эта концепция получает в рамках формализма функций Грина, который является стандартным аппаратом современной теории систем многих частиц. Метод функций Грина дает возможность четко сформулировать критерии существования квазичастиц в конкретных системах, а также представляет собой универсальный метод проведения расчетов практически любых физических характеристик многочастичных систем с учетом различных типов взаимодействий. Данный метод возник в связи с задачами квантовой теории поля, где впервые был сформулирован чрезвычайно эффективный и удобный подход, основанный на использовании *диаграмм Фейнмана*. Последующее перенесение этих идей и методов в теорию систем многих частиц, по сути дела, и привело к созданию современной теории конденсированного состояния [1, 2].

В рамках данного курса мы не приводим последовательное изложение самого метода функций Грина, нашей целью является обучить использованию этого метода для решения конкретных задач. Предполагается, что основные принципы построения диаграммной техники для различных видов взаимодействий, также как и общие свойства функций Грина читателю известны, как в формализме нулевой температуры $T = 0$, так и для случая конечных температур (мацубаровские функции Грина) [1]. Структура курса ясна из оглавления. Отдельные главы посвящены рассмотрению основных видов взаимодействий, изучаемых в рамках электронной теории твердого тела, а также ряду основных типов электронных неустойчивостей (фазовых переходов). Как правило, сначала мы формулируем правила диаграммной техники, а затем рассматриваем различные задачи, по возможности приводя достаточно подробно все детали вычислений. При этом мы, практически всюду, старались следовать правилам и обозначениям, используемым в книге [1], хотя полного отсутствия "разнобоя" в обозначениях тех или иных физических величин избежать вряд-ли удалось. Каждая глава, таким образом, может рассматриваться как некоторое введение в круг соответствующих проблем данного раздела теории твердого тела. В этом смысле они могут читаться независимо, но следует иметь в виду, что все излагаемые вопросы, на самом деле, весьма тесно связаны друг с другом. Подбор цитируемой литературы не претендует на полноту, приводятся ссылки лишь на те источники, из которых заимствован соответствующий материал, причем предпочтение оказывалось работам обзорного и учебного характера. Соответственно, ссылки на работы приоритетного характера практически отсутствуют, в наиболее важных случаях такого рода мы ссылаемся просто на фамилии авторов. Следует иметь в виду, что многие разделы лекций основаны на собственных "разборках" автора, в таких случаях ссылки на источник, как правило, просто отсутствуют.

Основная идея диаграммного подхода в теории конденсированного состояния состоит в проведении суммирования бесконечного ряда фейнмановских диаграмм для одночастичной или многочастичных функций Грина (вершинных частей). При этом речь идет, как правило, о суммировании определенных подпоследовательностей полного ряда теории возмущений (типов диаграмм), дающих доминирующий вклад по тому или иному параметру задачи (безразмерная константа связи, плотность числа частиц, другие комбинации параметров, характеризующих систему). В большинстве изучавшихся задач, такие подпоследовательности были выявлены уже на раннем этапе развития теории [1, 2], и мы рассмотрим целый ряд характерных примеров и следующих из них физических выводов. В очень редких случаях, для чрезвычайно упрощенных (модельных) задач удается просуммировать полный фейнмановский ряд (все диаграммы). Такие случаи гораздо менее известны, но, как правило, весьма поучительны. Мы рассмотрим несколько примеров таких моделей, как для иллюстрации технической стороны дела, так и следующих из них нетривиальных выводов, связанных с возможностью разрушения самой концепции квазичастиц, которая, несмотря на ее успешность, естественно имеет ограниченные пределы применимости и не должна считаться самоочевидной.

Практически всюду мы используем систему единиц $\hbar = c = 1$, восстанавливая $\hbar$ и $c$ только в некоторых итоговых формулах и оценках. Постоянная Больцмана $k_B = 1$ всегда.

## 1.1 Квазичастицы и функции Грина.

Хотя мы и не собираемся давать полный и систематический вывод диаграммного подхода в теории многочастичных систем, начнем, все же, с краткого введения элементарных понятий и определений, дабы сделать изложение относительно замкнутым и напомнить читателю основные идеи, лежащие в основе применения метода функций Грина в теории конденсированного состояния.

Рассмотрим сначала случай температуры $T = 0$, когда рассматриваемая система находится в основном состоянии. Начнем с элементарной задачи об *одной* квантовой частице, движущейся в некотором (не зависящем от времени) внешнем потенциале (поле). Эта ситуация описывается обычным (не зависящим от времени) уравнением Шредингера с соответствущим гамильтонианом $H$:

$$i\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} - H\psi(\mathbf{r},t) = 0 \tag{1.1}$$

Вместо того, чтобы непосредственно решать это уравнение (с каким – либо начальным условием для волновой функции), введем уравнение Шредингера для *функции Грина* $G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')$, зависящей от *двух* значений времени и координат:

$$i\frac{\partial G}{\partial t} - HG = i\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(t-t') \tag{1.2}$$

с начальным условием $G(\mathbf{r},t+0;\mathbf{r}',t) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Физически, функция Грина представляет собой *амплитуду вероятности* перехода частицы из (начальной) точки $\mathbf{r}'$ в момент времени $t'$ в некоторую точку $\mathbf{r}$ в момент $t$. Квадрат модуля этой амплитуды дает вероятность такого перехода. Это легко проверяется если мы выразим

$\psi$–функцию в момент $t+\tau$ через $\psi$–функцию в момент $t$ как:

$$\psi(\mathbf{r},t+\tau) = \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r},t+\tau;\mathbf{r}'t)\psi(\mathbf{r}',t) \tag{1.3}$$

Легко видеть, что это выражение для $\psi(\mathbf{r},t+\tau)$ удовлетворяет уравнению Шредингера (1.1), а для $\tau \to 0$ оно совпадает с $\psi(\mathbf{r},t)$б с учетом начального условия $G(\mathbf{r},t+0;\mathbf{r}',t) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Очевидно, что мы должны положить $G = 0$ при $\tau < 0$, чтобы обеспечить выполнение принципа причинности.

Введем теперь некоторый (полный) набор собственных функций стационарного уравнения Шредингера:

$$H\varphi_\lambda(\mathbf{r}) = \varepsilon_\lambda\varphi_\lambda(\mathbf{r}) \tag{1.4}$$

В зависимости от рассматриваемой задачи, квантовые числа $\lambda$ могут иметь различный физический смысл. Если задача (гамильтониан) трансляционно инвариантна $\lambda \to \mathbf{p}$, т.е. сводится к импульсу частицы. Для системы электронов во внешнем магнитном поле $\lambda$ представляют собой набор квантовых чисел Ландау. Для частицы, движущейся в некотором произвольном (случайном) потенциале это суть (в общем случае нам неизвестные) квантовые числа состояний, диагонализирущих гамильтониан.

Рассмотрим простейший случай частицы, движущейся в некотором заданном потенциале:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \tag{1.5}$$

Любое решение уравнения Шредингера (1.1) может быть разложено по полной системе собственных функций (1.4):

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_\lambda c_\lambda(t)\varphi_\lambda(\mathbf{r}) \tag{1.6}$$

Тогда мы можем переписать (1.3) в виде уравнения для коэффициентов такого разложения:

$$c_\lambda(t+\tau) = \sum_{\lambda'} G_{\lambda\lambda'}(\tau)c_{\lambda'}(t) \tag{1.7}$$

и найти:

$$G_{\lambda\lambda'}(\tau) = \int d^3r d^3r' G(\mathbf{r},\mathbf{r}'\tau)\varphi^\star_\lambda(\mathbf{r})\varphi_{\lambda'}(\mathbf{r}') \tag{1.8}$$

– функцию Грина в представлении квантовых чисел $\lambda$. Поскольку $\varphi_\lambda$ точное собственное состояние (не зависящего от времени) гамильтониана $H$, переходов в другие состояния нет, так что $c_\lambda(t+\tau) = e^{-i\varepsilon_\lambda\tau}c_\lambda(t)$, т.е.

$$G_{\lambda\lambda'}(\tau) = G_\lambda(\tau)\delta_{\lambda\lambda'} = e^{-i\varepsilon_\lambda\tau}\theta(\tau) \tag{1.9}$$

где $\theta(\tau) = 1$ для $\tau \geq 0$ и $\theta(\tau) = 0$ для $\tau < 0$. Рассмотрим теперь фурье – образ[1]:

$$G_\lambda(\varepsilon) = \frac{1}{i}\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\varepsilon\tau}G_\lambda(\tau) \tag{1.10}$$

[1] Отметим дополнительный фактор $i$, который мы ввели в (1.10), (1.11), а также ниже в (1.19), который гарантирует соответствие со стандартными обозначениями "АГД". Обычно этот фактор просто включается в определение функции Грина [1].

$$G_\lambda(\tau) = i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi}e^{-i\varepsilon\tau}G_\lambda(\varepsilon) \tag{1.11}$$

Тогда, после элементарного интегрирования получаем:

$$G_\lambda(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_\lambda + i\delta}, \quad \delta \to +0 \tag{1.12}$$

Знак $\delta \to 0$ выбран так, чтобы гарантировать выполнение условия $G_\lambda(\tau) = 0$ при $\tau < 0$. Действительно:

$$\begin{aligned} G_\lambda(\tau) &= i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi}\frac{e^{-i\varepsilon\tau}}{\varepsilon - \varepsilon_\lambda + i\delta} \\ &= \begin{cases} e^{-i\varepsilon_\lambda\tau} & \text{for} \quad \tau > 0 \\ 0 \quad \text{for} & \tau < 0 \end{cases} \end{aligned} \tag{1.13}$$

Чтобы убедиться в этом заметим, что подинтегральное выражение здесь имеет полюс при $\varepsilon = \varepsilon_\lambda - i\delta$. Тогда для $\tau > 0$ можно замкнуть контур интегрирования в нижней полуплоскости комплексной переменной $\varepsilon$ (поскольку фактор $e^{-i\varepsilon\tau}$ обеспечивает экспоненциальное убывание подинтегрального выражения на бескнечно удаленной полуокружности в нижней полуплоскости), так что полюс подинтегрального выражения попадет внутрь контура интегрирования и, используя теорему Коши, получаем результат, приведенный в (1.13). Для $\tau < 0$, для обеспечения нулевого вклада от полуокружности нужно замкнуть контур интегрирования в верхней полуплоскости $\varepsilon$. Тогда внутри контура интегрирования полюса нет и интеграл равен нулю.

В смешанном $(\mathbf{r}, \varepsilon)$ – представлении получаем:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \varepsilon) = \sum_{\lambda,\lambda'} G_{\lambda\lambda'}(\varepsilon)\varphi_\lambda(\mathbf{r})\varphi^\star_{\lambda'}(\mathbf{r}') = \\ = \sum_\lambda \frac{\varphi_\lambda(\mathbf{r})\varphi^\star_\lambda(\mathbf{r}')}{\varepsilon - \varepsilon_\lambda + i\delta} \end{aligned} \tag{1.14}$$

Здесь сумма по $\lambda$ включает суммирование по всем связанным состониям и интегрирование по непрерывной части спектра. Видм, что $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \varepsilon)$ обладает полюсами при значениях $\varepsilon$ равных $\varepsilon_\lambda$, т.е. энергиям связанных состояний, а также разрез (континуум полюсов) на части действительной оси $\varepsilon$, соответствующей непрервному спектру.

Перейдем к рассмотрению многочастичной системы. Ограничимся обсуждением системы (многих) фермионов. Аналогичный анализ можно провести и для системы бозе – частиц, но мы его опустим, отсылая читателя к общим курсам [1, 2]. Рассмотрим сначала случай невзаимодействующих фермионов (ферми – газ). Элементарные возбуждения в этом случае представляют собой пары возбужденных частиц (над поверхностью Ферми) и дырок (под поверхностью Ферми).

Определим функцию Грина для возбужденной частицы $G_{\lambda\lambda'}(\tau)$, т.е. амплитуду перехода частицы из некоторого состояния $\lambda$ в состояние $\lambda'$ (для случая невзаимодействующих фермионов). При этом мы должны учесть ограничения, связанные с принципом Паули, т.е. исключить переходы в занятые состояния. Это может быть обеспечено путем введения в определение гриновской функции дополнительного фактора $(1 - n_\lambda)$, где

$$n_\lambda = \begin{cases} 1 & \text{for} \quad \varepsilon_\lambda \le \varepsilon_F \\ 0 & \text{for} \quad \varepsilon_\lambda > \varepsilon_F \end{cases} \tag{1.15}$$

– число частиц в состоянии $\lambda$ (распределение Ферми для $T=0$). Тогда имеем:

$$G^{+}_{\lambda\lambda'}(\tau)=(1-n_\lambda)\delta_{\lambda\lambda'}\begin{cases} e^{-i\varepsilon_\lambda\tau} & \text{for} \quad \tau>0 \\ 0 \quad \text{for} & \tau<0 \end{cases} \tag{1.16}$$

Найдем теперь аналогичное выражение для дырок. Поскольку число свободных мест для дырок в состоянии $\lambda$ просто равно $n_\lambda$, мы получаем:

$$G^{-}_{\lambda\lambda'}(\tau)=n_\lambda\delta_{\lambda\lambda'}\begin{cases} e^{i\varepsilon_\lambda\tau} & \text{for} \quad \tau>0 \\ 0 \quad \text{for} & \tau<0 \end{cases} \tag{1.17}$$

где мы учли, что энергия дырки (отсчитанная от уровня Ферми) противоположно по знаку энергии частицы.

Удобно ввести функцию Грина $G_\lambda(\tau)$, определенную как для $\tau>0$, так и для $\tau<0$:

$$G_\lambda(\tau)=\begin{cases} G^{+}_{\lambda}(\tau) & \text{for} \quad \tau>0 \\ -G^{-}_{\lambda}(-\tau) & \text{for} \quad \tau<0 \end{cases} \tag{1.18}$$

Фурье – образ этой функции легко находится в виде:

$$\begin{aligned} G_\lambda(\varepsilon) &= -i(1-n_\lambda)\int_0^\infty d\tau e^{-i\varepsilon_\lambda\tau+i\varepsilon\tau}+in_\lambda\int_{-\infty}^0 d\tau e^{i\varepsilon_\lambda\tau+i\varepsilon\tau}= \\ &= \frac{1-n_\lambda}{\varepsilon-\varepsilon_\lambda+i\delta}+\frac{n_\lambda}{\varepsilon-\varepsilon_\lambda-i\delta} \end{aligned} \tag{1.19}$$

где необходимо ввести $\delta\to+0$ для обеспечения сходимости. Удобно переписать это выражение как:

$$\begin{aligned} G_\lambda(\varepsilon) &= \frac{1}{\varepsilon-\varepsilon_\lambda+i\delta sign\varepsilon_\lambda}= \\ &= \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon-\varepsilon_\lambda+i\delta} & \text{for} \quad \varepsilon_\lambda>\varepsilon_F \\ \frac{1}{\varepsilon-\varepsilon_\lambda-i\delta} & \text{for} \quad \varepsilon_\lambda<\varepsilon_F \end{cases} \end{aligned} \tag{1.20}$$

где мы ввели знаковую функцию: $sign(x)=1$ для $x>0$ и $sign(x)=-1$ для $x<0$. Заметим, что фурье – образ такой функции Грина имеет полюс при $\varepsilon$ равном энергии частицы (дырки).

Перейдем теперь к рассмотрению системы *вазимодействующих* фермионов. Одночастичная функция Грина в этом случае определяется как:

$$G^{+}(\mathbf{r}t;\mathbf{r}'t')_{t>t'}=<0|\hat{\psi}(\mathbf{r}t)\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}'t')|0> \tag{1.21}$$

где $|0>$ – точное основное состояние ("вакуум") рассматриваемой системы, соответствующее заполненной ферми – сфере, $\hat{\psi}(\mathbf{r}t)$ – вторично квантованный оператор фермиевского поля в гейзенберговском представлении [1]:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}t)=e^{iHt}\hat{\psi}(\mathbf{r})e^{-iHt} \tag{1.22}$$

где $H$ – гамильтониан рассматриваемой системы (взаимодействующих) частиц. Оператор $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ может быть стандартным образом выражен через операторы уничтожения частиц $a_\lambda$ в состоянии $\lambda$ (тогда как $\hat{\psi}^{+}$ аналогичным образом выражается через операторы рождения $a^{+}_{\lambda}$):

$$\hat{\psi}(\mathbf{r})=\sum_\lambda a_\lambda\varphi_\lambda(\mathbf{r}) \tag{1.23}$$

Уравнение (1.21) очевидно дает амплитуду перехода для частицы, распространяющейся из точки $(\mathbf{r}'t')$ в $(\mathbf{r}t)$.

Аналогичное выражение может быть записано и для распространения дырки:

$$G^-(\mathbf{r}t;\mathbf{r}'t')_{t>t'} =<0|\hat{\psi}^+(\mathbf{r}t)\hat{\psi}(\mathbf{r}'t')|0> \tag{1.24}$$

где учтено, что уничтожение частицы в заданной точке эквивалентно рождению дырки.

Оба выражения (1.21) и (1.24) определены для $t > t'$. Удобно записать единое выражение, которое при $t > t'$ описывает распространение частицы, а при $t < t'$ – распространение дырки (аналогично (1.18)):

$$G(\mathbf{r}t;\mathbf{r}'t') = \begin{cases} G^+(\mathbf{r}t;\mathbf{r}'t') & \text{for} \quad t > t' \\ -G^-(\mathbf{r}'t';\mathbf{r}t) & \text{for} \quad t < t' \end{cases} \tag{1.25}$$

Другим способом можно записать это как[2]:

$$G(x,x') =<0|T\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^+(x')|0> \tag{1.26}$$

где введено обозначение $x = (\mathbf{r}t)$, а символ $T$–упорядочения означает, что операторы, стоящие справа от $T$ располагаются в порядке возрастания временных аргументов, так что операторы, соответствующие более поздним моментам времени стоят слева от тех, которые соответствуют более ранним моментам, а общий знак выражения определяется четностью перестановок фермиевских операторов (необходимых для реализации "правильного" порядка расположения операторов по времени). Формальное определение операции $T$–упорядочения, заимствованное из квантовой теории поля, имеет вид:

$$T\left\{F_1(t_1)F_2(t_2)\right\} = \begin{cases} F_1(t_1)F_2(t_2) & \text{for} \quad t_1 > t_2 \\ -F_2(t_2)F_1(t_1) & \text{for} \quad t_1 < t_2 \end{cases} \tag{1.27}$$

для фермиевских операторов, и

$$T\left\{B_1(t_1)B_2(t_2)\right\} = \begin{cases} B_1(t_1)B_2(t_2) & \text{for} \quad t_1 > t_2 \\ B_2(t_2)B_1(t_1) & \text{for} \quad t_1 < t_2 \end{cases} \tag{1.28}$$

для бозевских операторов. Функция Грина, определенная в (1.26) обычно называется фейнмановской или причинной ($T$–упорядоченной)[3].

При рассмотрении бесконечной однородной (трансляционно инвариантной) системы $G(\mathbf{r}t;\mathbf{r}'t') = G(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t-t')$ и удобно выполнить фурье – преобразование как по $t-t'$, так и по $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$:

$$G(\mathbf{p}\tau) = \int d^3rG(\mathbf{r}\tau)e^{-i\mathbf{pr}} \tag{1.29}$$

[2]Стандартное определение "АГД" отличается дополнительным множителем $-i$, который мы учли выше в при выполнении фурье – преобразования.

[3]Заметим, что это определение не совпадает с определением так называемой двухвременной функции Грина Боголюбова – Тябликова, которая вводится в теории линейного отклика [12], даже если мы перейдем в ней к пределу нулевой температуры. Преимущество использования фейнмановских функций состоит в возможности построения для них диаграммной техники, дающей универсальный метод вычисления этих функций по теории возмущений. Для гриновских функций Боголюбова – Тябликова никакой (удобной) диаграммной техники построить не удается. Имеется ряд точных соотношений и методов, позволяющих выразить функции Грина теории линейного отклика через фейнмановские функции при $T = 0$ или через соответствующие их обобщения для случая конечных температур (мацубаровский формализм), что будет подробно обсуждаться ниже [1, 2].

где

$$G(\mathbf{p}\tau) = \begin{cases} <0|a_{\mathbf{p}}e^{-iH\tau}a_{\mathbf{p}}^{+}|0> e^{iE_0\tau} & \tau > 0 \\ -<0|a_{\mathbf{p}}^{+}e^{iH\tau}a_{\mathbf{p}}|0> e^{-iE_0\tau} & \tau < 0 \end{cases} \tag{1.30}$$

Здесь $E_0$ – энергия основного состояния (в нашем случае просто равная энергии Ферми $E_F$).

Понятие квазичастицы является осмысленным, если одночастичную функцию Грина рассматриваемой системы можно представить в виде ($\tau > 0$):

$$G(\mathbf{p}\tau) \approx Ze^{-i\xi(\mathbf{p})\tau-\gamma(\mathbf{p})\tau} + ... \quad \text{and} \quad \gamma(\mathbf{p}) \ll \xi(\mathbf{p}) \tag{1.31}$$

где $\xi(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}) - E_F$, т.е. выделить в ней вклад, аналогичный по форме гриновской функции газа свободных (невзаимодействующих) фермионов. Уравнение (1.31) означает наличие (с амплитудой $Z$ в основном состоянии) волнового пакета, соответствующего квазичастице с энергией $\xi(\mathbf{p})$ и *затуханием* $\gamma(\mathbf{p})$. Мы должны также потребовать выполнение условия $\gamma(\mathbf{p}) \ll \xi(\mathbf{p})$, т.е. малости затухания, чтобы квазичастицы были "хорошо определены"[4]. Аналогичным образом, при $\tau < 0$ можно определить гриновскую функцию квазидырки. Окончательно, мы приходим к выводу, что в системе (фермионов) с хорошо определеннными квазичастицами фурье – образ функции Грина (1.26) может быть записан как:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p}\varepsilon) &= Z\left\{\frac{1-n_{\mathbf{p}}}{\varepsilon-\xi(\mathbf{p})+i\gamma(\mathbf{p})} + \frac{n_{\mathbf{p}}}{\varepsilon-\xi(\mathbf{p})-i\gamma(\mathbf{p})}\right\} + G_{reg}(\mathbf{p}\varepsilon) = \\ &= \frac{Z}{\varepsilon-\xi(\mathbf{p})+i\gamma(\mathbf{p})sign(p-p_F)} + G_{reg}(\mathbf{p}\varepsilon) \end{aligned} \tag{1.32}$$

Видим, что полюса этого выражения определяют спектр квазичастиц и их затухание. Это общее свойство функций Грина, позволяющее определить спектр квазичастиц в многочастичной системе. Величина $G_{reg}$ в (1.32) определяется многочастичными возбуждениями и, в большинстве случаев, не играет особой роли. Однако в системах с сильными корреляциями (взаимодействиями) мы можем встретиться с ситуацией, когда квазичастичных полюсов в функции Грина просто нет, соответственно нет и одночастичных возбуждений (квазичастиц), все определяется как раз вкладом $G_{reg}$, что делает анализ гораздо более сложным.

Зачем нужны функции Грина? Прежде всего, они дают нам общий метод изучения спектра возбуждений многочастичных (взаимодействующих) систем. Оказывается также, что знание функций Грина позволяет рассчитать средние по основному состоянию ($T = 0$) произвольных физических характеристик таких систем. Рассмотрим простые примеры. Используя введенную выше *одночастичную* функцию Грина можно рассчитать средние по основному состоянию от операторов, которые могут быть представлены как суммы одночастичных вкладов (одночастичные операторы) [25, 11]:

$$\hat{A} = \sum_i \hat{A}_i(x_i, \mathbf{p}_i) \tag{1.33}$$

где $x_i$ представляет как пространственные, так и спиновые переменные, а $\mathbf{p}_i$ – импульсы (операторы!) отдельных частиц, составляющих нашу систему. Типичные примеры:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) \tag{1.34}$$

[4]Это условие, как мы увидим ниже, удовлетворяется в теории ферми – жидкости Ландау, где вблизи поверхности Ферми имеем: $\xi(\mathbf{p}) \approx v_F(|\mathbf{p}-p_F|)$, тогда как $\gamma(\mathbf{p}) \sim (|\mathbf{p}|-p_F)^2$ ($v_F$ – фермиевская скорость).

– оператор плотности частиц в точке $\mathbf{r}$,

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{e}{m}\sum_i \mathbf{p}_i\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) \tag{1.35}$$

– плотность тока в точке $\mathbf{r}$ и т.д.

Оператор $\hat{A}$ в представлении вторичного квантования может быть записан как:

$$\hat{A} = \int dx\psi^+(x)A(x,\mathbf{p})\psi(x) \tag{1.36}$$

Рассмотрим функцию Грина (1.25), (1.26) при $t = t' - 0$:

$$G(x,x',\tau)|_{\tau\to -0} = - < 0|\psi^+(x')\psi(x)|0 > \tag{1.37}$$

Тогда среднее значение $\hat{A}$ пос основному состоянию может быть записано как:

$$< A >= \int dx A(x,\mathbf{p})G(x,x',\tau=-0)|_{x=x'} = -SpAG|_{\tau=-0} \tag{1.38}$$

Таким образом, величина $G|_{\tau=-0}$, с точностью до знака, совпадает с одночастичной матрицей плотности при $T = 0$:

$$\rho(x',x) =< 0|\psi^+(x')\psi(x)|0 >= -G|_{\tau=-0} \tag{1.39}$$

Для определения среднего значения двухчастичных операторов:

$$\hat{B} = \sum_{ik} B_{ik}(x_i\mathbf{p}_i; x_k\mathbf{p}_k) \tag{1.40}$$

необходимо использовать *двухчастичную* функцию Грина, обычно определяемую как:

$$G_2(1,2;3,4) =< 0|T\psi(1)\psi(2)\psi^+(3)\psi^+(4)|0 > \tag{1.41}$$

и т.д. В общем случае, проблема нахождения средних значений многочастичных операторов требует знания соответствующих многочастичных матриц плотности [25], которые могут быть выражены через соответствующие многочастичные функции Грина.

## 1.2 Диаграммная техника. Уравнение Дайсона.

Диаграммы Фейнмана дают элегантное графическое представление произвольных членов ряда теории возмущений для функций Грина. Стандартный метод получения конкретных диаграмм сводится к изучению разложения в ряд теории возмущений $S$–матрицы (матрицы рассеяния) и использованию теоремы Вика [1, 2]. Основные графические элементы любой диаграммной техники — *линии* функций Грина и *вершины* взаимодействия, из которых, по определенным правилам, составляются диаграммы Фейнмана той или иной “топологии”, зависящей от типа анализируемого взаимодействия. Ниже мы сформулируем такие правила в явном виде [1] для целого ряда конкретных взаимодействий, которые будут изучаться в этих лекциях.

Замечательной особенностью фейнмановской диаграммной техники является возможность проведения *графического суммирования* бесконечных (под)последовательностей

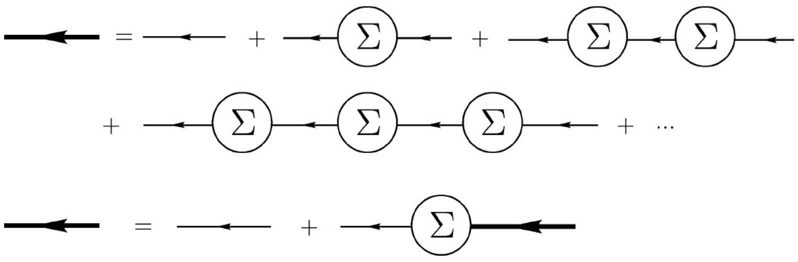


Рис. 1.1: Диаграммный вывод уравнения Дайсона.

диаграмм. Рассмотрим простейший (но и наиболее важный!) пример такого суммирования, дающий вывод так называемого уравнения Дайсона [1, 2]. Обозначим *точную* функцию Грина "жирной" (или "одетой") линией, а функцию Грина свободной частицы – "тонкой" линией. Полная амплитуда перехода (функция Грина) из точки 2 в точку 1, очевидным образом, дается суммой всех возможных амплитут такого перехода, возникающих во всех порядках теории возмущений, т.е. суммой всевозможных фейнмановских диаграмм для функции Грина. Проклассифицируем эти диаграммы следующим образом. Прежде всего, выделим диаграмму (линию), соответствующую распространеию свободной частицы. Остальные диаграммы имеют следуюий вид: до некоторой точки частица распространяется как свободная, затем происходит рассеяние (взаимодействие), приводящее к рождению и уничтожению нескольких частиц и дырок (или же частица просто рассеивается другими частицами, находящимися в фермиевском "море" под поврхностью Ферми), затем частица снова распространяется свободно, потом процессы рассеяния (взаимодействия) повторяются и т.д. Обозначим через $\Sigma$ сумму всех диаграмм, которые не могут разделены на две части путем *разрезания одной фермионной линии.* Такой "блок" $\Sigma$ называется неприводимой *собственно – энергетической* частью частицы (фермиона). Теперь легко убедиться, что полная функция Грина определяется уравнением Дайсона, показанным графически на Рис. 1.1. В аналитическом виде это сводится к интегральному уравнеию вида:

$$G(1,2) = G_0(1,2) + \int d\tau_3 d\tau_4 G_0(1,3)\Sigma(3,4)G(4,2) \tag{1.42}$$

Итерируя это уравнение получаем полный ряд теории возмущений для функции Грина. После преобразования Фурье уравнения Дайсона сводится к алгебраическому:

$$G(\mathbf{p}\varepsilon) = G_0(\mathbf{p}\varepsilon) + G_0(\mathbf{p}\varepsilon)\Sigma(\mathbf{p}\varepsilon)G(\mathbf{p}\varepsilon), \tag{1.43}$$

которое сразу же решается:

$$G(\mathbf{p}\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{p}) - \Sigma(\mathbf{p}\varepsilon)} \tag{1.44}$$

Здесь мы учли явный вид функции Грина свободной частицы $G_0(\mathbf{p}\varepsilon)$. Ясно что собственно – энергетическая часть $\Sigma(\mathbf{p}\varepsilon)$ определяет в компактном виде все изменения движения частицы, связанные с ее взаимодействием с остальными частицами, составляющими нашу систему. В общем сдучае, собственно – энергетическая часть является комплексной, т.е. содержит действительную и мнимую части (именно поэтому мы опустили в (1.44) бесконечно малый мнимый вклад от свободной частицы

$i\delta sign(\varepsilon - \varepsilon_F)$). Решая уравнение Дайсона в каком – либо приближении (или, в редких случаях, точно) можно определить энергетический спектр системы из многих взаимодействующих частиц.

## 1.3 Функции Грина при конечных температурах.

Формализм функций Грина почти непосредственно обобщается на случай конечных температур $T$ [1]. Напомним основные положения соответствующего (мацубаровского) формализма, опять ограничиваясь, в основном, случаем фермионов. Так называемая термодинамическая (мацубаровская) функция Грина определяется как:

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, \tau_2 - \tau_1) = -i < T_\tau a_{\mathbf{p}}(\tau_2) a^+_{\mathbf{p}}(\tau_1) > \tag{1.45}$$

где мы испльзуем “представление взаимодействия” для операторов следующего вида:

$$a_{\mathbf{p}}(\tau) = e^{(H-\mu N)\tau} a_{\mathbf{p}} e^{-(H-\mu N)\tau} \tag{1.46}$$

где мацубаровское “время” $0 < \tau_1, \tau_2 < \beta = \frac{1}{T}$, а $\mu$ – химический потенциал. Треугольные скобки обозначают усреднение по большому каноническому ансамблю Гиббса, которое удобно записать в следующем виде:

$$< A >= \frac{Sp\rho A}{Sp\rho} \quad \text{where} \quad \rho = e^{-\beta(H-\mu N)} \tag{1.47}$$

где $Z = Sp\rho$.

Причина, по которой мацубаровская функция Грина $\mathcal{G}$ может быть представлена (практически) тем же самым диаграммным разложением, как и квантовомеханическая функция Грина $G$, соответствующая случаю $T = 0$, состоит в следующем. Мы знаем, что диаграммное разложение для $G$ непосредственно следует из зависящего от времени уравнения Шредингера. Но статистический оператор $\rho$, записанный в виде (1.47), удовлетворяет так называемому уравнению Блоха:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = -(H - \mu N)\rho \tag{1.48}$$

что легко проверяется прямым дифференцированием. Видно, что существует непосредственное соответствие между уравнением Шредингера (1.1) и уравнением Блоха (1.48):

$$\psi \leftrightarrow \rho \quad H \leftrightarrow H - \mu N \quad it \leftrightarrow \beta \tag{1.49}$$

Поэтому, простая замена

$$H \rightarrow H - \mu N \quad it \rightarrow \tau \tag{1.50}$$

во всех соотношениях предыдущих разделов позволяет сразу же получить все формальные соотношения (и диаграммную технику) для мацубаровских функций Грина $\mathcal{G}$ практически в том же самом виде, как и в формализме $T = 0$ для квантовомеханических функций Грина $G$. Замена $H \rightarrow H - \mu N$ приводит к простому изменению начала отсчета энергии частиц на величину $\mu$:

$$H_0 - \mu N = \sum_{\mathbf{p}} (\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu) a^+_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} \tag{1.51}$$

Хотя мацубаровские функции Грина $\mathcal{G}$ зависят от “мнимого времени” $\tau$ [5], мы всегда можем вернуться к реальному времени путем замены (в конечных выражениях) $\tau \to it$, или, строго говоря, путем аналитического продолжения мацубаровских выражений с оси мнимого на ось действительного времени.

Как мы уже отметили выше, величины $\tau_1$ и $\tau_2$ в (1.45) изменяются на интервале от 0 до $\beta$. Соответственно, для того чтобы выполнить преобразование Фурье по $\tau$, мы должны ввести функцию $\mathcal{G}$ периодически продолженную на интервал от $-\infty$ до $\infty$. Тогда можно записать преобразование Фурье в виде:

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau}\mathcal{G}(\mathbf{p}\omega_n) \tag{1.52}$$

где суммирование ведется по дискретному набору (мацубаровских) частот $\omega_n = \pi n T$. Тогда:

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}\omega_n) = \frac{1}{2}\int_{-\beta}^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau}\mathcal{G}(\mathbf{p}\tau) \tag{1.53}$$

Разность “времен” $\tau = \tau_2 - \tau_1$ изменяется на интервале $(-\beta, \beta)$, поскольку как $\tau_1$, так и $\tau_2$ изменяются на интервале $(0, \beta)$. Функция $\mathcal{G}(\mathbf{p}\tau)$ периодически повторяется на интервалах $(-\beta, \beta), (\beta, 3\beta), (3\beta, 5\beta), ..., (-3\beta, -\beta), ....$ Для системы, состоящей из фермионов, четные значения $n$ выпадают из ряда для $\mathcal{G}(\mathbf{p}\tau)$ из–за необходимости удовлетворить условие “антипериодичности”:

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, \tau) = -\mathcal{G}(\mathbf{p}, \tau + \beta) \quad \text{for} \quad \tau < 0 \tag{1.54}$$

Справедливость этого соотношения легко проверяется с использованием свойства шпура $SpAB = SpBA$. Для $\tau' - \tau > 0$ имеем:

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\mathbf{p}, \tau - \tau') = \frac{i}{Z} Sp e^{-\beta(H-\mu N)} a^+_{\mathbf{p}}(\tau') a_{\mathbf{p}}(\tau) = \\
= \frac{i}{Z} Sp a_{\mathbf{p}}(\tau) e^{-\beta(H-\mu N)} a^+_{\mathbf{p}}(\tau') e = \\
= \frac{i}{Z} Sp e^{-\beta(H-\mu N)} e^{\beta(H-\mu N)} a_{\mathbf{p}}(\tau) e^{-\beta(H-\mu N)} a^+_{\mathbf{p}}(\tau') = \\
= \frac{i}{Z} Sp e^{-\beta(H-\mu N)} a_{\mathbf{p}}(\tau + \beta) a^+_{\mathbf{p}}(\tau')
\end{aligned} \tag{1.55}$$

или

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, \tau - \tau') = -\mathcal{G}(\mathbf{p}, \tau - \tau' + \beta) \tag{1.56}$$

что при $\tau' = 0$ и дает нам (1.54). Знак минус появляется здесь из–за антикоммутативности фермиевских операторов. Подставляя (1.54) в (1.52) видим, что все вклады с четными $n$ обращаются в нуль. Таким образом, для фермионов мы всегда должны работать с нечетными мацубаровскими частотами:

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} = (2n+1)\pi T \tag{1.57}$$

[5] Величина $\tau$ была выбрана выше действительной, но функция Грина $\mathcal{G}$ может быть получена из $G$ заменой $it \to \tau$, так что в формализме термодинамических функций Грина мы имеем дело с переходом к $t = -i\tau$, т.е. к “мнимому времени”.

Для бозонов, аналогичным образом, в ряду Фурье для термодинамической функции Грина остаются только вклады от четных частот:

$$\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta} = 2n\pi T \tag{1.58}$$

Возвращаясь к выражениям (1.16), (1.17) и (1.18) для гриновских функций свободных частиц при $T = 0$, мы можем без труда выписать мацубаровскую функцию Грина:

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{p}, \tau_2 - \tau_1) = -i\{\theta(\tau_2 - \tau_1)(1 - n(\mathbf{p})) - \theta(\tau_1 - \tau_2)n(\mathbf{p})\}e^{-(\varepsilon(\mathbf{p})-\mu)(\tau_2-\tau_1)} \tag{1.59}$$

где $n(\mathbf{p}) = [e^{\beta(\varepsilon(\mathbf{p})-\mu)} + 1]^{-1}$ – распределение Ферми при конечной температуре $T$. Таким образом, ступенчатые функции, входящие в определение $G_0$ при $T = 0$ "размываются" эффектами конечной температуры, что приводит к одновременному появлению частиц и дырок в состоянии с заданным импульсом $\mathbf{p}$.

Подставляя (1.59) в (1.53) находим[6]:

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{p}\omega_n) = \frac{i}{i\omega_n - \varepsilon(\mathbf{p}) + \mu}, \quad \omega_n = (2n+1)\pi T \tag{1.60}$$

С единственным отличием, связанным с переходом к дискретным частотам, диаграммная техника для мацубаровских функций Грина при конечных $T$ практически идентична с квантовомеханической диаграммной техникой при $T = 0$. Полная функция Грина определяется из уравнения Дайсона:

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}\omega_n) = \frac{i}{i\omega_n - \varepsilon(\mathbf{p}) + \mu - \Sigma(\mathbf{p}\omega_n)}, \quad \omega_n = (2n+1)\pi T \tag{1.61}$$

Подчеркнем однако, что мацубаровские фуекции Грина не имеют смысла каких – либо "амплитуд перехода" (функций распространения) квантовой теории (поля).

Проводя расчеты мацубаровских функций Грина, мы можем, в принципе, найти любые термодинамические характеристики многочастичных систем, находящихся в равновесном состоянии. Описание произвольных неравновесных процессов может быть проведено на основе общего формализма гриновских функций Келдыша [2] и разработанной им специальной диаграммной техники. Однако обсуждение неравновесных процессов не входит в задачи нашего курса.

[6]Здесь снова введен дополнительный (по сравнению со стандартными обозначениями "АГД") множитель $i$, который появился выше в (1.45).

# Глава 2

# ЭЛЕКТРОН – ЭЛЕКТРОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

## 2.1 Правила диаграммной техники.

Рассмотрим систему взаимодействующих (нерелятивистских) ферми – частиц. В дальнейшем, в большинстве случаев, имеется в виду система электронов в металле. Гамильтониан взаимодействия запишем в виде:

$$H_{int} = \frac{1}{2}\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi^+_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi^+_\beta(\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\psi_\beta(\mathbf{r}_2)\psi_\alpha(\mathbf{r}_1) \tag{2.1}$$

где $V(\mathbf{r})$ – потенциал (статического) взаимодействия частиц, $\psi^+_\alpha(\mathbf{r}), \psi_\alpha(\mathbf{r})$ – операторы рождения и уничтожения фермионов в точке $\mathbf{r}$, $\alpha$ – спиновый индекс.

Общие правила диаграммной техники для вычисления поправок по взаимодействию к *одночастичной функции Грина* в импульсном представлении $G(p)$ сформулированы в [1]. Приведем их сводку для случая нулевой температуры $T = 0$:

- Диаграмма $n$–го порядка по взаимодействию содержит $2n$ вершин, $2n+1$ сплошных (электронных) линий и $n$ волнистых линий взаимодействия. Всем линиям приписываются определенные 4–импульсы, которые сохраняются в вершинах взаимодействия.

- Электрону (фермиону) сопоставляется *сплошная* линия, которой сопоставляется выражение для *свободной* функции Грина:

$$G_0(p) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) + i\delta sign\xi(\mathbf{p})} \qquad \text{где} \qquad \delta \to +0 \tag{2.2}$$

  причем

$$\xi(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} - \mu \approx v_F(|\mathbf{p}| - p_F) \tag{2.3}$$

  – энергетический спектр свободных фермионов, энергия которых отсчитывается от уровня Ферми (химического потенциала $\mu$), $p_F$ и $v_F$ – импульс и скорость на поверхности Ферми.

- *Волнистой* линии сопоставляется фурье – образ потенциала $V(\mathbf{q})$.
- Проводится интегрирование по $n$ независимым импульсам и частотам (4–импульсам).
- Возникшее выражение умножается на $(i)^n(2\pi)^{-4n}(2s+1)^F(-1)^F$, где $F$ – число замкнутых фермионных петель, а $s$ – спин фермиона (для электрона $s = 1/2$, так что у нас всегда $2s + 1 = 2$).

Для случая конечных температур, в мацубаровской технике [1], соответствующие правила для вычисления поправки $k$–го порядка для $G(\varepsilon_n(\mathbf{p}))$, формулируются так:

- Диаграмма $k$–го порядка имеет $2k$ вершин, $2k+1$ сплошных (электронных) линий и $k$ волнистых линий (взаимодействия). Линиям сопоставляются импульсы и (мацубаровские) частоты, удовлетворяющие в каждой вершине законам сохранения. Частоты бозевских линий всегда четные ($\omega_m = 2\pi mT$), а частоты фермиевских линий – нечетные ($\varepsilon_n = (2n + 1)\pi T$).
- По всем независимым импульсам и частотам диаграммы производится интегрирование и суммирование.
- Каждой сплошной линии с импульсом $\mathbf{p}$ и частотой $\varepsilon_n$ сопоставляется выражение:
$$G_0(\varepsilon_n\mathbf{p}) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p})} \tag{2.4}$$
а каждой волнистой линии с импульсом $\mathbf{q}$ и частотой $\omega_m$ сопоставляется $V(\mathbf{q})$.
- Перед полученным выражением ставится множитель $(-1)^k\frac{T^k}{(2\pi)^{3k}}(2s+1)^F(-1)^F$, где $F$ снова обозначает число фермионных петель диаграммы, а $s$ – спин фермиона (электрона).

## 2.2 Электронный газ с кулоновским взаимодействием.

Если попытаться заняться прямыми вычислениями поправок к функции Грина электрона в нормальном металле, руководствуясь сформулированными выше правилами диаграммной техники, то сразу окажется, что соответствующие выражения расходятся из-за сингулярного характера *кулоновского* взаимодействия при малых передаваемых импульсах $\mathbf{q}$:
$$V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2} \tag{2.5}$$
что является непосредственным следствием дальнодействующего характера кулоновского взаимодействия. Эта проблема устраняется суммированием бесконечной последовательности диаграмм, описывающей *экранирование* кулоновского потенциала свободными электронами.

Для этого вводится эффективное взаимодействие, изображаемое “жирной” волнистой линией, которая определяется последовательностью диаграмм, показанной на Рис.2.1, где *поляризационный оператор* дается суммой диаграмм, показанных на Рис.2.2. Важно подчеркнуть, что в разложении, показанном на Рис.2.2, отсутствуют графики, разрезаемые по одной линии взаимодействия, типа показанного на

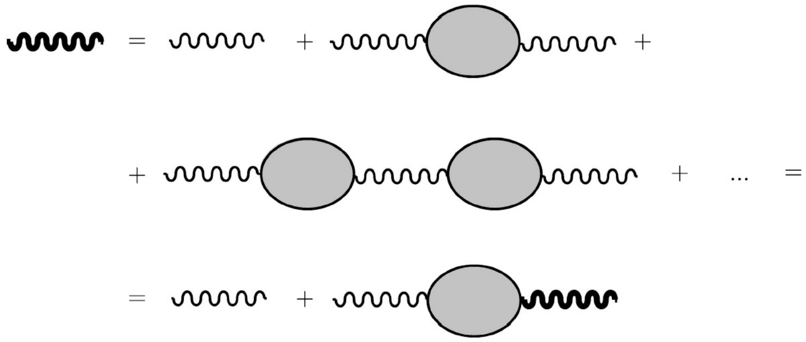


Рис. 2.1: Графическое определение эффективного взаимодействия.

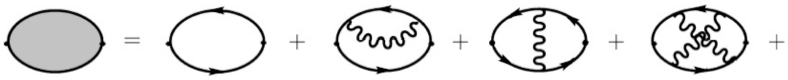


Рис. 2.2: Диаграммы для неприводимого поляризационного оператора.

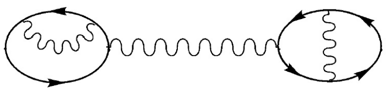


Рис. 2.3: Пример приводимой диаграммы.

Рис.2.3, так что это разложение определяет *неприводимый* поляризационный оператор. Тогда разложение, показанное на Рис.2.1 аналогично по смыслу уравнению Дайсона. В аналитическом виде эффективное взаимодействие записывается как:

$$\mathcal{V}(\mathbf{q}\omega) = V(\mathbf{q}) + V(\mathbf{q})\Pi(\mathbf{q}\omega)\mathcal{V}(\mathbf{q}\omega) \tag{2.6}$$

Эффективное взаимодействие $\mathcal{V}(\mathbf{q}\omega)$ является, вообще говоря, зависящим от частоты $\omega$, что соответствует учету эффектов запаздывания, связанных с характерным временем электронного отклика на мгновенное кулоновское взаимодействие.

Решая уравнение (2.6), получаем:

$$\mathcal{V}(\mathbf{q}\omega) = \frac{V(\mathbf{q})}{1 - V(\mathbf{q})\Pi(\mathbf{q}\omega)} \equiv \frac{V(\mathbf{q})}{\epsilon(\mathbf{q}\omega)} \tag{2.7}$$

где ввели диэлектрическую функцию (проницаемость):

$$\epsilon(\mathbf{q}\omega) = 1 - V(\mathbf{q})\Pi(\mathbf{q}\omega) \tag{2.8}$$

Так называемое приближение хаотических фаз (RPA) [1] соответствует использованию простейшего варианта поляризационного оператора, построенного на свободных функциях Грина (т.е. изображаемого простейшей диаграммой Рис.2.4(a)) [2]:

$$\Pi_0(\mathbf{q}\omega) = -2i \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} G_0(p+q)G_0(p) \tag{2.9}$$

Соответствующее эффективное взаимодействие определяется тогда графиками Рис.2.4(b). Это уравнение для эффективного взаимодействия можно представить еще и другом виде, показанном на Рис.2.5(a), где введен приводимый поляризационный оператор $\tilde{\Pi}(\mathbf{q}\omega)$, определяемый графиками Рис.2.5(b):

$$\mathcal{V} = V + V\tilde{\Pi}V \tag{2.10}$$

Из Рис.2.5(b) ясно, что:

$$\tilde{\Pi} = \frac{\Pi_0}{1 - V\Pi_0} \tag{2.11}$$

Тогда из (2.10), с использованием (2.11), получаем:

$$\begin{aligned} \mathcal{V} = V(1 + \tilde{\Pi}V) = V\left(1 + \frac{\Pi_0 V}{1 - V\Pi_0}\right) = \\ = \frac{V}{1 - V\Pi_0} = \frac{V}{\epsilon} \end{aligned} \tag{2.12}$$

что совпадает с (2.7), с диэлектрической проницаемостью, взятой в приближении RPA. Выражение (2.11) описывает полную поляризуемость системы.

Аналогичным образом можно получить и RPA – выражение для магнитной восприимчивости. Для этого нужно рассмотреть отклик системы на бесконечно слабое внешнее магнитное поле, переворачивающее электронный спин. Опуская технические детали, заметим, что для этого достаточно рассмотреть последовательность диаграмм, показанную на Рис.2.6. Если иметь ввиду популярную модель с (точеч-

[1] Эта терминология носит чисто исторический характер.

[2] Заметим, что в литературе часто используется определение $\Pi(\mathbf{q}\omega)$, отличающееся знаком [5], мы же придерживаемся обозначений книги [1]

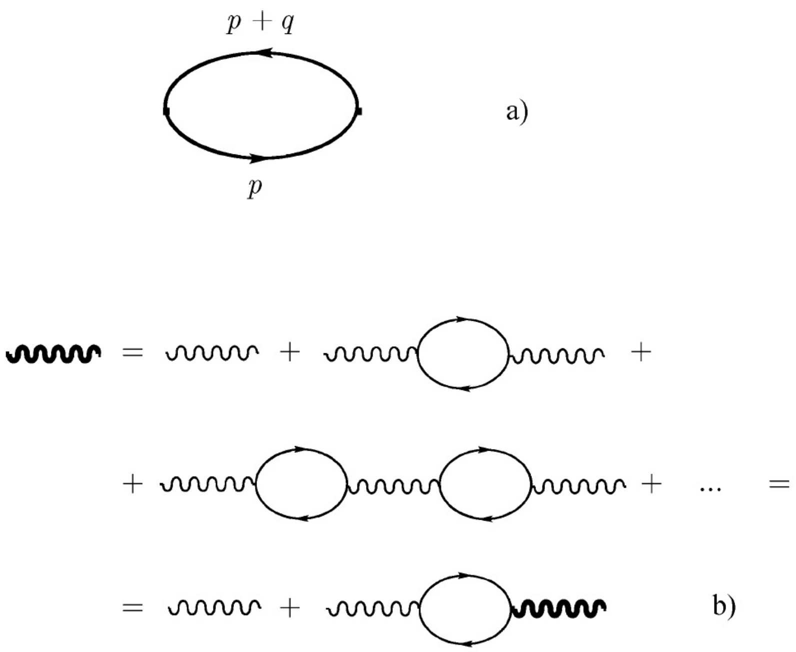



Рис. 2.4: Приближение хаотических фаз (RPA) для поляризационного оператора и эффективного (экранированного) взаимодействия.

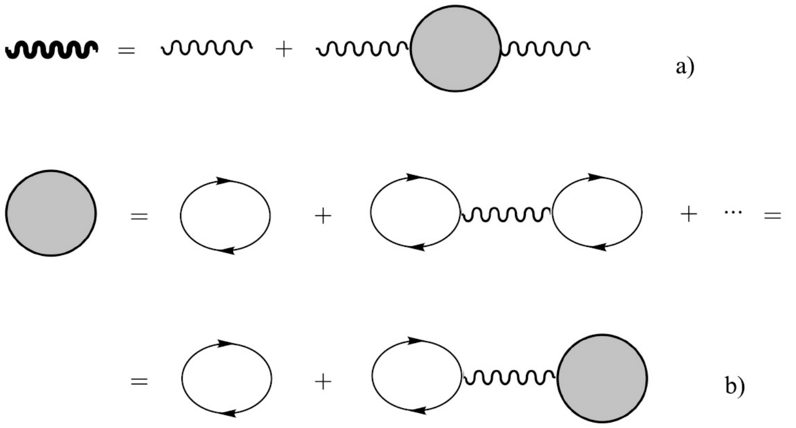



Рис. 2.5: Представление эффективного взаимодействия через приводимый поляризационный оператор $\tilde{\Pi}$.

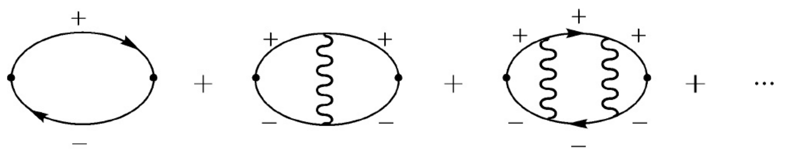



Рис. 2.6: Диаграммы для магнитной восприимчивости. $\pm$ обозначают направление спина.

ным) “хаббардовским” взаимодействием электронов $\mathcal{H}_{int} = Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$ эти диаграммы легко суммируются и дают:

$$\chi(\mathbf{q}\omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}\omega)}{1 + U\Pi_0(\mathbf{q}\omega)} \tag{2.13}$$

где $\chi_0(\mathbf{q}\omega)$ пропорционально $\Pi_0(\mathbf{q}\omega)$ из (2.9):

$$\chi_0(\mathbf{q}\omega) = -\frac{1}{4}g^2\mu_B^2\Pi_0(\mathbf{q}\omega) \qquad \Pi_0(\mathbf{q}\omega) = -\frac{4}{g^2\mu_B^2}\chi_0(\mathbf{q}\omega) \tag{2.14}$$

где $g$ – гиромагнитное отношение (обычно $g = 2$). Отметим изменение знака в знаменателе (2.13) по сравнению с (2.8). Это связано с тем фактом, что при расчете $\epsilon(\mathbf{q}\omega)$ мы имели дело с функцией отклика типа плотность – плотность и суммировали петли (каждой из которых сопоставлялся) дополнительный множитель $-1$. Здесь же, при расчете линейного отклика, мы суммируем (см. Рис.(2.6)) “лестничные” диаграммы (петли запрещены из-за сохранения спина – линии частиц и дырок на Рис.(2.6) соответствуют разным направлениям спина). Тем не менее, выражения для $\epsilon(\mathbf{q}\omega)$ и $\chi(\mathbf{q}\omega)$ вполне аналогичны и определяются, фактически, одной и той же величиной $\Pi_0(\mathbf{q}\omega)$ из (2.9).

## 2.3 Поляризационный оператор для газа свободных электронов при $T = 0$.

Приступим к расчету $\Pi_0(\mathbf{q}\omega)$, определяемого выражением (2.9). Эквивалентная запись имеет вид:

$$\Pi_0(\mathbf{q}\omega) = -2i\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi}G_0(\varepsilon_+\mathbf{p}_+)G_0(\varepsilon_-\mathbf{p}_-) \tag{2.15}$$

где $\varepsilon_\pm = \varepsilon \pm \frac{\omega}{2}$, $\mathbf{p}_\pm = \mathbf{p} \pm \frac{1}{2}\mathbf{q}$. В рассматриваемом интеграле наиболее существенны области интегрирования вблизи поверхности Ферми, поэтому при $q \ll p_F$ можно написать $|\mathbf{p}_\pm| = p \pm \frac{1}{2}q\cos\theta$, где $\theta$ – угол между векторами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$. Тогда:

$$G_0(\varepsilon_\pm\mathbf{p}_\pm) = \frac{1}{\varepsilon_\pm - \xi_\pm(\mathbf{p}) + i\delta sign\xi_\pm(\mathbf{p})} \tag{2.16}$$

где

$$\xi_\pm(\mathbf{p}) = \xi(\mathbf{p}_\pm) = \xi(\mathbf{p}) \pm \frac{1}{2}v_Fq\cos\theta \tag{2.17}$$

Интегрирование по $\varepsilon$ в (2.15) можно провести, замыкая контур интегрирования в верхней полуплоскости комплексной переменной $\varepsilon$ и раскладывая произведение двух

$G_0$ на простейшие дроби. Интеграл отличен от нуля, если полюса обеих функций Грина $G_0$ лежат в разных полуплоскостях. В итоге получаем:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{(\varepsilon + \frac{\omega}{2} - \xi_+ + i\delta sign\xi_+)(\varepsilon - \frac{\omega}{2} - \xi_- + i\delta sign\xi_-)} = \\ = \frac{2\pi i(n(\xi_-) - n(\xi_+))}{\omega - v_F q\cos\theta + i\delta(sign\xi_+ - sign\xi_-)} \tag{2.18}$$

где:

$$n(\xi) = \begin{cases} 1 & \text{при} \quad \xi \leq 0 \\ 0 & \text{при} \quad \xi > 0 \end{cases} \tag{2.19}$$

– фермиевская функция распределения при $T = 0$. Поскольку нас интересуют малые $q$, разность $n(\xi_-) - n(\xi_+)$ отлична от нуля в тонком слое вблизи поверхности Ферми. Поэтому, вместо полного интеграла по $p$ можно считать интеграл по линеаризованному спектру $\xi$, пользуясь простым правилом:

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} ... \approx \frac{\nu_F}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)... \tag{2.20}$$

где

$$\nu_F = \frac{mp_F}{2\pi^2\hbar^3} \tag{2.21}$$

– плотность состояний на уровне Ферми в расчете на одну проекцию спина. В зависимости от знака $\cos\theta$ возможны два случая:

1. $\cos\theta > 0$ – тогда выражение (2.18) отлично от нуля при $-\frac{v_F q}{2}\cos\theta < \xi < \frac{v_F q}{2}\cos\theta$, причем $n(\xi_-) - n(\xi_+) = 1$;
2. $\cos\theta < 0$ – тогда выражение (2.18) отлично от нуля при $\frac{v_F q}{2}\cos\theta < \xi < -\frac{v_F q}{2}\cos\theta$, причем $n(\xi_-) - n(\xi_+) = -1$.

В результате, остается следующий интеграл по углам:

$$\Pi_0(\mathbf{q}\omega) = \nu_F \int_{-1}^{1} d\cos\theta \frac{v_F q\cos\theta}{\omega - v_F q\cos\theta + i\delta sign\omega} \tag{2.22}$$

Этот интеграл вычисляется непосредственно, с использованием соотношения:

$$\int_{-1}^{1} \frac{xdx}{x_0 - x + i\delta sign x_0} = A + iB \tag{2.23}$$

$$A = -2 + x_0 \ln\left|\frac{x_0+1}{x_0-1}\right| \qquad B = \begin{cases} 0 & \text{при} \quad |x_0| > 1 \\ -\pi x_0 & \text{при} \quad 0 < x_0 < 1 \\ \pi x_0 & \text{при} \quad -1 < x_0 < 0 \end{cases}$$

В итоге получаем:

$$\Pi_0(q\omega) = -2\nu_F\left\{1 - \frac{\omega}{2v_F q}\ln\left|\frac{\omega + v_F q}{\omega - v_F q}\right| + \frac{i\pi}{2}\frac{|\omega|}{v_F q}\theta\left(1 - \frac{|\omega|}{v_F q}\right)\right\} \tag{2.24}$$

Для $\omega = 0$ имеем:

$$\Pi_0(q\omega = 0) = -2\nu_F = -N(E_F) \tag{2.25}$$

где ввели:

$$N(E_F) = 2\nu_F = \frac{mp_F}{\pi^2\hbar^3} \tag{2.26}$$

– плотность состояний на уровне Ферми для обеих проекций спина. При $\omega \gg v_F q$ имеем:

$$\Pi_0(q\omega) \approx N(E_F)\frac{1}{3}\frac{v_F^2 q^2}{\omega^2}\left(1+\frac{3}{5}\frac{v_F^2 q^2}{\omega^2}\right) \tag{2.27}$$

Полученные формулы будут неоднократно использоваться в дальнейшем.

## 2.4 Диэлектрическая проницаемость электронного газа.

Используя (2.25) в (2.8) получаем диэлектрическую проницаемость, соответствующую обычной (дебаевской или томас – фермиевской) экранировке:

$$\epsilon(\mathbf{q},0)|_{q\to 0} = 1 + \frac{\kappa_D^2}{q^2} \tag{2.28}$$

где квадрат обратного радиуса экранирования есть:

$$\kappa_D^2 = 4\pi e^2 N(E_F) = \frac{4e^2 m p_F}{\pi} = \frac{6\pi n e^2}{E_F} \tag{2.29}$$

где $n = \frac{p_F^3}{3\pi^2}$ – плотность электронов. Тогда фурье – образ эффективного взаимодействия есть:

$$\mathcal{V}(\mathbf{q},0) = \frac{4\pi e^2}{q^2+\kappa_D^2} \tag{2.30}$$

В координатном представлении это соответствует потенциалу вида:

$$\mathcal{V}(r) = \frac{e^2}{r}e^{-\kappa_D r} \tag{2.31}$$

Если использовать в (2.8) асимптотику (2.27), то в пределе $q \to 0$ получим:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \tag{2.32}$$

где квадрат плазменной частоты определяется обычным выражением:

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m} \tag{2.33}$$

Учитывая вклад второго слагаемого в (2.27), из уравнения $\epsilon(q\omega) = 0$ находим спектр плазмонов в виде:

$$\omega^2(q) = \omega_p^2 + \frac{3}{5}v_F^2 q^2 \tag{2.34}$$

Более аккуратный анализ, с учетом мнимой части поляризационного оператора, позволяет проанализировать их затухание [5, 10]. При росте $q$ спектр (2.34) попадает в область энергий одночастичных возбуждений (пар частица – дырка), как это показано на Рис.2.7(a), где возникает сильное затухание и плазмон исчезает как хорошо определенное коллективное возбуждение системы.

Энергия возбуждения пары частица – дырка в системе свободных фермионов:

$$\omega^0_{\mathbf{pq}} = \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{p}} = \frac{(\mathbf{p}+\mathbf{q})^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} = \frac{\mathbf{qp}}{m} + \frac{q^2}{2m} \tag{2.35}$$

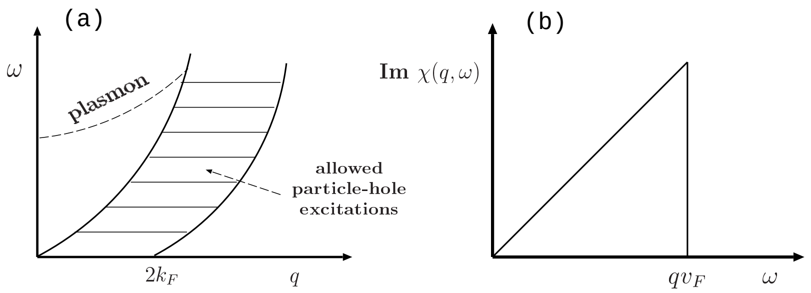



Рис. 2.7: (a) - Заштрихована область разрешенных значений энергии возбуждения электрон дырочных пар в ферми-системе – область затухания плазмонов. (b) - мнимая часть обобщенной восприимчивости плотность – плотность в канале частица – дырка.

Спектр этих возбуждений с импульсом $\mathbf{q}$ образует континуум, лежащий в пределах:

$$\begin{aligned} 0 \leq \omega^0_{\mathbf{pq}} \leq \frac{qp_F}{m} + \frac{q^2}{2m} \quad \text{при} \quad q < 2p_F \\ -\frac{qp_F}{m} + \frac{q^2}{2m} \leq \omega^0_{\mathbf{pq}} \leq \frac{qp_F}{m} + \frac{q^2}{2m} \quad \text{при} \quad q > 2p_F \end{aligned} \tag{2.36}$$

Эта область и показана заштрихованной на Рис.2.7(a). В дальнейшем мы еще покажем, что мнимая часть (2.24), при $\omega > 0$, с точностью до знака совпадает с мнимой частью функции отклика (обобщенной восприимчивости) плотность – плотность, что показано на Рис.2.7(b).

По смыслу проведенного выше расчета ясно, что выражение (2.24) справедливо только в области малых $\omega$ и $q$. Фактически, поляризационный оператор может быть рассчитан для произвольных $q$ и $\omega$ (J.Lindhardt, 1954). Приведем результаты соответствующих расчетов [5]. Статическая диэлектрическая проницаемость дается следующим выражением:

$$\begin{aligned} \epsilon(q,0) = 1 + \frac{4me^2p_F}{\pi q^2} u\left(\frac{q}{2p_F}\right) = \\ = 1 + \left(\frac{4}{9\pi^4}\right)^{1/3} \frac{r_s}{x^2} u(x) = 1 + 0.66 r_s \left(\frac{p_F}{q}\right)^2 u\left(\frac{q}{2p_F}\right) \end{aligned} \tag{2.37}$$

где

$$u(x) = \frac{1}{2}\left\{1 + \frac{1-x^2}{2x} \ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right\} \tag{2.38}$$

В (2.37) введено стандартное в теории электронного газа обозначение $r_s$, которое определяется соотношением $\frac{4\pi r_s^3 a_0^3}{3} = \frac{1}{n}$, где $n$ – плотность электронов, $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ – боровский радиус. Таким образом величина $r_s$ представляет собой среднее расстояние между электронами в единицах боровского радиуса.

Параметром малости рассматриваемой теории (RPA) является отношение характерной кулоновской энергии к энергии Ферми:

$$\frac{V_C}{E_F} \sim \frac{e^2 p_F}{p_F^2} m \sim \frac{e^2}{\hbar v_F} \sim \frac{\hbar}{p_F a_0} \sim \frac{a}{a_0} \sim r_s \tag{2.39}$$

В металлах обычно имеем $1 < r_s < 5$, так что RPA приближение является для них, в принципе, достаточно плохим. Оно хорошо "работает" для сильно сжатого газа электронов и поэтому часто называется приближением высокой плотности.

График функции $u(x)$ показан на Рис.2.8. При $q \to 0$ отсюда, естественно, получаем простой ответ (2.28). Существенно обсудить область $q \sim 2p_F$. Из (2.37) и (2.38)

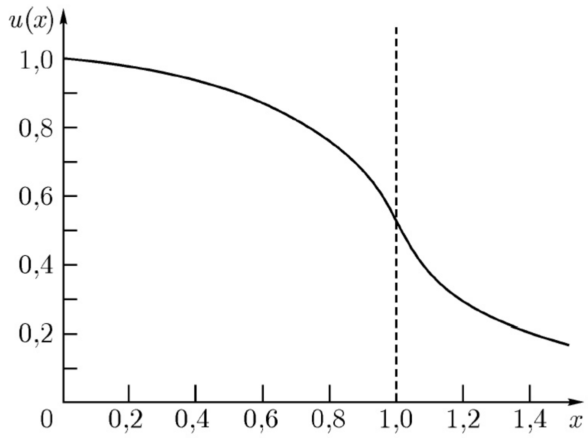



Рис. 2.8: График функции $u(x)$. Производная этой функции имеет логарифмическую особенность при $x = 1$.

видно, что величина производной $\frac{\partial\epsilon(q,0)}{\partial q} \to \infty$ при $q \to 2p_F$. Это приводит к ряду аномалий физических величин. Например, пространственная зависимость экранированного потенциала взаимодействия не сводится к простой формуле типа (2.31). Дело в том, что асимптотическое поведение фурье – интеграла типа $\int dqe^{iqr}f(q)$ определяется особыми точками (сингулярностями) $f(q)$ и ее производных, попадающими внутрь интервала интегрирования. Например, если $f(q) \to \infty$ в точке $q = q_0$, скажем $f(q) \sim \delta(q - q_0)$, то в $f(r)$ возникает осциллирующий вклад $\sim e^{iq_0 r}$. Аналогичным образом, сингулярность производной $\frac{\partial\epsilon}{\partial q}$ при $q = 2p_F$ приводит к тому, что в потенциале взаимодействия возникает *дальнодействующий и осциллирующий* вклад вида:

$$\mathcal{V}(r)|_{r\to\infty} \sim \frac{\cos(2p_F r + \phi)}{r^3} \tag{2.40}$$

Соответственно, экранирующий заряд вокруг, например, заряженной примеси, также осциллирует согласно (2.40) (фриделевские осцилляции).

Еще более важен аналогичный эффект в теории магнитных взаимодействий в металлах. Выше мы видели, что парамагнитная восприимчивость электронного газа, фактически, определяется той же поляризационной петлей (см. (2.14)). Тогда:

$$\chi_0(q\omega = 0) = \frac{3g^2\mu_B^2 n}{8E_F} u\left(\frac{q}{2p_F}\right) \tag{2.41}$$

Соответственно, спиновая плотность $\mathbf{s}(\mathbf{r})$ на некотором расстоянии $r$ от магнитной примеси со спином $\mathbf{S}_a$, которая определяется выражением:

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \frac{J}{g^2\mu_B^2}\sum_{\mathbf{q}} \chi_0(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}\mathbf{S}_a \tag{2.42}$$

будет осциллировать аналогично (2.40). Здесь $J$ определяет контактное обменное взаимодействие между примесью и электронами проводимости: $-J\mathbf{S}_a\mathbf{s}$. Если теперь поместить в металл другую магнитную примесь $\mathbf{S}_b$, то она будет взаимодействовать с электронами проводимости аналогичным образом, а соответственно возникнет и эффективное обменное взаимодействие спинов примесей через электроны проводимости (взаимодействие Рудермана – Киттеля – Касуйя – Иосиды). Это взаимодействие (РККИ) имеет вид:

$$J_{RKKY}(\mathbf{r}_a-\mathbf{r}_b)=-\frac{J^2}{g^2\mu_B^2}\sum_{\mathbf{q}}\chi_0(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_a-\mathbf{r}_b)}\sim\frac{J^2}{E_F}\frac{\cos(2p_Fr_{ab}+\phi)}{r_{ab}^3} \tag{2.43}$$

и осциллирует, как функция расстояния между примесями $r_{ab}$. Из такой осцилляционной формы взаимодействия локализованных спинов в металле возникает целый ряд следствий. Возникновение в (2.43) областей (в координатном пространстве) с разными знаками (т.е. взаимодействий ферромагнитного и антиферромагнитного типов) приводит к появлению сложных магнитных структур, например в соединениях, содержащих редкоземельные элементы (спирали, геликоиды) [6]. Если же речь идет о примесях, случайно расположенных в немагнитном металле, то взаимодействие (2.43) приводит к возникновению совершенно необычного магнитного состояния — спинового стекла [7].

## 2.5 Собственно – энергетическая часть, эффективная масса и затухание квазичастиц.

В конечном итоге, нашей задачей является расчет одночастичной функции Грина в системе с кулоновским (или каким – либо другим) взаимодействием, которая всегда может быть записана в дайсоновском виде:

$$G(\mathbf{p}\varepsilon)=\frac{1}{\varepsilon-\varepsilon_p-\Sigma(p\varepsilon)} \tag{2.44}$$

где для собственно – энергетической части $\Sigma(p\varepsilon)$ используется какое – либо приближение. Что из этого можно получить? Мы знаем, что функция Грина свободных электронов $G_0(\mathbf{p}\varepsilon)$ имеет полюс при $\varepsilon_p=\frac{p^2}{2m}-\mu$. *Предположим*, что и в системе с взаимодействием функция Грина имеет полюсный вид:

$$G(\mathbf{p}\varepsilon)\approx\frac{1}{\varepsilon-\tilde{\varepsilon}_p} \tag{2.45}$$

где $\tilde{\varepsilon}_p$ представляет собой спектр "перенормированных" квазичастиц. Сравнение с (2.44) показывает, что спектр $\tilde{\varepsilon}_p$ определяется уравнением:

$$\varepsilon-\varepsilon_p-Re\Sigma(p\varepsilon)=0 \qquad \text{или} \qquad \tilde{\varepsilon}_p-\varepsilon_p-Re\Sigma(p\tilde{\varepsilon}_p)=0 \tag{2.46}$$

где для простоты рассуждений мы (пока!) пренебрегли $Im\Sigma$, определяющей затухание квазичастиц. Проведем в (2.44) разложение в окрестности полюса:

$$G(\mathbf{p}\varepsilon)=\frac{1}{\varepsilon-\varepsilon_p-\Sigma(\mathbf{p}\varepsilon)}=\frac{1}{\varepsilon-\varepsilon_p-\Sigma(\mathbf{p}\tilde{\varepsilon}_p)-\frac{\partial\Sigma}{\partial\varepsilon}|_{\varepsilon=\tilde{\varepsilon}_p}(\varepsilon-\tilde{\varepsilon}_p)} \tag{2.47}$$

С учетом (2.46) перепишем (2.47) в виде:

$$G(\mathbf{p}\varepsilon)=\frac{1}{\varepsilon-\tilde{\varepsilon}_p-\frac{\partial\Sigma}{\partial\varepsilon}|_{\varepsilon=\tilde{\varepsilon}_p}(\varepsilon-\tilde{\varepsilon}_p)}=\frac{\frac{1}{1-\frac{\partial\Sigma}{\partial\varepsilon}|_{\varepsilon=\varepsilon_p}}}{\varepsilon-\tilde{\varepsilon}_p}\equiv\frac{Z_p}{\varepsilon-\tilde{\varepsilon}_p} \tag{2.48}$$

где введен "вычет в полюсе":

$$Z_p = \frac{1}{1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon = \varepsilon_p}} \tag{2.49}$$

Иногда величину $Z_p$ называют также фактором "перенормировки волновой функции". Из общих соображений ясно, что $Z_p \leq 1$, причем равенство здесь имеет место только для идеального ферми – газа. Спектральная плотность, соответствующая функции Грина (2.48):

$$A(\mathbf{p}\varepsilon) = Z_p \delta(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_p) \tag{2.50}$$

и имеет (как и в идеальном газе) вид бесконечно узкого пика при $\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_p$ (энергии квазичастицы). Фактически, неравенство $Z_p < 1$, означает, что в системе с взаимодействием квазичастичный вклад в $A(\mathbf{p}\varepsilon)$ несколько подавлен, но дополнительно возникает "многочастичный" (некогерентный) вклад в спектральную плотность [8], отброшенный при проведенном нами упрощенном рассмотрении. Пренебрежение затуханием квазичастиц проявилось здесь в том, что квазичастичный вклад в $A(\mathbf{p}\varepsilon)$ имеет $\delta$ – образный вид, затухание (как мы увидим ниже) приводит к появлению конечной ширины этого пика.

Предположим теперь, что спектр "перенормированных" квазичастиц может быть описан в приближении эффективной массы:

$$\tilde{\varepsilon}_p = \frac{p^2}{2m^*} - \mu \tag{2.51}$$

Тогда нетрудно получить:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m^*} = \frac{\partial \tilde{\varepsilon}_p}{\partial (p^2)} = \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial (p^2)} + \left\{ \frac{\partial \Sigma}{\partial (p^2)} + \frac{\partial \Sigma}{\partial \tilde{\varepsilon}_p} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}_p}{\partial (p^2)} \right\} = \\ = \frac{1}{2m} + \frac{\partial \Sigma}{2m \partial \left( \frac{p^2}{2m} \right)} + \frac{\partial \Sigma}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_p} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}_p}{\partial (p^2)} \end{aligned} \tag{2.52}$$

или

$$\frac{1}{m^*} \left( 1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_p} \right) = \frac{1}{m} \left( 1 + \frac{\partial \Sigma}{\partial \varepsilon_p} \right) \tag{2.53}$$

так что

$$\frac{m^*}{m} = \frac{1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_p}}{1 + \frac{\partial \Sigma}{\partial \varepsilon_p}} = \frac{1}{Z_p} \frac{1}{1 + \frac{\partial \Sigma}{\partial \varepsilon_p}} \tag{2.54}$$

что дает важную связь "перенормировки" массы $m^*/m$ с вычетом в полюсе функции Грина $Z_p$. В простейшем случае, когда собственно – энергетическая часть не зависит от импульса $p$ (или, что то же, от $\tilde{\varepsilon}_p$), эта связь имеет особенно простой вид:

$$\frac{m^*}{m} = \frac{1}{Z_p} \tag{2.55}$$

так что эффективная масса в системе с взаимодействием увеличивается, по сравнению, со случаем идеального газа.

Общее поведение затухания, связанного с $Im\Sigma$, будет подробнее рассмотрено позже, но уже на этом простейшем уровне рассуждений ясно, что полученные формулы позволяют рассчитать эффективные характеристики многочастичной системы (квазичастиц), исходя из того или иного конкретного приближения для собственно – энергетической части (получающегося из рассмотрения конкретных диаграмм теории возмущений).

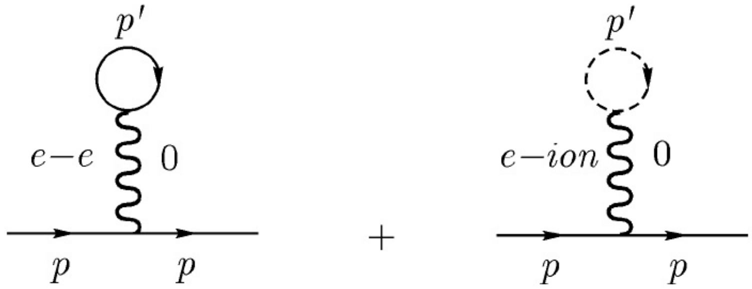



Рис. 2.9: Простейшие хартриевские диаграммы, описывающие взаимодействие электронов между собой и с положительным "фоном" ионов (функция Грина ионов показана пунктиром).

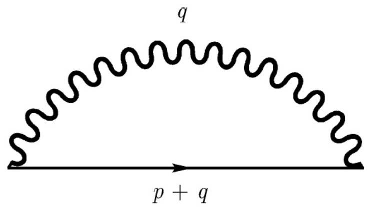



Рис. 2.10: Собственно – энергетическая часть электрона в RPA приближении. "Самодействие" посредством экранированного кулоновского взаимодействия.

В качестве примера, вернемся к задаче о сильно сжатом газе электронов. Рассмотрим простейшие вклады в собственно – энергетическую часть электрона. Фактически, хартриевские диаграммы учитывать не надо, они сокращаются с учетом вклада взаимодействия электронов с пространственно – однородным "фоном" положительных ионов, вводимым для обеспечения электронейтральности. В самом деле, рассматривая сумму простейших диаграмм такого типа, показанную на Рис. 2.9, имеем в очевидных обозначениях:

$$
\begin{aligned}
&2i\int\frac{dp'}{(2\pi)^4}V(0)G(p') - 2i\int\frac{dp'}{(2\pi)^4}V(0)G_i(p') = \\
&= 2i\int\frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3}\int\frac{d\varepsilon}{2\pi}V(0)G(\varepsilon\mathbf{p}') - 2i\int\frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3}\int\frac{d\varepsilon}{2\pi}V(0)G_i(\varepsilon\mathbf{p}') = \\
&= 2V(0)\left[\int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}n_{\mathbf{p}} - \int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}n^i_{\mathbf{p}}\right] = 2V(0)(n-n_i) = 0
\end{aligned}
\tag{2.56}
$$

так, что происходит их полная компенсация (плотность (заряда) электронов $n$ равна плотности (заряда) ионов "фона" $n^i$).

Таким образом, в RPA приближении дело сводится к расчету графика для собственно – энергетической части, показанного на Рис. 2.10, где "жирная" волнистая линия соответствует эффективному (экранированному) кулоновскому взаимодействию Рис.2.4(b):

$$\Sigma(p) = i\int \frac{d^4q}{(2\pi)^4}\mathcal{V}(q)G_0(p+q) \tag{2.57}$$

Хотя $G_0(p)$ и $\mathcal{V}(q)$ известны точно, соответствующие интегрирования весьма громоздки и мы их опускаем, приводя лишь окончательные ответы (J.J.Quinn, R.A.Ferrell, 1958) [5]. Оказывается, что энергия квазичастиц, отсчитанная от уровня Ферми $E_F$, в рассматриваемом приближении имеет вид:

$$\tilde{\varepsilon}_p = E_F\left\{\frac{p^2}{p_F^2} - 0.166r_s\left[\frac{p}{p_F}(\ln r_s + 0.203) + \ln r_s - 1.80\right]\right\} - E_F \tag{2.58}$$

Для затухания квазичастиц в этом приближении получается:

$$|\gamma_p| = E_F(0.252r_s^{1/2})\left(\frac{p}{p_F} - 1\right)^2 \tag{2.59}$$

так что оно мало при $p \to p_F$, в смысле выполнения неравенства $|\tilde{\varepsilon}_p| \gg |\gamma_p|$, что находится в полном соответствии с общими выводами феноменологической теории ферми – жидкости Ландау [2, 9, 10]. Это обстоятельство и позволяет говорить о “хорошо определенных” квазичастицах вблизи поверхности Ферми. Из (2.58) и (2.59) ясно, что в RPA приближении понятие квазичастицы имеет смысл только в области $|\tilde{\varepsilon}_p| < E_F/5$. Из (2.58) несложно получить и выражение для эффективной массы электрона:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{p_F}\frac{\partial\tilde{\varepsilon}_p}{\partial p}|_{p=p_F} = \frac{1}{m}[1 - 0.083r_s(\ln r_s + 0.203)] \tag{2.60}$$

Как известно, электронная теплоемкость пропорциональна $m^*$. Тогда из (2.60) следует результат, впервые полученный Гелл – Манном (1957) [5]:

$$\frac{c}{c_0} = 1 + 0.083r_s(\ln r_s + 0.203) \tag{2.61}$$

где $c_0$ – теплоемкость идеального ферми – газа.

В заключение напомним, что все выписанные результаты справедливы для сильно сжатой системы электронов, когда $r_s \ll 1$. В реальных металлах $1 < r_s < 5$, так что пользоваться RPA приближением надо с осторожностью!

## 2.6 Эффект Рудермана – Киттеля.

Вернемся к более детальному рассмотрению эффекта Рудермана – Киттеля [3]. Пусть имеется локализованный (в начале координат) спин $\mathbf{S}$, окруженный идеальным ферми – газом электронов, и взаимодействующий с их локальной спиновой плотностью посредством контактного (точечного) взаимодействия вида:

$$H_{int} = -J\int d\mathbf{r}S^i\delta(\mathbf{r})\psi^+(\mathbf{r})\hat{\sigma}^i\psi(\mathbf{r}) \tag{2.62}$$

Считая обменный интеграл $J$ малым, попытаемся найти поляризацию электронных спинов:

$$\sigma^i(\mathbf{r}) =< \psi^+(\mathbf{r})\hat{\sigma}^i\psi(\mathbf{r}) > \tag{2.63}$$

как функцию расстояния $|\mathbf{r}|$ от спина $\mathbf{S}$.

Проведем сначала рассмотрение при $T = 0$. Выпишем сначала функцию Грина свободного электрона в координатном представлении. В методических целях, и чтобы оценить точность часто используемых приближений, проделаем это двумя способами. Начнем с интегрирования по углам:

$$G(\varepsilon, \mathbf{r}) = \int_0^\infty \int_0^\pi \frac{dpp^2 \sin\theta d\theta}{2\pi^2} \frac{e^{ipr\cos\theta}}{\varepsilon - \xi(p) + i\delta sign\varepsilon} = \\ = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\infty \frac{dpp\sin pr}{\varepsilon - \xi(p) + i\delta sign\varepsilon} \tag{2.64}$$

Первый и простейший способ дальнейшего вычисления — перейти от интегрирования по $p$ к интегрированию по линеаризованному (вблизи поверхности Ферми) спектру $\xi$ и взять интеграл вычетами:

$$G(\varepsilon, r) \approx \frac{1}{2\pi^2 r} \int_{-\infty}^\infty \frac{d\xi}{v_F} p_F \frac{\sin(p_F + \xi/v_F)r}{\varepsilon - \xi + i\delta sign\varepsilon} = -\frac{m}{2\pi r} e^{ir(sign\varepsilon p_F + |\varepsilon|/v_F)} \tag{2.65}$$

Видим, что функция Грина осциллирует с периодом равным фермиевской длине волны $\lambda_F = \frac{2\pi\hbar}{p_F}$. Из-за эффектов фермиевской статистики фаза этих осцилляций меняет знак на уровне Ферми (при $\varepsilon = 0$).

Второй способ состоит в том, чтобы выполнить интегрирование по $p$ точно. Пользуясь четность подинтегрального выражения в (2.64), распространим интеграл по $p$ на всю вещественную ось и поделим пополам, так что:

$$G(\varepsilon, r) = \frac{1}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^\infty \frac{dpp\sin pr}{\varepsilon - \frac{p^2}{2m} + E_F + i\delta sign\varepsilon} \tag{2.66}$$

Разлагая здесь подинтегральное выражение на простейшие дроби, проводим интегрирование и получаем:

$$G(\varepsilon, r) = \frac{m}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^\infty dp \sin pr \left[\frac{1}{\kappa - p} - \frac{1}{\kappa + p}\right] = -\frac{m}{2\pi r} e^{isign\varepsilon\kappa r} \tag{2.67}$$

где $\kappa = \sqrt{2m(\varepsilon + E_F + i\delta sign\varepsilon)}$. Сравнивая с (2.65) видим, что упрощенный способ интегрирования по $\xi$ дает хорошую точность при $|\varepsilon| \ll E_F$, т.е. при рассмотрении непосредственной окрестности поверхности Ферми.

Перейдем теперь к расчету спиновой поляризации (2.63). Запишем это выражение через точную функцию Грина (учитывающую взаимодействие электронов с локализованным спином):

$$\hat{\sigma}^i(\mathbf{r}) = -i \lim_{t' \to t+0 \mathbf{r}=\mathbf{r}'} Sp\hat{\sigma}^i G(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') \tag{2.68}$$

Шпур здесь вычисляется по спиновым индексам $\hat{\sigma}^i$ и $G$. Функцию Грина $G$ возьмем в первом порядке по взаимодействию (2.62):

$$G^{(1)}_{\alpha\beta}(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\sigma^i_{\alpha\beta} G_0(\varepsilon\mathbf{r}) G_0(\varepsilon, -\mathbf{r}') J S^i \tag{2.69}$$

Тогда подставляя (2.69) в (2.68) и учитывая $Sp\sigma^i\sigma^j = 2\delta^{ij}$, получим:

$$\sigma^i(\mathbf{r}) = 2iJS^i \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^2(\varepsilon\mathbf{r}) \tag{2.70}$$

что фактически совпадает с выписанным выше выражением (2.42). Воспользуемся здесь выражением (2.65) и найдем (для $p_F r \gg 1$):

$$\int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0^2(\varepsilon r) = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{m}{2\pi r}\right)^2 \int_0^\infty d\varepsilon \left(e^{i2p_F r + \frac{2i\varepsilon}{v_F}r} + e^{-i2p_F r + \frac{2i\varepsilon}{v_F}r}\right) = \\ = i\frac{mp_F}{(2\pi)^3}\frac{\cos 2p_F r}{r^3} \tag{2.71}$$

так что для спиновой плотности получаем медленно затухающие осцилляции с периодом $\pi/p_F$:

$$\sigma^i(r) = -JS^i \frac{mp_F}{4\pi^3}\frac{\cos 2p_F r}{r^3} \tag{2.72}$$

Более аккуратное выражение для спиновой плотности в точке $r$ можно получить, используя точную $r$–зависимость функции Грина (2.67) и проинтегрировав ее квадрат в (2.70) по $\varepsilon$. Тогда получается:

$$\sigma^i(r) = -JS^i \frac{2mp_F^4}{\pi^3}\left(\frac{\cos 2p_F r}{(2p_F r)^3} - \frac{\sin 2p_F r}{(2p_F r)^4}\right) \tag{2.73}$$

В асимптотическом пределе $p_F r \gg 1$ выражение (2.73) все более приближается к (2.72), что согласуется с "идеологией" интегрирования по $\xi$. Отметим еще, что сингулярность точного выражения (2.73) при малых $r$ имеет характер $1/r$. Поэтому при взятии интеграла по $d^3r$ расходимости полной поляризации не возникает. Выражение (2.72) более сингулярно при $r \to 0$, однако в этой области оно неприменимо, поскольку интегрирование по $\xi$ гарантирует правильность ответа лишь на больших расстояниях.

Проведем теперь аналогичное рассмотрение для случая конечных температур. Снова вычислим свободную (мацубаровскую!) функцию Грина в координатном представлении, аналогично (2.65):

$$G(\varepsilon_n \mathbf{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\mathbf{pr}}}{i\varepsilon_n - \xi(p)} = \frac{\nu_F}{pr}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\sin\left(p_F + \frac{\xi}{v_F}\right)r}{i\varepsilon_n - \xi} = \\ = \frac{\nu_F}{2ipr}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{e^{i(p_F+\xi/v_F)r} - e^{-i(p_F+\xi/v_F)r}}{i\varepsilon_n - \xi} = -\frac{m}{2\pi r} e^{i(p_F + i\varepsilon_n/v_F)r sign\varepsilon_n} \tag{2.74}$$

Точно также, как и выше, выразим плотность спина через точную функцию Грина. Все выкладки отличаются лишь заменой $-i$ тут и там на $-1$. В итоге имеем:

$$\sigma^i(\mathbf{r}) = -2JS^i T \sum_{\varepsilon_n} G_0^2(\varepsilon_n, r) \tag{2.75}$$

что дает:

$$\sigma^i(r) = -2JS^i T\left(\frac{m}{2\pi r}\right)^2 \left\{\sum_{\varepsilon_n>0} e^{2ip_F r - 2\varepsilon_n r/v_F} + \sum_{\varepsilon_n<0} e^{-2ip_F r + 2\varepsilon_n r/v_F}\right\} \tag{2.76}$$

Суммы по частотам вычисляются элементарно и мы получаем:

$$\sigma^i(r) = -JS^i \frac{m^2 T}{2\pi^2 r^2}\frac{\cos 2p_F r}{sh\frac{2\pi T r}{v_F}} \tag{2.77}$$

При $T \to 0$ это выражение переходит в полученное ранее. Длина, на которой происходит затухание осцилляций, оказывается теперь равной $\frac{\hbar v_F}{2\pi T}$ (ср. аргумент гиперболического синуса!). Таким образом, при конечных температурах, осцилляции РККИ сохраняются на расстояниях, не превышающих "тепловую" длину $l_T = \frac{\hbar v_F}{T}$ и экспоненциально малы при $r > l_T$.

## 2.7 Линейный отклик.

Задача вычисления линейного отклика многочастичной системы на внешнее возмущение является одной из центральных в теории конденсированного состояния. Посмотрим, как эта задача решается в рамках формализма фейнмановских (мацубаровских) функций Грина.

Вернемся к рассмотрению диэлектрической проницаемости. Строго говоря, проницаемость, определенная в (2.8), *не является* функцией отклика! Она, в частности, не обладает правильными аналитическими свойствами, поскольку (см. (2.24)) у нее имеются особенности и в полуплоскости $Im\omega > 0$, чего не должно быть. Это же видно и из (2.18), где, в зависимости от знаков $\xi_+$ и $\xi_-$ полюс по $\omega$ может оказаться в верхней полуплоскости, в нижней, или на вещественной оси. Это автоматически приводит к нарушению принципа причинности (соотношений Крамерса – Кронига) [11]. Дело здесь в том, что при вычислении поляризационной петли (при $T = 0$) используются *причинные* (фейнмановские) функции Грина, соответственно $\Pi(-\omega) = \Pi(\omega)$, тогда как обобщенная *восприимчивость* (запаздывающая функция отклика) должна удовлетворять условию $\chi(-\omega) = \chi^*(\omega)$. Поэтому, задача вычисления правильных функций отклика требует специального обсуждения.

Стандартный метод работы с восприимчивостями использует температурную технику и последующее *аналитическое продолжение* с мнимых дискретных частот на действительные вещественные, что, как правило, и дает соответствующую запаздывающую функцию Грина (восприимчивость). Как это делается в достаточно общем виде мы еще увидим, но если рассматривается система невзаимодействующих частиц, то анализ существенно упрощается [3].

Восприимчивость величины $A$ по отношению к величине $B$ (где $A$ и $B$ – некоторые квантовые операторы) дается формулой Кубо [11, 12]:

$$\chi_{AB}(\omega) = i\int_0^\infty dt e^{i\omega t} < [\hat{A}(t), \hat{B}(0)] > \tag{2.78}$$

Стоящий здесь коммутатор (усредненный по основному состоянию или по Гиббсу) представляет собой вклад от соответствующей запаздывающей двухвременной функции Грина Боголюбова – Тябликова [11, 12][3]. Чтобы найти среднее по времени от этого коммутатора по основному состоянию ($T = 0$) системы *невзаимодействующих* частиц, запишем операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ в представлении вторичного квантования, используя известные (по предположению!) собственные функции $\psi_m$ и собственные значения (уровни) энергии $E_m$ нашей системы[4]:

$$\hat{A}(t) = \sum_{mk} A_{mk}\hat{a}^+_m\hat{a}_k e^{-i(E_k-E_m)t} \tag{2.79}$$

$$\hat{B}(t) = \sum_{mk} B_{mk}\hat{a}^+_m\hat{a}_k e^{-i(E_k-E_m)t} \tag{2.80}$$

где $A_{mk}$ и $B_{mk}$ – соответствующие матричные элементы наших операторов по функциям $\psi_m$ и $\psi_k$, а $\hat{a}^+_m$, $\hat{a}_k$ – фермиевские операторы рождения и уничтожения в соот-

---

[3] Входящая в определение этой функции $\theta(t)$ привела к возникновению в (2.78) интеграла по времени от $t = 0$ до $t = \infty$.

[4] Например для идеального ферми - газа — это просто плоские волны, для такого же газа во внешнем магнитном поле — это уровни Ландау, для электрона в случайном потенциальном поле — это всегда существующие (но неизвестные нам!) точные волновые функции и уровни энергии электрона для конкретной реализации этого случайного поля, и т.п.

ветствующих состояниях. Подставляя эти выражения в $< [\hat{A}(t), \hat{B}(0)] >$ и непосредственно вычисляя коммутатор, используя теорему Вика, получаем:

$$\chi_{AB}(\omega) = \sum_{mk} A_{mk} B_{km} \frac{n(E_m) - n(E_k)}{E_k - E_m - \omega - i\delta} \tag{2.81}$$

где $n(E_k) =< \hat{a}_k^+ \hat{a}_k >$ – соответствующая функция Ферми.

В случае, когда собственные функции неизвестны (например, когда речь идет об уровнях в конкретной реализации случайного потенциала), полезно выразить восприимчивость через электронные функции Грина. Напомним, в связи с этим, определения запаздывающей и опережающей функций Грина $G^R(\varepsilon)$ и $G^A(\varepsilon)$. Эти функции связаны с причинной (фейнмановской) функцией Грина следующим образом [1]:

$$G(t,t') = \begin{cases} G^R(t,t') & t > t' \\ G^A(t,t') & t < t' \end{cases} \tag{2.82}$$

После фурье – преобразования:

$$G^{R(A)}(\varepsilon \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - \xi(p) \pm i\delta} \tag{2.83}$$

так что в фейнмановской функции Грина возникают вклады от частиц и дырок:

$$\begin{aligned} G(\varepsilon \mathbf{p}) = (1 - n(p))G^R(\varepsilon \mathbf{p}) + n(p)G^A(\varepsilon \mathbf{p}) = \\ = \frac{1 - n(p)}{\varepsilon - \xi(p) + i\delta} + \frac{n(p)}{\varepsilon - \xi(p) - i\delta} \end{aligned} \tag{2.84}$$

где

$$n(p) = \begin{cases} 1 & p \leq p_F \\ 0 & p > p_F \end{cases} \tag{2.85}$$

– фермиевское распределение при $T = 0$.

Чтобы выразить восприимчивость через $G^R(\varepsilon)$ и $G^A(\varepsilon)$, представим энергетический знаменатель в (2.81) в виде интеграла по вспомогательной переменной:

$$\begin{aligned} \frac{1}{E_k - E_m - \omega - i\delta} = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{1}{(\varepsilon - \omega - E_m - i\delta)(\varepsilon - E_k + i\delta)} = \\ = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon G_m^A(\varepsilon - \omega) G_k^R(\varepsilon) \end{aligned} \tag{2.86}$$

Подставляя это выражение в (2.81), получаем общее операторное выражение для восприимчивости:

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\infty}^{\infty} d\varepsilon Sp([\hat{G}^R(\varepsilon)\hat{B}, \hat{G}^A(\varepsilon - \omega)\hat{A}]\hat{\rho}) \tag{2.87}$$

где $\hat{\rho}$ – матрица плотности (в диагональном представлении имеем $\rho_{mk} = n(E_m)\delta_{mk}$). Основное преимущество выражения (2.87) по сравнению с (2.81) в том, что оно верно в произвольном базисе и, поэтому, может быть использовано даже если точные одночастичные функции неизвестны.

Проведенное выше рассмотрение использовало технику $T = 0$. При $T > 0$ следует использовать мацубаровскую технику. Может показаться, что для рассмотрения динамики в реальном времени $t$ (что требуется для расчета (2.78)) мацубаровский формализм бесполезен, поскольку в нем мы имеем дело с *мнимым* временем $\tau$. Тем не менее, как мы сейчас увидим, с помощью мацубаровской техники рассчитать линейный отклик достаточно легко.

Введем так называемую мацубаровскую восприимчивость ($\omega_m = 2\pi mT$):

$$\chi_{AB}^{(M)}(\omega_m) = \frac{1}{2}\int_{-\beta}^{\beta} d\tau < T_\tau \hat{A}(\tau)\hat{B}(0) > e^{i\omega_m \tau} \tag{2.88}$$

Оказывается [1], что можно сформулировать следующее замечательное утверждение:

- Функция $\chi_{AB}^{(M)}(\omega_m)$, аналитически продолженная с дискретного множества точек на положительной мнимой полуоси $\omega = i\omega_n \quad (n > 0)$, на вещественную ось $Im\omega = 0$, дает в точности интересующую нас $\chi_{AB}(\omega)$.

Эта теорема позволяет находить восприимчивость $\chi_{AB}(\omega)$ с помощью $\chi_{AB}^{(M)}(\omega_m)$, которую можно вычислять с помощью мацубаровской диаграммной техники. В отсутствие взаимодействия, мацубаровская восприимчивость дается всего одной диаграммой — ***петлей*** (или "поляризационным" оператором) с операторами $\hat{A}$ и $\hat{B}$ в вершинах. В технике $T = 0$ восприимчивость и поляризационный оператор имеют разные аналитические свойства. Но согласно приведенной теореме, для получения восприимчивости достаточно вычислить "поляризационную" петлю с мацубаровскими функциями Грина, а затем правильно продолжить ее на вещественные частоты.

Докажем теперь наше основное утверждение. Мы должны рассчитать "кубовскую" восприимчивость:

$$\chi_{AB}(\omega) = i\int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} < [\hat{A}(t), \hat{B}(0)] > \tag{2.89}$$

где $< ... >= Sp(e^{-\beta H}...)/Sp(e^{-\beta H})$ – усреднение по Гиббсу, $\hat{A}(t) = e^{itH}\hat{A}e^{-itH}$ – оператор в гейзенберговском представлении. Нетрудно видеть, что (2.89) можно записать как:

$$\begin{aligned}\chi_{AB}(\omega) = \frac{i}{Z}\int_0^{\infty} dt e^{i\omega t}\sum_{mn} e^{-\beta E_n}\Big(e^{i\omega_{nm}t} < n|\hat{A}|m >< m|\hat{B}|n > -\\ -e^{-i\omega_{nm}t} < n|\hat{B}|m >< m|\hat{A}|n >\Big)\end{aligned} \tag{2.90}$$

где $\omega_{nm} = E_n - E_m$, $Z = Spe^{-\beta H}$, причем $n$ и $m$ здесь нумеруют точные уровни *многочастичной* системы (с учетом взаимодействия!). Переставляя во втором члене суммы индексы $m$ и $n$ и интегрируя по $t$, получаем:

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{mn}\frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\omega_{nm} - \omega - i\delta} < n|A|m >< m|B|n > \tag{2.91}$$

Мнимая часть $i\delta$ возникла здесь из-за множителя $e^{-\delta t}$, который надо добавить в формально расходящийся интеграл по $t$ для обеспечения его сходимости.

Теперь вычислим аналогичным образом мацубаровский отклик:

$$\chi_{AB}^{(M)}(\omega_m) = \frac{1}{2}\int_{-\beta}^{\beta} d\tau e^{i\omega_m \tau} < T_\tau \hat{A}(\tau)\hat{B}(0) > \tag{2.92}$$

где $\hat{A}(\tau) = e^{\tau H}\hat{A}e^{-\tau H}$. Имеем:

$$\chi_{AB}^{(M)}(\omega_m) = \frac{1}{2Z}\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m\tau}\sum_{mn} e^{-\beta E_n}e^{\omega_{nm}\tau} < n|A|m >< m|B|n > +$$
$$+\frac{1}{2Z}\int_{-\beta}^0 d\tau e^{i\omega_m\tau}\sum_{mn} e^{-\beta E_n}e^{-\omega_{nm}\tau} < n|B|m >< m|A|n > \quad (2.93)$$

Опять меняя местами индексы во второй сумме, с учетом $\omega_m\beta = 2\pi m$, и выполняя интегрирование по $\tau$, получаем:

$$\chi_{AB}^{(M)}(\omega_m) = \frac{1}{Z}\sum_{mn}\frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\omega_{mn} - i\omega_m} < n|A|m >< m|B|n > \quad (2.94)$$

Теперь все готово! Восприимчивость $\chi_{AB}(\omega)$ представляет собой аналитическую функцию $\omega$ в верхней полуплоскости частоты. Это есть следствие того, что она представляет собой преобразование Фурье от функции, отличной от нуля лишь при $t > 0$ [11]. Значит ее можно продолжить с вещественной оси на мнимую положительную полуось. При этом в точках $\omega_m = 2\pi mT$ она совпадет с $\chi_{AB}^{(M)}$, что очевидно из прямого сравнения (2.91) и (2.94). Предположим, что существует аналитическое продолжение $\chi_{AB}^{(M)}$ с верхней мнимой полуоси на всю верхнюю полуплоскость $\omega$. Тогда это аналитическое продолжение должно совпасть с $\chi_{AB}(\omega)$, поскольку, согласно известной теореме теории функций комплексного переменного, две функции, аналитические в некоторой области комплексной плоскости и совпадающие на бесконечном множестве дискретных точек (имеющем предельную точку, $m \to \infty$), совпадают во всей области.

Заметим, что и случай $T = 0$ иногда удобнее рассматривать в мацубаровской технике. При этом происходит переход от суммирования по мацубаровским к интегрированию по непрерывным (мнимым) частотам, поскольку при $T \to 0$ точки $i\omega_m$ сливаются в мнимую ось на плоскости комплексной переменной $\omega$, соответственно $T\sum_m ... \to \int\frac{d\omega}{2\pi}...$. При таком способе вычислений не возникает сложностей с обходом полюсов функций Грина, поскольку направление обхода оказывается правильным автоматически.

Посмотрим как все это "работает" на примере вычисления поляризационного оператора газа свободных электронов и, соответственно, диэлектрической проницаемости (функции отклика!) в RPA приближении. Имеем:

$$\Pi^{(M)}(\omega_m, \mathbf{q}) = 2T\sum_n\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}G(\varepsilon_n\mathbf{p})G(\varepsilon_n + \omega_m, \mathbf{p}+\mathbf{q}) \quad (2.95)$$

Сначала выполним суммирование по $\varepsilon_n$. Представим интересующую нас сумму в следующем виде:

$$T\sum_n\frac{1}{i\varepsilon_n + i\omega_m - \xi(\mathbf{p}+\mathbf{q})}\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p})} =$$
$$= T\sum_n\frac{1}{i\omega_m - \xi(\mathbf{p}+\mathbf{q}) + \xi(\mathbf{p})}\left(\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p})} - \frac{1}{i\varepsilon_n + i\omega_m - \xi(\mathbf{p}+\mathbf{q})}\right) \quad (2.96)$$

Во втором слагаемом можно теперь сделать сдвиг переменной суммирования $n \to n - m$, при котором из него исчезнет $\omega_m$. В каждом из слагаемых в скобках вещественная часть суммы сходится, а мнимая формально расходится. В тоже время эта мнимая часть нечетна по $n$, а потому сокращается при суммировании членов с противоположными $n$. Следовательно, нам достаточно вычислить сумму:

$$S(\xi) = T\sum_n \frac{\xi}{\varepsilon_n^2 + \xi^2} \tag{2.97}$$

Ее можно вычислить с помощью известного тождества[5]:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2\pi^2 + x^2} = \frac{1}{2x} th \frac{x}{2} \tag{2.99}$$

Тогда:

$$S(\xi) = \frac{1}{2} th \frac{\xi}{2T} = \frac{1}{2} - n(\xi) \tag{2.100}$$

где $n(\xi) = (e^{\frac{\xi}{T}} + 1)^{-1}$ – функция Ферми. В результате получаем тождество, которое очень удобно использовать при вычислении поляризационного оператора и других восприимчивостей в ферми – газе:

$$T\sum_n \frac{1}{(i\varepsilon_n + i\omega_m - \xi(\mathbf{p}+\mathbf{q}))(i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}))} = -\frac{n(\xi(\mathbf{p}+\mathbf{q})) - n(\xi(\mathbf{p}))}{i\omega_m - \xi(\mathbf{p}+\mathbf{q}) + \xi(\mathbf{p})} \tag{2.101}$$

Используя это тождество в (2.95), получаем:

$$\Pi^{(M)}(\omega_m \mathbf{q}) = -2\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{n(\xi(\mathbf{p}+\mathbf{q})) - n(\xi(\mathbf{p}))}{i\omega_m - \xi(\mathbf{p}+\mathbf{q}) + \xi(\mathbf{p})} \tag{2.102}$$

Рассмотрим теперь предел $T = 0$. В этом случае имеем $n(\xi) = \theta(-\xi)$. Перейдем обычным образом к интегрированию по $\xi$ и рассмотрим малые $q \ll p_F$. Тогда имеем:

$$\Pi^{(M)}(\omega_m \mathbf{q}) = -2\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{\partial n}{\partial \xi(p)} \frac{\mathbf{vq}}{i\omega_m - \mathbf{vq}} = 2\nu_F \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{\mathbf{v}_F\mathbf{q}}{i\omega_m - \mathbf{v}_F\mathbf{q}} \tag{2.103}$$

Вычисляя интеграл по углам также, как это было сделано в (2.22), получаем:

$$\Pi^{(M)}(\omega_m q) = -2\nu_F \left\{1 + \frac{i\omega_m}{2v_F q} \ln \frac{i\omega_m - v_F q}{i\omega_m + v_F q}\right\} \tag{2.104}$$

Для того, чтобы аналитически продолжить это выражение на вещественную ось частоты, достаточно сделать замену $i\omega_m \to \omega + i\delta$. В результате получим:

$$\Pi^R(\omega + i\delta q) = -2\nu_F \left\{1 + \frac{\omega}{2v_F q} \ln \frac{\omega - v_F q + i\delta}{\omega + v_F q + i\delta}\right\} \tag{2.105}$$

что и определяет диэлектрическую проницаемость электронного газа в RPA приближении (как функцию отклика на внешнее электрическое поле).

---

[5]Эту формулу можно получить, написав

$$\frac{1}{(2n+1)^2\pi^2 + x^2} = \frac{1}{2x}\left\{\frac{1}{x + i\pi(2n+1)} + \frac{1}{x - i\pi(2n+1)}\right\} =$$
$$= \frac{1}{2x}\int_0^\infty dz e^{-xz}[e^{-i\pi(2n+1)z} + e^{i\pi(2n+1)z}] \tag{2.98}$$

и просуммировав прогрессию под знаком интеграла.

Отделяя в (2.105) действительную и мнимую части (и меняя общий знак), получаем функцию отклика плотность – плотность в виде:

$$Re\chi(\omega q) = 2\nu_F \left\{ 1 + \frac{\omega}{2v_F q} \ln\left|\frac{\omega - v_F q}{\omega + v_F q}\right| \right\} \tag{2.106}$$

$$Im\chi(\omega q) = \pi\nu_F \frac{\omega}{v_F q}\theta(v_F q - |\omega|) \tag{2.107}$$

В отличие от аналогичного выражения (2.24) (возникшего из диаграмм фейнмановской техники при $T = 0$), здесь выполнены все требования аналитичности, налагаемые на функции отклика [11][6]. В частности, выполняется соотношение Крамерса – Кронига:

$$\chi(\omega) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{Im\chi(\omega')}{\omega' - \omega - i\delta} \tag{2.108}$$

Таким образом, диэлектрическая проницаемость системы, рассматриваемая как функция отклика, определяется как:

$$\epsilon(q\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2}\chi(q\omega) \tag{2.109}$$

где $\chi(q\omega)$ – запаздывающая функция отклика плотность – плотность [10], получающаяся (с точностью до знака) аналитическим продолжением мацубаровского поляризационного оператора.

Диэлектрическая проницаемость непосредственно определяет и проводимость системы [12]:

$$\sigma(q\omega) = \frac{i\omega}{4\pi}\left(1 - \epsilon(q\omega)\right) = -\frac{ie^2}{q^2}\omega\chi(q\omega) \tag{2.110}$$

В самом деле, плотность тока, возникающего в системе под действием электрического поля $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$ ($\varphi$ – скалярный потенциал) равна:

$$\mathbf{j}(\mathbf{q}\omega) = \sigma(\mathbf{q}\omega)\mathbf{E}(\mathbf{q}\omega) = -i\sigma(\mathbf{q}\omega)\mathbf{q}\varphi(\mathbf{q}\omega) \tag{2.111}$$

Закон сохранения заряда имеет вид:

$$e\frac{\partial}{\partial t}n(\mathbf{r}t) + \nabla\mathbf{j}(\mathbf{r}t) = 0 \tag{2.112}$$

или в фурье – компонентах:

$$-i\omega e\delta n(\mathbf{q}\omega) + i\mathbf{q}\mathbf{j}(\mathbf{q}\omega) = 0 \tag{2.113}$$

где $\delta n$ – отклонение плотности от пространственно однородного равновесного значения $n$. Это отклонение определяется в теории линейного отклика как [10]:

$$\delta n(\mathbf{q}\omega) = e\chi(\mathbf{q}\omega)\varphi(\mathbf{q}\omega) \tag{2.114}$$

Комбинируя (2.111) – (2.114), немедленно получаем (2.110).

В эксперименте обычно имеем дело с пределом $q \to 0$ (однородное внешнее поле). Тогда проводимость определяется как:

$$\sigma(\omega) = -\lim_{q\to 0}\frac{ie^2}{q^2}\omega\chi(q\omega) \tag{2.115}$$

В рассмотренном выше простейшем случае, когда вычислялся поляризационный оператор газа свободных электронов, для вычисления предела $q \to 0$ при конечных $\omega$ используем (2.27) и получаем ($\omega \to \omega + i\delta, \quad \delta \to +0$):

$$\sigma(\omega) = \lim_{q\to 0}\frac{ie^2}{q^2}\omega\frac{2\nu_F}{3}\frac{v_F^2 q^2}{\omega^2} = \frac{p_F^3}{3\pi^2 m}i\frac{e^2}{\omega} = \frac{ne^2}{m}\frac{i}{\omega + i\delta} \tag{2.116}$$

[6] Именно (2.107) показана на Рис. 2.7 (b).

т.е. обычную формулу Друде для проводимости бесстокновительного газа свободных электронов (идеальный проводник!). В частности:

$$Re\sigma(\omega) = \frac{\omega}{4\pi} Im\epsilon(\omega) = \frac{ne^2}{m}\pi\delta(\omega) \tag{2.117}$$

где учли $\frac{1}{\omega+i\delta} = \frac{1}{\omega} - i\pi\delta(\omega)$. Феноменологический учет столкновений сводится к введению конечной частоты рассеяния $\delta \to \gamma = \frac{1}{\tau}$ (где $\tau$ – время свободного пробега).

## 2.8 Микроскопические основы теории ферми – жидкости.

В реальных металлах с $r_s \sim 2-3$, взаимодействие электронов не является слабым, так что нельзя ограничиться суммированием какой – либо специальной последовательности диаграмм (типа RPA, справедливого в пределе $r_s \ll 1$). В тоже время, феноменологическая теория ферми – жидкости Ландау – Силина [10] является вполне успешной при описании свойств ферми – систем с сильным взаимодействием. Рассмотрим вопрос о микроскопическом обосновании этой теории [2, 8, 9].

Ландау фактически постулировал, что основное состояние ферми – жидкости качественно не отличается от основного состояния ферми – газа, а слабо возбужденные состояния могут быть описаны как *квазичастицы*, аналогичные частицам и дыркам в ферми – газе, несмотря на сильное взаимодействие в системе реальных фермионов (электронов в металле, атомов $He^3$, нуклонов в ядре и т.п.). Важнейшим, при этом, является предположение о существовании хорошо определенной поверхности Ферми с радиусом $p_F$, удовлетворяющим "газовому" соотношению:

$$n = \frac{N}{V} = \frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3} \tag{2.118}$$

связывающему его с полной плотностью частиц в системе. Это утверждение, фактически, может быть *доказано* в каждом порядке теории возмущений по взаимодействию с использованием общих свойств функций Грина и известно как *теорема Латтинжера* (J.M.Luttinger, 1960) [1, 2]. Соответствующее доказательство достаточно громоздко и мы его не приводим[7]. Надо четко понимать, что основное состояние *нормальной* ферми – жидкости не является единственным возможным состоянием системы взаимодействующих электронов (фермионов). Например, мы знаем, что система может находиться в сверхпроводящем (сверхтекучем) состоянии, когда теорема Латтинжера не выполняется и поверхности Ферми *нет* (она "закрыта" энергетической щелью!). В настоящее время, когда особое внимание уделяется рассмотрению систем с *сильными корреляциями*, активно обсуждаются различные "сценарии" формирования нефермижидкостного поведения таких систем. Здесь, однако, мы сконцентрируемся на рассмотрении микроскопических основ теории нормальной ферми – жидкости [8, 9].

Основной физической причиной того, что в системе взаимодействующих фермионов сохраняются черты поведения, типичного для газа свободных фермионов, является принцип Паули. Именно он, как мы сейчас увидим, позволяет ввести хорошо определенные квазичастичные возбуждения вблизи уровня (поверхности) Ферми. В

[7]В Приложении А приводятся топологические соображения достаточно общего характера, подтверждающие устойчивость поверхности Ферми к адиабатическому "включению" взаимодействия между частицами (Г.Е.Воловик, 1999).

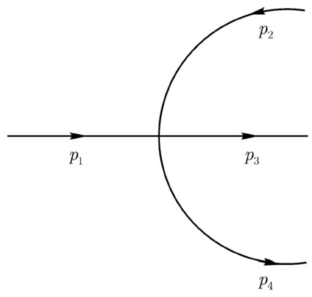



Рис. 2.11: Процесс рождения трех квазичастиц.

бесконечной однородной системе функция Грина $G_{\alpha\beta}(p)$ диагональна по спинорным индексам и одинакова для обоих значений проекции спина (в отсутствие магнитного поля или спонтанной намагниченности), поэтому далее эти индексы опускаются. Введем, как обычно собственно – энергетическую часть и запишем уравнение Дайсона:

$$G^{-1}(\varepsilon\mathbf{p}) = \varepsilon - \frac{p^2}{2m} + \mu - \Sigma(\varepsilon\mathbf{p}) \tag{2.119}$$

Посмотрим что тут можно сказать из “общих соображений”. Оценим вклад в мнимую часть $\Sigma$ от процессов рождения трех квазичастиц — простейший процесс такого типа (приводящий к конечному времени жизни квазичастицы) сводится (см. Рис. 2.11) к возбуждению другого электрона из под поверхности Ферми, т.е. к рождению электрон – дырочной пары. Имеем обычные законы сохранения:

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4 \qquad \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon_3 + \varepsilon_4 \tag{2.120}$$

причем в данном случае:

$$\begin{gathered} |\mathbf{p}_1|, |\mathbf{p}_3|, |\mathbf{p}_4| \geq p_F, \quad \text{а} \quad |\mathbf{p}_2| \leq p_F \\ \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_4 \geq 0, \quad \text{а} \quad \varepsilon_2 \leq 0 \end{gathered} \tag{2.121}$$

Отсюда ясно, что при $|\mathbf{p}_1| \to p_F$, для всех остальных частиц также $|\mathbf{p}_2|, |\mathbf{p}_3|, |\mathbf{p}_4| \to p_F$, а из $\varepsilon_1 \to +0$ вытекает, что и $\varepsilon_\alpha(\alpha = 2, 3, 4) \to 0$. Когда $\mathbf{p}_1$ несколько “выше” $p_F$, все остальные $(|\mathbf{p}_\alpha| - p_F)$ одного порядка с $(|\mathbf{p}_1| - p_F)$. Соответственно, вероятность процесса, описываемого рассматриваемой диаграммой, пропорциональна:

$$W = \frac{1}{\tau} \sim \int \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_4) d\mathbf{p}_2 d\mathbf{p}_3 \tag{2.122}$$

В самом деле, импульс $\mathbf{p}_1$ задан, а $\mathbf{p}_4 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3$, так что остается только два независимых импульса интегрирования, как и показано в (2.122). Поскольку $\mathbf{p}_2$ и $\mathbf{p}_3$ близки к $p_F$, имеем $(|\mathbf{p}_{2,3}| - p_F) \sim (|\mathbf{p}_1| - p_F)$. Допустимые области изменения модулей $\mathbf{p}_2$ и $\mathbf{p}_3$ есть: $p_F < p_3 < p_1 + p_2 - p_F$ и $2p_F - p_1 < p_2 < p_F$. Угол между $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_3$ может быть любым, а угол между $\mathbf{p}_3$ и $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ определяется из условия сохранения энергии и интеграл по этому углу снимает $\delta$ – функцию в (2.122). Соответственно интеграл по $dp_2 dp_3$ берется при $p_2 \approx p_3 \approx p_F$ и дает для (2.122) оценку $\sim (|\mathbf{p}_1| - p_F)^2$. Поэтому обратное время жизни электрона с импульсом $p$ оценивается как:

$$\frac{1}{\tau} \sim Im\Sigma \sim (p - p_F)^2 \sim \varepsilon^2 \tag{2.123}$$

Нетрудно убедиться, что статистический вес состояний с большим числом квазичастиц начинается с более высоких степеней $\varepsilon$. Например $Im\Sigma_5 \sim |\varepsilon^3|\varepsilon$ [8]. При конечных температурах, размытие фермиевского распределения $\sim T$, что приводит к вкладу в затухание от термически возбужденных квазичастиц $\sim \frac{T^2}{E_F}$. Соответственно, объединяя их с (2.123), имеем:

$$\frac{1}{\tau} = A\left(\frac{\varepsilon^2}{E_F} + \frac{T^2}{E_F}\right) \approx Max\left(\frac{\varepsilon^2}{E_F}, \frac{T^2}{E_F}\right) \tag{2.124}$$

где $A \sim const$. Если воспользоваться обычной формулой Друде для проводимости:

$$\sigma = \frac{ne^2}{m}\tau \tag{2.125}$$

и взять $\tau^{-1} = A\frac{T^2}{E_F}$, то (используя также (2.118)) получим оценку сопротивления в виде:

$$R = \frac{1}{\sigma} \sim \frac{T^2 m}{E_F p_F^3 e^2} = \frac{1}{e^2 p_F}\left(\frac{T}{E_F}\right)^2 \tag{2.126}$$

Таким образом, характерная температурная зависимость сопротивления, вызванного электрон – электронным рассеянием $R \sim T^2$ (Л.Д.Ландау, И.Я.Померанчук, 1937). Типичная оценка $p_F \sim \frac{\hbar}{a}$ (где $a$ – межатомное расстояние) дает $R \sim \frac{\hbar a}{e^2}\left(\frac{T}{E_F}\right)^2 \sim 10^{-3}$Ом см $\left(\frac{T}{E_F}\right)^2$, что дает пренебрежимо малый вклад в сопротивление при типичных значениях $T$, который полностью маскируется другими механизмами рассеяния (например на фононах). Реальное наблюдение $\sim T^2$ вклада в сопротивлении металлов возможно только в "ультрачистых" образцах при $T < 1K$, когда можно пренебречь рассеянием на фононах. Это простое обстоятельство часто забывается в современной литературе.

Таким образом, вблизи полюса $\varepsilon = \varepsilon(p)$ функции Грина (2.119) мы всегда имеем $Re\varepsilon(p) \approx v_F(p - p_F) \gg Im\varepsilon(p) \sim \tau^{-1} \sim (p - p_F)^2$, что и означает существование "хорошо определенных" квазичастиц вблизи уровня Ферми. Более аккуратно (нежели, например, это делалось в (2.45) – (2.49)) нужно действовать следующим образом. В однородной и изотропной системе (ферми – жидкости) величина $Re\Sigma(\varepsilon\mathbf{p})$ зависит только от модуля $p = |\mathbf{p}|$. Определим импульс Ферми $p_F$ в системе с взаимодействием с помощью следующего уравнения:

$$\frac{p_F^2}{2m} + \Sigma(p_F, 0) = \mu \tag{2.127}$$

Разлагая $\Sigma(p\varepsilon)$ в ряд по степеням $p - p_F$ и $\varepsilon$, получаем выражение для $G(p\varepsilon)$, справедливое вблизи поверхности Ферми ($\varepsilon \to 0,\ p \to p_F$) в следующем виде:

$$\begin{aligned} G^{-1}(\varepsilon p) &\approx \varepsilon - \frac{p^2}{2m} + \mu - \Sigma(p_F, 0) - \left(\frac{\partial\Sigma}{\partial p}\right)_F (p - p_F) - \left(\frac{\partial\Sigma}{\partial\varepsilon}\right)_F \varepsilon + i\alpha'|\varepsilon|\varepsilon = \\ &= \left[1 - \left(\frac{\partial\Sigma}{\partial\varepsilon}\right)_F\right]\varepsilon - \left[\frac{p_F}{m} + \left(\frac{\partial\Sigma}{\partial p}\right)_F\right](p - p_F) + i\alpha'|\varepsilon|\varepsilon \end{aligned} \tag{2.128}$$

где учли (2.123) и обеспечили правильную смену знака мнимой части (фейнмановской) функции Грина при $\varepsilon = 0$. Таким образом убеждаемся, что функцию Грина взаимодействующей системы фермионов вблизи поверхности Ферми можно записать как [8]:

$$G(\varepsilon p) = \frac{Z}{\varepsilon - v_F(p - p_F) + i\alpha|\varepsilon|\varepsilon} + G^{reg}(\varepsilon p) \tag{2.129}$$

где $G^{reg}(\varepsilon p)$ – регулярная часть, не имеющая полюсов вблизи поверхности Ферми (и связанная с многочастичными возбуждениями в системе [8]). При этом в (2.129) мы ввели следующие обозначения:

$$\frac{1}{Z} = 1 - \left(\frac{\partial\Sigma}{\partial\varepsilon}\right)_F = \left(\frac{\partial G^{-1}}{\partial\varepsilon}\right)_F \tag{2.130}$$

для вычета в полюсе функции Грина, и

$$v_F = \frac{\frac{p_F}{m} + \left(\frac{\partial\Sigma}{\partial p}\right)_F}{\left(\frac{\partial G^{-1}}{\partial\varepsilon}\right)_F} = -\frac{\left(\frac{\partial G^{-1}}{\partial p}\right)_F}{\left(\frac{\partial G^{-1}}{\partial\varepsilon}\right)_F}; \qquad \alpha = Z\alpha' \tag{2.131}$$

для скорости на поверхности Ферми. Выражение (2.129) определяет общий вид одночастичной функции Грина в системе взаимодействующих ферми – частиц (ферми – жидкости). Легко видеть, что обсуждавшиеся выше частные выражения, следующие из RPA, имеют именно такой вид (поведение).

Теперь нетрудно убедиться, что из (2.129) непосредственно следует существование (при $T = 0$) *скачка* в распределении *частиц* по импульсам даже в системе взаимодействующих фермионов (А.Б.Мигдал, 1957). В самом деле, вычислим разность значений функции распределения $n(p)$ по обе стороны от поверхности Ферми, т.е. предел разности $n(p_F + q) - n(p_F - q)$ при $q \to +0$. Распределение частиц по импульсам, как известно, выражается через функцию Грина следующим интегралом [1]:

$$n(p) = -i \lim_{t\to -0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-i\varepsilon t} G(\varepsilon p) \tag{2.132}$$

Воспользуемся здесь (2.129). Ввиду регулярности функции $G^{reg}(\varepsilon p)$ заранее ясно, что разность интегралов от нее будет стремиться при $q \to 0$ к нулю. Поэтому достаточно рассмотреть разность интегралов только от полюсного вклада в (2.129). Тогда имеем:

$$n(p_F - q) - n(p_F + q) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \left\{ \frac{Z}{\varepsilon + v_F q - i\delta} - \frac{Z}{\varepsilon - v_F q + i\delta} \right\} \tag{2.133}$$

где учли, что вблизи полюса $sign\varepsilon = sign(p - p_F)$, а также то, что ввиду сходимости этого интеграла от разности, множитель $e^{-i\varepsilon t}$ (при $t \to 0$) можно опустить. Замыкая теперь контур интегрирования бесконечно удаленной полуокружностью (все равно в верхней или нижней полуплоскости), находим:

$$n(p_F - 0) - n(p_F + 0) = Z \tag{2.134}$$

Поскольку $n(p) \leq 1$, отсюда следует что:

$$0 < Z \leq 1 \tag{2.135}$$

причем $Z = 1$ достигается лишь в пределе идеального ферми – газа. Таким образом распределение частиц по импульсам в ферми – жидкости при $T = 0$ имеет, как и в газе, скачок на поверхности Ферми, как это качественно показано на Рис. 2.12. В отличие от случая газа, величина скачка меньше единицы, а сама функция распределения $n(p)$ остается конечной и в области $p > p_F$ (частицы “выталкиваются” в эту область взаимодействием!). Фактически, существование скачка функции распределения и позволяет ввести само понятие поверхности Ферми в системе взаимодействующих фермионов.

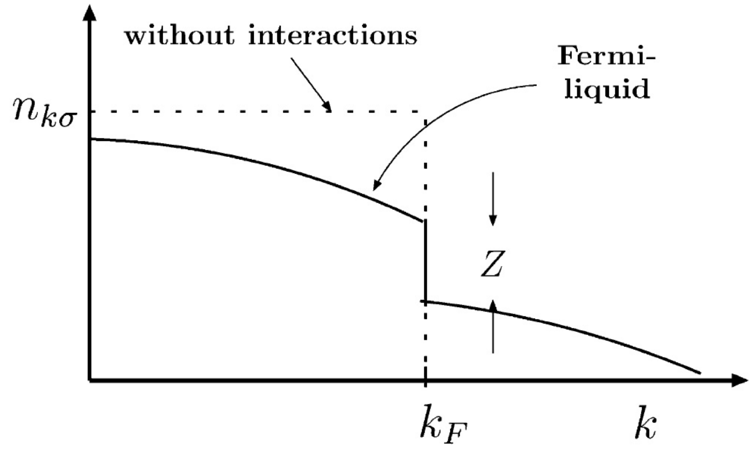



Рис. 2.12: Качественный вид функции распределения частиц в ферми – жидкости при $T = 0$.

Спектральная плотность $A(\mathbf{p}\varepsilon) = -sign\varepsilon\frac{1}{\pi}ImG(\varepsilon p)$, соответствующая функции Грина (2.129) имеет вид размытого затуханием квазичастичного пика при $\varepsilon = \varepsilon_p$ (энергии квазичастицы), на сравнительно плавном фоне от многочастичных возбуждений, как это показано на Рис. 2.13 (b), тогда как в идеальном газе она сводится к соответствующей $\delta$ – функции, показанной на Рис. 2.13 (a). Заметим, что спектральная плотность электронов в реальных системах взаимодействующих электронов, фактически, может быть измерена в экспериментах по фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES)[8], в которых также удается изучить и реальный вид поверхностей Ферми, в том числе для весьма сложных соединений[9]. Проведенные в последние годы измерения подтвердили качественные предсказания теории ферми – жидкости для большинства "металлических" систем. Наблюдаемые отклонения от фермижидкостного поведения обычно связывают с проявлениями эффектов *сильных корреляций* [13].

## 2.9 Взаимодействие квазичастиц в ферми – жидкости.

Взаимодействие квазичастиц, фактически, описывается *двухчастичной* функцией Грина [8]:

$$K =< T\psi(1)\psi(2)\psi^+(3)\psi^+(4) > \tag{2.136}$$

которая определяется суммой всех графиков, переводящих две частицы из точек $(1, 2)$ в точки $(3, 4)$. Тут, прежде всего, можно выделить графики без взаимодействия между обеими частицами, но со всеми возможными взаимодействиями каждой из частиц с "фоном", типа показанных на Рис. 2.14. Очевидно, что здесь возникает

[8] J.C.Campuzano, M.R.Norman, M.Randeria. Photoemission in the High $T_c$ Superconductors. ArXiv: cond-mat/0209476.

[9] A.Damascelli, D.H.Lu, Z.-X.Shen. From Mott insulator to overdoped superconductor: Evolution of the electronic structure of cuprates studied by ARPES. Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003)

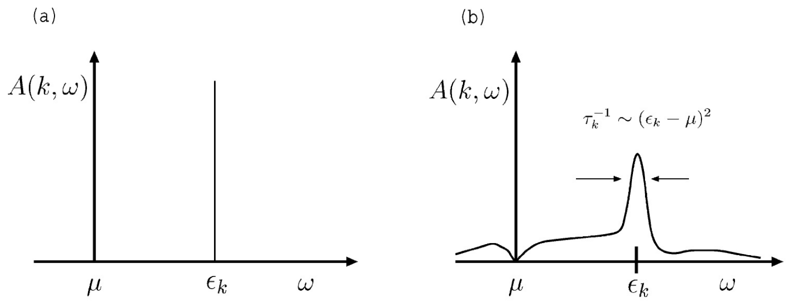



Рис. 2.13: Спектральная плотность в ферми – газе (a) и ферми – жидкости (b).

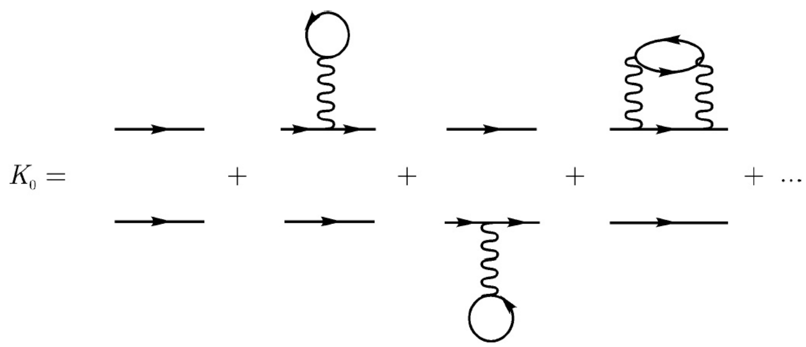



Рис. 2.14: Независимое распространение двух частиц в ферми – жидкости.

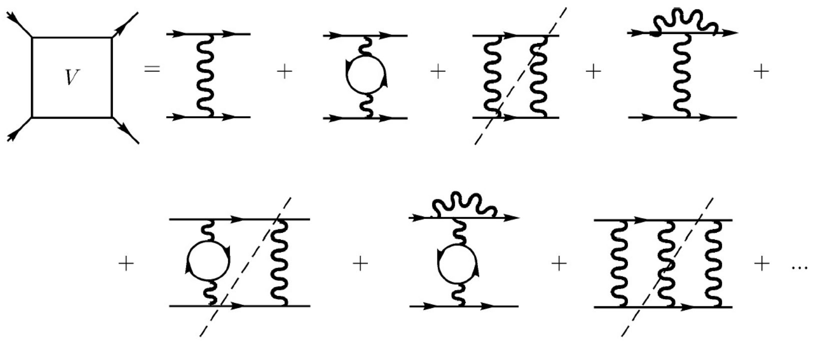



Рис. 2.15: Графическое определение блока $V$. Зачеркнуты графики, разрезаемые по двум линиям частиц.

две независимых совокупности графиков, каждая из которых сводится к полной одночастичной функции Грина $G$. Соответственно имеем:

$$K_0 = G(1,3)G(2,4) - G(1,4)G(2,3) \tag{2.137}$$

Знак минус перед вторым (обменным) членом связан здесь со свойством антисимметрии фермионов при перестановках.

Все остальные графики для $K$ содержат акты взаимодействия частиц друг с другом. Обозначим через $V$ совокупность таких графиков взаимодействия, которые не могут быть разделены на части, соединенные двумя электронными линиями, как это показано на Рис. 2.15. Тогда для двухчастичной функции Грина $K$ можно написать уравнение:

$$K = K_0 - GGVK \tag{2.138}$$

поскольку сумма всех графиков, следующих после $V$, снова образует $K$. Разумеется, уравнение (2.138), на самом деле, интегральное, а операторное умножение функций Грина обозначает здесь (и далее в аналогичных случаях) соответствующие интегрирования.

Для описания самого процесса взаимодействия частиц удобно ввести вершинную часть (амплитуду рассеяния) $\Gamma$ с помощью следующего соотношения:

$$K - K_0 = -GG\Gamma GG \tag{2.139}$$

Величина $\Gamma$ представляет собой сумму всех графиков, начинающихся и кончающихся взаимодействием между частицами, т.е. в нее не включаются входящие и выходящие линии частиц (обрублены “внешние” концы). Подставляя (2.139) в (2.138), получаем:

$$K - K_0 = -GG\Gamma GG = -GGVK = -GGVK_0 + GGVGG\Gamma GG \tag{2.140}$$

Используем очевидное соотношение:

$$GGVK_0 = GG(V - \tilde{V})GG \tag{2.141}$$

где $\tilde{V}$ обозначает $V$ с переставленными выходящими концами. Тогда из (2.140), после умножения справа и слева на $(GG)^{-1}$, получаем:

$$\Gamma = V - \tilde{V} - VGG\Gamma \tag{2.142}$$

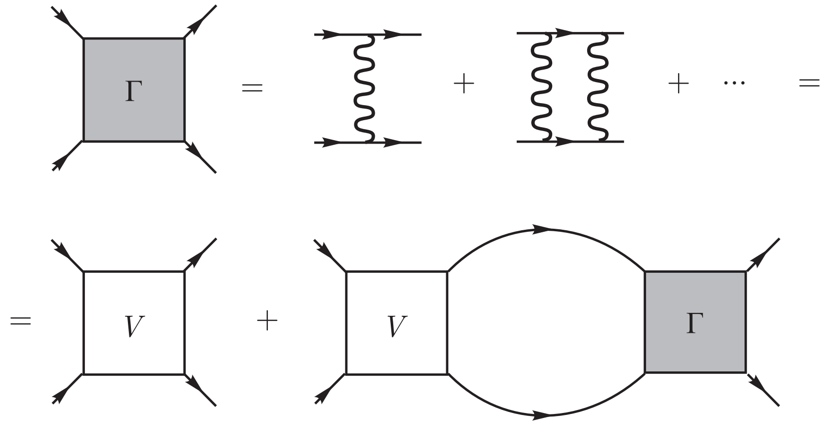



Рис. 2.16: Графический вид уравнения для вершины Γ с выделением канала частица – частица.

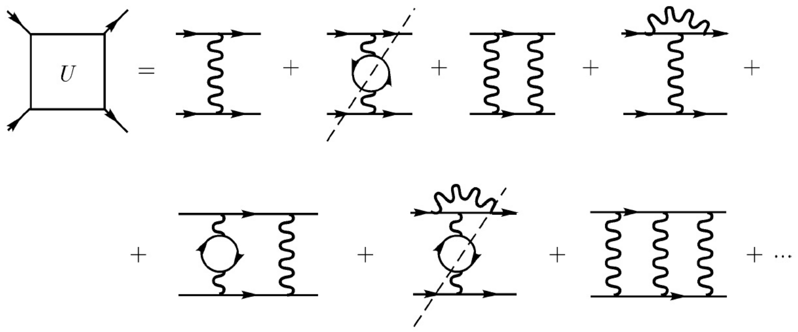



Рис. 2.17: Графическое определение блока $U$. Зачеркнуты графики, разрезаемые по линиям частицы и дырки.

Из определения Γ и $K$ следует, что

$$\Gamma(1,2;3,4) = -\Gamma(2,1;3,4) = -\Gamma(1,2;4,3) \qquad \Gamma(1,2;3,4) = \Gamma(3,4;1,2) \tag{2.143}$$

что отражает антисимметрию волновых функций в системе фермионов.

Уравнение (2.142) для Γ можно получить и непосредственно, не используя уравнение для $K$. Выделяя блок $V$, нетрудно получить графическое уравнение, показанное на Рис. 2.16, симметризация которого дает (2.142).

Для обоснования феноменологической теории ферми – жидкости удобно записать уравнение для Γ в другом виде. Выше мы выделяли блок $V$, который нельзя было разрезать по двум линиям в канале частица – частица (т.е. блок, неприводимый в данном канале). Можно поступить иначе и выделить из всей совокупности графиков для Γ блок $U$, неприводимый в канале частица – дырка, который нельзя разбить на части, соединенные линиями частицы и дырки. Соответствующие графики показаны на Рис. 2.17. Тогда для Γ можно написать графическое уравнение, показанное на Рис. 2.18, или в аналитическом виде:

$$\Gamma = U + UGG\Gamma \tag{2.144}$$

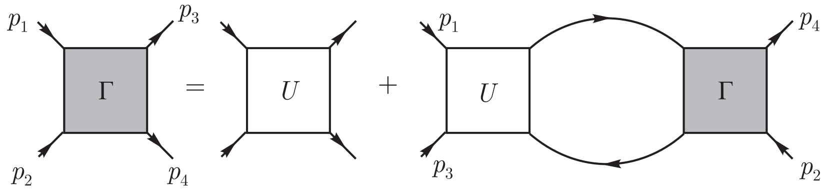



Рис. 2.18: Графический вид уравнения для вершины $\Gamma$ с выделением канала частица – дырка.

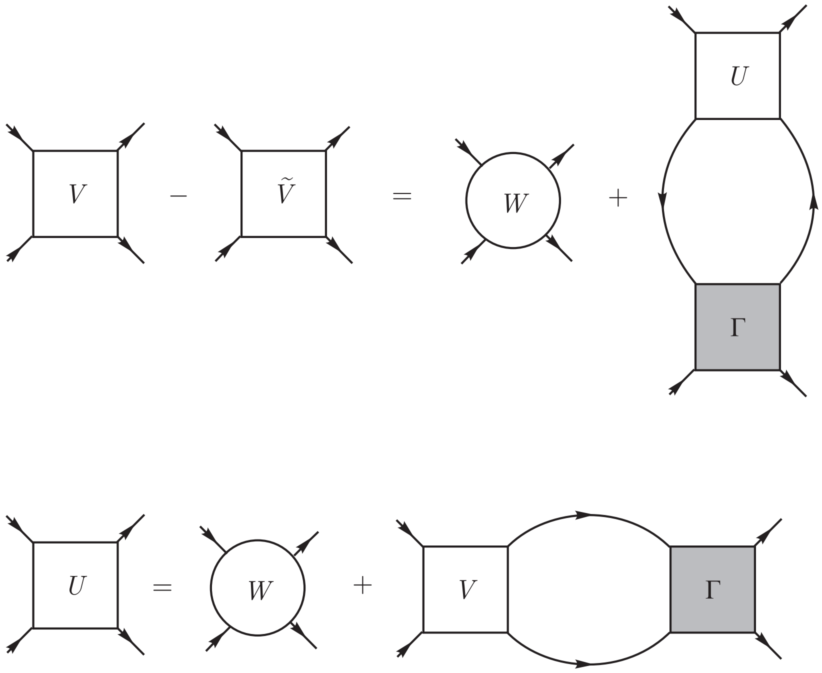



Рис. 2.19: Уравнения для вершин в "паркете".

В импульсном представлении разность 4-импульсов, входящих здесь в функции Грина $G$ (и удовлетворяющих закону сохранения $p_1+p_2 = p_3+p_4$), равна передаваемому импульсу $q = p_1 - p_3 = p_4 - p_2$, который равен суммарному импульсу в канале частица – дырка и одинаков в каждом сечении этого канала. В уравнении, показанном на Рис. 2.16, сумма импульсов, входящих в $\Gamma$, равна полному импульсу системы из двух частиц $q' = p_1 + p_2 = p_3 + p_4$ и одинакова в каждом сечении канала двух частиц. Выделение тех или иных блоков, типа проведенного выше, оказывается удобным, когда выделенный блок оказывается слабо зависящим от своих переменных (импульсов), тогда он может быть заменен эффективной константой.

**Отступление о "паркете".**

В некоторых случаях удобно ввести блок $W$, неразрезаемый по двум линиям как в канале двух частиц, так и в канале частица – дырка. Тогда наряду с уравнениями (2.16) и (2.18) нужно еще написать уравнения, связывающие блоки $U$ и $V$ с блоком $W$, как это показано на Рис. 2.19. Совместно с уравнениями Рис. 2.16 и Рис. 2.18, уравнения Рис. 2.19 образуют систему так называемых "паркетных" уравнений. Здесь под $W$ понимается симметризованное выражение, т.е. для ферми – частиц разность $W_{\alpha\beta\gamma\delta}(p_1, p_2; p_3, p_4) - W_{\alpha,\beta,\delta,\gamma}(p_1, p_2; p_4, p_3)$. В аналитическом виде:

$$V - \tilde{V} = W + UGG\Gamma \tag{2.145}$$

$$U = W - VGG\Gamma \tag{2.146}$$

Используя уравнение для $\Gamma$ в форме Рис. 2.18, получаем из (2.145):

$$U + V - \tilde{V} = W + \Gamma \tag{2.147}$$

Это же получится из (2.146), если для $\Gamma$ использовать уравнение Рис. 2.16. Эти уравнения позволяют выразить $\Gamma$ через неприводимую вершину $W$. В результате возникает следующее нелинейное (интегральное) уравнение:

$$\Gamma = W + \frac{1}{2}WGG\Gamma - \frac{1}{2}\Gamma GG(\Gamma + W)GG\Gamma \tag{2.148}$$

Блок $W$ в импульсном представлении обычно слабо зависит от входящих и выходящих импульсов, тогда как согласно (2.146), блок $U$ при малом суммарном импульсе зависит от него существенно. Аналогично, блок $V$, согласно (2.145), существенно зависит от передаваемого импульса $q \to 0$.

Блок $U$ целесообразно вводить для изучения свойств $\Gamma$ при малых передаваемых импульсах, тогда как выделение блока $V$ (и использование уравнения Рис. 2.16) удобно, когда мал суммарный импульс частиц (см. ниже анализ куперовской неустойчивости!).

В теории нормальной ферми – жидкости Ландау уравнение Рис. 2.18 играет выделенную роль. Исходно, это уравнение содержит (во втором члене в правой части) интегрирование по областям как близким, так и далеким от поверхности Ферми. Ландау показал, что при малых передаваемых импульсах можно из этого уравнения получить другое ("перенормированное") уравнение для $\Gamma$ с импульсами вблизи поверхности Ферми и не содержащее интегрирований по областям, далеким от уровня Ферми (т.е. получить замкнутое уравнение для $\Gamma$ на поверхности Ферми.).

Запишем уравнение Рис. 2.18 в явном виде в импульсном представлении:

$$\Gamma(p,p',q) = U(p,p',q) - i\sum\int\frac{d^4p''}{(2\pi)^4}U(p,p'',q)G\left(p''+\frac{q}{2}\right)G\left(p''-\frac{q}{2}\right)\Gamma(p'',p',q) \tag{2.149}$$

где $\sum$ обозначает суммирование по спиновым индексам внутренних линий, а соответствующие индексы мы, для краткости, не выписываем. Здесь также введены обозначения:

$$\begin{aligned}\Gamma(p_1,p_2,p_3,p_4) &= \Gamma(p,p',q)(2\pi)^4\delta(p_1+p_2+p_3+p_4)\\ U(p_1,p_2,p_3,p_4) &= U(p,p',q)(2\pi)^4\delta(p_1+p_2+p_3+p_4)\end{aligned} \tag{2.150}$$

причем входящие $(p_1, p_2)$ и выходящие $(p_3, p_4)$ 4-импульсы связаны с $p$ и $p'$ как:

$$\begin{aligned}p_1 &= p + \frac{q}{2} \qquad p_2 = p' - \frac{q}{2}\\ p_3 &= p - \frac{q}{2} \qquad p_4 = p' + \frac{q}{2}\end{aligned} \tag{2.151}$$

чтобы передаваемый импульс равнялся $q = (\mathbf{q}, \omega)$ и выполнялся закон сохранения $p_1 + p_2 = p_3 + p_4$. В первом порядке теории возмущений по взаимодействию имеем:

$$U(p,p',q) = \int d(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \tag{2.152}$$

где $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ — потенциал межчастичного взаимодействия.

Выше в (2.129) мы выписали общий вид одночастичной функции Грина в теории ферми – жидкости:

$$G(p) = \frac{Z}{\varepsilon - \varepsilon(p) + i\gamma(\varepsilon)} + G^{reg}(p) \tag{2.153}$$

где $\varepsilon(p) = v_F(p - p_F)$,

$$Z^{-1} = \left(\frac{\partial G^{-1}}{\partial \varepsilon}\right)_F; \qquad \gamma(\varepsilon) \sim \varepsilon^2 sign\varepsilon \tag{2.154}$$

При $q \to 0$ полюса двух функций Грина в уравнении (2.149) сближаются и в подинтегральном выражении эффективно возникает $\delta$ – образный максимум вблизи поверхности Ферми. Соответственно, произведение функций Грина, в смысле его роли в ядре интегрального уравнения (2.149), можно записать в виде (все энергии отсчитываются от уровня Ферми, т.е. от $\varepsilon = E_F = 0$):

$$G\left(p + \frac{q}{2}\right) G\left(p - \frac{q}{2}\right) \approx Z^2 \delta(\varepsilon) \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon G_0\left(p + \frac{q}{2}\right) G_0\left(p - \frac{q}{2}\right) + B(p,q) \tag{2.155}$$

где

$$G_0(p) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon(p) + i\gamma sign(\varepsilon)}; \qquad \gamma \to +0 \tag{2.156}$$

– фактически, свободная функция Грина. Интеграл, входящий в (2.155) нами уже фактически вычислялся в (2.18). Пользуясь полученным там результатом, имеем:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon G_0\left(p + \frac{q}{2}\right) G_0\left(p - \frac{q}{2}\right) = -2\pi i \frac{n\left(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2\right) - n\left(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2\right)}{\omega - \varepsilon\left(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2\right) + \varepsilon\left(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2\right) + i\gamma sign\omega} \tag{2.157}$$

где

$$n(\mathbf{p}) = \begin{cases} 1 & \text{при} \quad |\mathbf{p}| \le p_F \\ 0 & \text{при} \quad |\mathbf{p}| > p_F \end{cases} \tag{2.158}$$

Отсюда легко получить (ср. (2.18), (2.22) и т.д.):

$$G_0\left(p + \frac{q}{2}\right) G_0\left(p - \frac{q}{2}\right)_{q \to 0} = iZ^2 \delta(\varepsilon) 2\pi \frac{\mathbf{qv}}{\omega - \mathbf{qv} + i\gamma sign\omega} \frac{\delta(|\mathbf{p}| - p_F)}{p_F} m^* + B(p,q) \equiv \equiv A + B \tag{2.159}$$

где $\mathbf{v} = \partial\varepsilon(p)/\partial\mathbf{p} = \frac{p_F}{m^*}\mathbf{p}/p$ – скорость квазичастиц на поверхности Ферми, $m^*$ – эффективная масса, а функция $B(p,q)$ не содержит сингулярностей и, с точностью до членов порядка $q^2/p_F^2$ и $\omega^2/E_F^2$ может считаться не зависящей от $q$.

Возвращаясь к полной вершине $\Gamma$, запишем уравнение (2.144) в виде:

$$\Gamma = U + \Gamma GGU = U + \Gamma(A+B)U = U + U(A+B)\Gamma \tag{2.160}$$

Это равенство получается из графического уравнения для $\Gamma$, если собрать графики в "обратном порядке". Введем теперь амплитуду $\Gamma^\omega$, определяемую уравнением:

$$\Gamma^\omega = U + UB\Gamma^\omega = U + \Gamma^\omega BU \tag{2.161}$$

Легко видеть, что $\Gamma^\omega$ есть предел:

$$\Gamma^\omega = \lim_{\omega \to 0, \frac{q}{\omega} \to 0} \Gamma \tag{2.162}$$

Порядок предельных переходов здесь весьма важен — сначала $q \to 0$, а уже потом $\omega \to 0$ (Л.Д.Ландау, 1958). При этом величина $A$ в (2.160) стремится к нулю, что и приводит у уравнению (2.161).

Умножая (2.160) слева на $1+\Gamma^{\omega}B$, получим:

$$\Gamma = \Gamma^{\omega} + \Gamma^{\omega} A \Gamma = \Gamma^{\omega} + \Gamma A \Gamma^{\omega} \tag{2.163}$$

В самом деле, имеем:

$$(1+\underline{\Gamma^{\omega}B)\Gamma} = (1+\Gamma^{\omega}B)U + (1+\Gamma^{\omega}B)U(A+B)\Gamma = \\ = \Gamma^{\omega} + \Gamma^{\omega}(A+B)\Gamma = \Gamma^{\omega} + \Gamma^{\omega}A\Gamma + \underline{\Gamma^{\omega}B\Gamma}$$

– подчеркнутые члены сокращаются и мы получаем (2.163).

Вершина $\Gamma^{\omega}$ зависит от $p^2, (p')^2, \mathbf{pp'}$ и $\varepsilon, \varepsilon'$ (пока отвлекаемся от спинов!), но на поверхности Ферми имеем $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'| = p_F$, $\varepsilon = \varepsilon' = 0$, так что $\Gamma^{\omega}$ зависит только от угла между векторами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$. Величина $\Gamma$ на поверхности Ферми зависит еще и от передаваемого импульса. Поскольку интегрирование в (2.163) (в силу явного вида $A$ из (2.159)) происходит по поверхности Ферми, то при $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'| = p_F$ и $\varepsilon = \varepsilon' = 0$ оно представляет собой замкнутое уравнение для определения $\Gamma$ на поверхности Ферми (Л.Д.Ландау, 1958).

При выводе мы предполагали, что блок $U$ не имеет особенности при передаваемом импульсе $q \to 0$. Поэтому, строго говоря, наше рассмотрение не годится для случая кулоновского взаимодействия между фермионами (т.е. например, для электронов в металле!), но применимо для ферми – жидкостей с короткодействием, типа жидкого $He^3$. Необходимое обобщение на случай дальнодействия будет еще проведено ниже.

Запишем уравнение (2.163) в явном виде, ограничиваясь случаем малых $q$. Рассмотрим сначала случай, когда $\Gamma^{\omega}$ не зависит от спиновых переменных частиц. Тогда суммирование по спиновым индексам внутренних линий (частицы и дырки) приводит просто к появлению множителя 2 (для фермионов со спином 1/2). Используя явное выражение для $A$ из (2.159), получим:

$$\Gamma(\mathbf{n},\mathbf{n}',\mathbf{q}) = \Gamma^{\omega}(\mathbf{n},\mathbf{n}') + \\ + \frac{Z^2 p_F m^*}{\pi^2}\int \Gamma^{\omega}(\mathbf{n},\mathbf{n}'_1)\frac{\mathbf{qv}_1}{\omega - \mathbf{qv}_1 + i\gamma(\omega)}\Gamma(\mathbf{n}_1,\mathbf{n}',\mathbf{q})\frac{d\Omega_1}{4\pi} \tag{2.164}$$

где $\gamma(\omega) = \gamma sign\omega$, $(\gamma \to +0)$, $\mathbf{n},\mathbf{n}',\mathbf{n}_1$ — единичные векторы направлений $\mathbf{p},\mathbf{p}'$ и $\mathbf{v}_1$. Интегрирование в (2.164) происходит по углам вектора $\mathbf{v}_1$.

Рассмотрим в качестве примера случай, когда $\Gamma^{\omega}(\mathbf{n},\mathbf{n}')$ не зависит от угла между $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$. Тогда и $\Gamma$ не зависит от этого угла и сразу же находится из уравнения (2.164):

$$\Gamma(\mathbf{q}\omega) = \frac{\Gamma^{\omega}}{1 - \frac{1}{2}\Phi_0 \int_{-1}^{1} dx \frac{qvx}{\omega - qvx + i\gamma(\omega)}} \tag{2.165}$$

где $\Phi_0 = Z^2\Gamma^{\omega}\frac{m^* p_F}{\pi^2}$. Величина $\frac{m^* p_F}{\pi^2}$ здесь есть просто плотность состояний на уровне Ферми.

Интеграл в (2.165) вычисляется также, как и выше в (2.22) и (2.24), так что получаем:

$$\Gamma(\mathbf{q}\omega) = \frac{\Gamma^{\omega}}{1 + \Phi_0\left\{1 - \frac{\omega}{2qv}\ln\left|\frac{\omega+qv}{\omega-qv}\right| + i\pi\frac{|\omega|}{2qv}\theta(qv - |\omega|)\right\}} \tag{2.166}$$

В случае кулоновского взаимодействия, при $q \to 0$ среди графиков, определяющих блок $U$ (см. Рис. 2.17) достаточно (в первом приближении) оставить только самый первый график, написав:

$$U = \frac{4\pi e^2}{q^2} \equiv V_q \tag{2.167}$$

обращающийся в бесконечность при $q \to 0$. Полагая $Z = 1$ и отбрасывая неполюсный вклад в $GG$, получаем:

$$\Gamma(\mathbf{q}\omega) = \frac{V_q}{1 + \frac{mp_F}{\pi^2} V_q \left[1 - \frac{\omega}{2qv} \ln\left|\frac{\omega+qv}{\omega-qv}\right| + i\pi\frac{|\omega|}{2qv}\theta(qv - |\omega|)\right]} \tag{2.168}$$

При $\omega \gg vq$ отсюда имеем:

$$\Gamma(\mathbf{q}\omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2 - \frac{mp_F}{\pi^2} 4\pi e^2 \frac{1}{3}\frac{v^2q^2}{\omega^2}} = \frac{V_q}{\left(1 - \frac{\omega_p{}^2}{\omega^2}\right)} \tag{2.169}$$

т.е. $\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$, где $\omega_p^2 = \frac{4\pi ne^2}{m}$ – квадрат плазменной частоты. При $vq \gg \omega$ получаем обычную дебаевскую экранировку:

$$\Gamma(\mathbf{q}\omega = 0) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa_D^2} \tag{2.170}$$

где $\kappa_D^2 = \frac{4e^2 mp_F}{\pi}$. Эти формулы, естественно, совпадают с с полученными выше в RPA.

Проведенный выше общий анализ подразумевал отсутствие сингулярности блока $U$ при $q \to 0$, характерного для кулоновского взаимодействия. Поэтому корректный учет кулоновского взаимодействия в рамках общей теории ферми – жидкости требует, вообще говоря, специального обсуждения (В.П.Силин, 1957; P.Nozieres, J.M.Luttinger, 1962) [9, 10]. Рассмотрим произвольную диаграмму для вершинной части Γ. Назовем диаграмму “подходящей” [9], если малый импульс передачи $q$ не появляется ни в одной из ее линий взаимодействия. В противном случае классифицируем диаграмму как “неподходящую”. Соответствующие примеры показаны на Рис. 2.20. “Подходящие” диаграммы дают регулярные вклады при $q \to 0$. Обозначим через $\tilde{\Gamma}$ сумму всех “подходящих” диаграмм для вершинной части. Она, очевидно, также регулярна при $q \to 0$. Тогда ясно, что произвольный вклад в полную вершину имеет структуру, показанную на Рис. 2.21. Таким образом можем записать:

$$\Gamma = \tilde{\Gamma} + \tilde{T}\mathcal{V}\tilde{T} \tag{2.171}$$

где диаграммы для блоков $\mathcal{V}$ (экранированное взаимодействие!) и $\tilde{T}$ показаны на Рис. 2.22. В аналитическом виде (Рис. 2.22(a)):

$$\mathcal{V} = V_q + V_q\tilde{\Pi}V_q + V_q\tilde{\Pi}V_q\tilde{\Pi}V_q + ... \tag{2.172}$$

причем $\tilde{\Pi}$, также как и $\tilde{T}$ (Рис. 2.22(b)) не содержат “неподходящих” диаграмм. Ясно, что:

$$\mathcal{V} = \frac{V_q}{1 - V_q\tilde{\Pi}} \tag{2.173}$$

так что

$$\Gamma = \tilde{\Gamma} + \frac{\tilde{T}V_q\tilde{T}}{1 - V_q\tilde{\Pi}} \tag{2.174}$$

Величины $\tilde{\Gamma}$, $\tilde{T}$, $\tilde{\Pi}$ обладают хорошо определенными пределами при $q \to 0$ (типа $\Gamma^\omega$). Поэтому, все общие уравнения для амплитуд рассеяния (вершин) теории ферми – жидкости, выведенные выше, остаются, фактически, справедливыми для “подходящих” вершин (амплитуд), так что при наличии кулоновского взаимодействия над

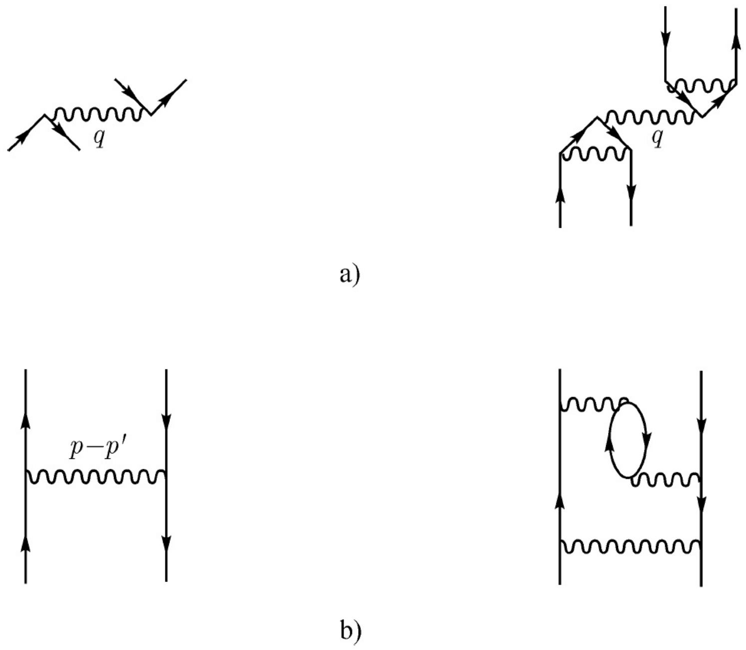



Рис. 2.20: Примеры “неподходящих” (a) и “подходящих” (b) диаграмм в задаче с кулоновским взаимодействием.

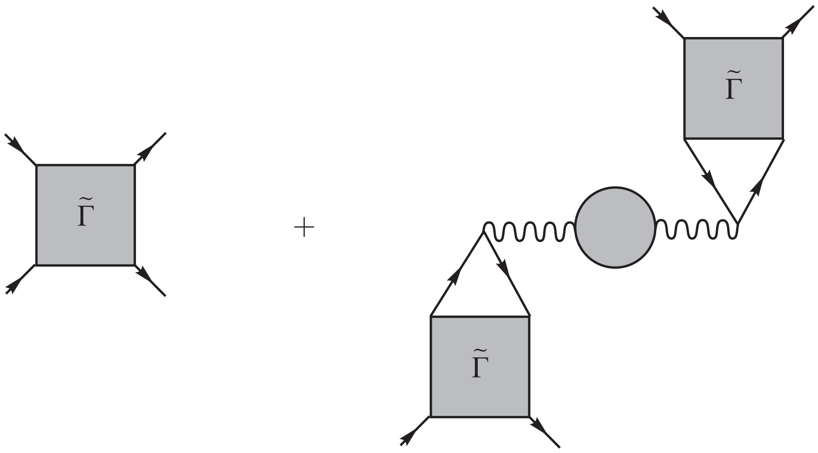



Рис. 2.21: Общая структура произвольного вклада в полную вершину в задаче с кулоновским взаимодействием.

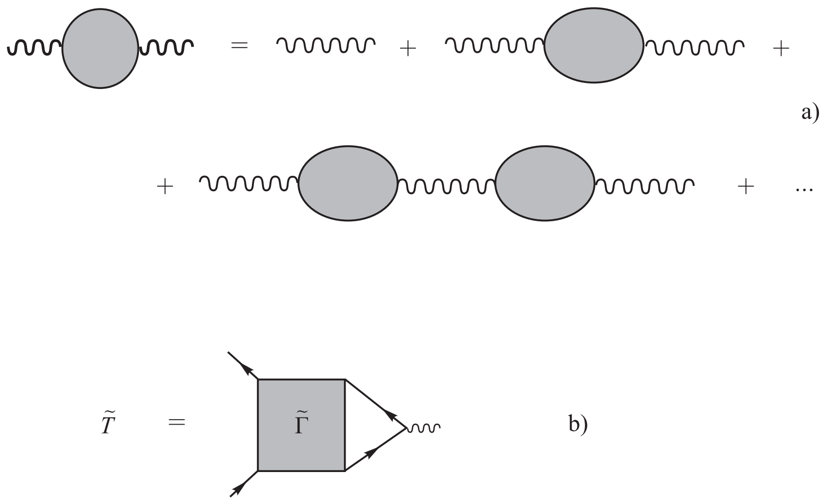



Рис. 2.22: Диаграммы для эффективного (экранированного) взаимодействия (a) и определение блока $\tilde{T}$ (b).

ними надо просто поставить знак тильды. Физически это означает, что мы разделяем полную вершину $\Gamma$ на короткодействующую часть $\tilde{\Gamma}$ и часть, включающую самосогласованное поле $\Gamma_{long}$:

$$\Gamma = \tilde{\Gamma} + \Gamma_{long} \tag{2.175}$$

как это показано на Рис. 2.23. Величина $\Gamma_{long}$ в точности соответствует эффективному самосогласованному полю (скалярному потенциалу), которое вводится в теории Ландау – Силина [11, 9, 10]. При этом величина $\tilde{\Gamma}$ описывает короткодействующие *корреляционные* эффекты, для нее в кулоновской (металл) ферми – жидкости пишутся те же феноменологические выражения, что и в ферми – жидкости с короткодействием (типа $He^3$) (см. ниже). В пространственно однородной системе вклад $\Gamma_{long}$ при $q = 0$ полностью компенсируется положительным фоном (ионов). Его роль существенна в кинетическом уравнении Ландау – Силина, описывающем коллективные колебания металлической ферми – жидкости [10].

Из предыдущего рассмотрения ясно, что именно величина $Z^2\Gamma^\omega$ и играет роль амплитуды рассеяния квазичастиц в ферми – жидкости. Заметим, что величина $\Gamma^\omega$ (при $\omega \to 0$) вещественна (эрмитова по спиновым индексам). В самом деле, $\Gamma^\omega$ представляет собой амплитуду рассеяния двух частиц в среде (жидкости) на нулевой угол ($vq \ll E_F$). Мнимая часть амплитуды рассеяния вперед, с помощью оптической теоремы квантовой теории рассеяния, выражается через полное сечение рассеяния частиц. Но сечение рассеяния частиц обращается в нуль, когда импульсы частиц стремятся к импульсу Ферми, поскольку в этом случае стремится к нулю фазовый объем конечных состояний. Именно для $\Gamma^\omega$ и вводится обычное феноменологическое представление (Л.Д.Ландау, 1958):

$$Z^2\Gamma^\omega \frac{m^* p_F}{\pi^2} \equiv f(\mathbf{p}\sigma; \mathbf{p}'\sigma') = f^s + (\vec{\sigma}\vec{\sigma}')f^a \tag{2.176}$$

причем $f^s$ и $f^a$ зависят здесь только от угла между $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ (которые лежат на

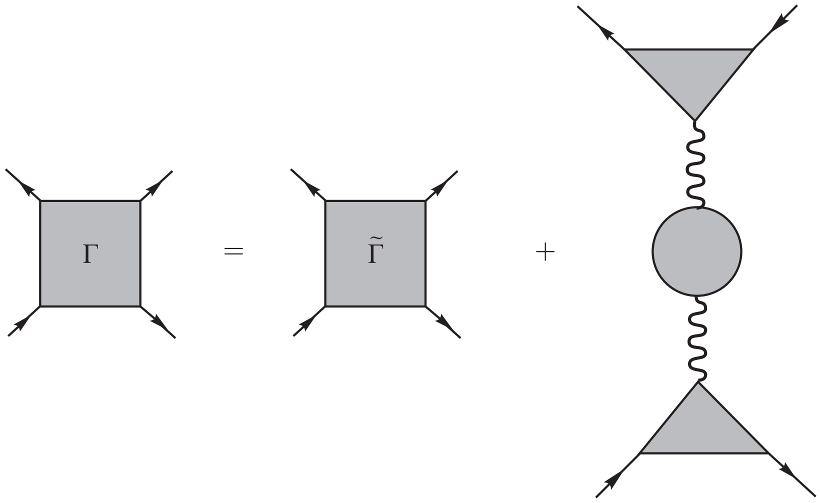



Рис. 2.23: Полная вершина в теории ферми – жидкости с кулоновским взаимодействием. Второе слагаемое в правой части представляет эффективное самосогласованное поле (скалярный потенциал).

поверхности Ферми), так что обычно вводят разложение по полиномам Лежандра:

$$f^{s,a}(\theta) = \frac{\pi^2}{m^* p_F} \sum_{l=0}^{\infty} F_l^{s,a} P_l(\cos\theta) \tag{2.177}$$

где $F^{s,a}$ – безразмерные параметры (константы) Ландау, описывающие ферми – жидкостное (корреляционное) взаимодействие квазичастиц[10].

Решение интегрального уравнения (2.164) для Γ можно, при этом, искать также в виде:

$$Z^2 \frac{m^* p_F}{\pi^2} \Gamma = \varphi + (\vec{\sigma}\vec{\sigma}')\psi \tag{2.178}$$

Тогда для $\varphi$ и $\psi$ возникают следующие уравнения:

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{n}, \mathbf{n}', \mathbf{q}) &= f^s(\mathbf{n}, \mathbf{n}') + \\ + \int f^s(\mathbf{n}, \mathbf{n}_1) &\frac{\mathbf{q}\mathbf{v}_1}{\omega - \mathbf{q}\mathbf{v}_1 + i\gamma(\omega)} \varphi(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}', \mathbf{q}) \frac{d\Omega_1}{4\pi} \end{aligned} \tag{2.179}$$

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{n}, \mathbf{n}', \mathbf{q}) &= f^a(\mathbf{n}, \mathbf{n}') + \\ + \int f^a(\mathbf{n}, \mathbf{n}_1) &\frac{\mathbf{q}\mathbf{v}_1}{\omega - \mathbf{q}\mathbf{v}_1 + i\gamma(\omega)} \psi(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}', \mathbf{q}) \frac{d\Omega_1}{4\pi} \end{aligned} \tag{2.180}$$

Если интересоваться коллективными возбуждениями в ферми – жидкости, то следует иметь в виду, что они определяются полюсами двухчастичной функции Грина в канале частица – дырка, которая определяется уравнением (2.139):

$$K = K_0 - GG\Gamma GG \tag{2.181}$$

[10]В рамках феноменологического подхода эти константы подлежат определению из эксперимента.

Слагаемое $K_0$ здесь имеет полюс, соответствующий только суммарной энергии двух свободных частиц, так что полюса $K$, соответствующие коллективным возбуждениям, имеются только в $\Gamma$. Вблизи такого полюса в (2.144) можно пренебречь неоднородным членом и написать:

$$\Gamma = UGG\Gamma \tag{2.182}$$

Если теперь ограничиться возбуждениями с малыми $q \ll p_F$ и $\omega \ll E_F$, то можно воспользоваться перенормированным уравнением для $\Gamma$:

$$\Gamma = \Gamma^{\omega} + \Gamma^{\omega} A \Gamma \tag{2.183}$$

решение которого следует искать в виде (2.178). Соответственно, в системе возможны звуковые колебания (нулевой звук)[11], описываемые $\varphi$, и спиновые волны, описываемые $\psi$. Рассмотрим подробнее случай нулевого звука. Из уравнения (2.179), вблизи полюса, получаем:

$$\varphi(\mathbf{n}, \mathbf{n}', \mathbf{q}) = \int f^s(\mathbf{n}, \mathbf{n}_1) \frac{\mathbf{q}\mathbf{v}_1}{\omega - \mathbf{q}\mathbf{v}_1 + i\gamma(\omega)} \varphi(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}', \mathbf{q}) \frac{d\Omega_1}{4\pi} \tag{2.184}$$

Вблизи полюса, соответствующего коллективным колебаниям со спектром $\omega_q$, величина $\varphi$ может быть записана в виде:

$$\varphi(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \frac{\chi(\mathbf{n})\chi(\mathbf{n}')}{\omega^2 - \omega_q^2} 2\omega_q \tag{2.185}$$

Такая структура решения может быть оправдана из общих соображений [8], для нас достаточно сказать, что мы просто ищем решение в таком виде. Тогда для $\chi(\mathbf{n})$ возникает уравнение:

$$\chi(\mathbf{n}) = \int f^s(\mathbf{n}, \mathbf{n}_1) \frac{\mathbf{q}\mathbf{v}_1}{\omega - \mathbf{q}\mathbf{v}_1 + i\gamma(\omega)} \chi(\mathbf{n}_1) \frac{d\Omega_1}{4\pi} \tag{2.186}$$

Введем, по определению, величину:

$$\rho(\mathbf{n}) = \frac{\mathbf{v}\mathbf{q}}{\omega - \mathbf{v}\mathbf{q} + i\gamma(\omega)} \chi(\mathbf{n}) \tag{2.187}$$

Для нее из (2.186) возникает уравнение:

$$(\omega - \mathbf{v}\mathbf{q})\rho(\mathbf{n}) = \mathbf{v}\mathbf{q} \int f^s(\mathbf{n}, \mathbf{n}_1)\rho(\mathbf{n}_1) \frac{d\Omega_1}{4\pi} \tag{2.188}$$

которое совпадает с *кинетическим уравнением* феноменологической теории Ландау для изменения функции распределения квазичастиц [10].

Поясним это подробнее. Малое изменение функции распределения ферми – газа (а квазичастицы в ферми – жидкости, фактически, образуют именно такой газ) при малых $q$ и $\omega$ подчиняется кинетическому уравнению вида:

$$(\omega - \mathbf{v}\mathbf{q})\delta f_{\mathbf{q}}(\mathbf{p}) = -\mathbf{q}\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} V_q(\mathbf{p}) \tag{2.189}$$

[11] Для простоты мы сейчас ограничиваемся рассмотрением ферми – жидкости с короткодействием. Физически нулевой звук представляет собой не просто колебания плотности жидкости, а осцилляции формы поверхности Ферми [10]

где $f_0$ – равновесная (фермиевская) функция распределения, а самосогласованное поле (потенциал) $V_q(\mathbf{p})$ связано с изменением функции распределения следующим соотношением[12]:

$$V_q(\mathbf{p}) = 2\int U(\mathbf{p},\mathbf{p}')\delta f_{\mathbf{q}}(\mathbf{p}')\frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \tag{2.190}$$

где $U(\mathbf{p},\mathbf{p}')$ – амплитуда взаимодействия между частицами в импульсном представлении. Используя теперь:

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}\delta(|\mathbf{p}|-p_F) \tag{2.191}$$

и переписывая неравновесную добавку к функции распределения как:

$$\delta f_{\mathbf{q}}(\mathbf{p}) = \delta(|\mathbf{p}|-p_F)\rho(\mathbf{n}) \tag{2.192}$$

получаем:

$$(\omega - \mathbf{vq})\rho(\mathbf{n}) = \mathbf{vq}\frac{m^* p_F}{\pi^2}\int U(\mathbf{p},\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{n}_1)\frac{d\Omega_1}{4\pi} \tag{2.193}$$

при $|\mathbf{p}_1| = |\mathbf{p}| = p_F$. Сравнение с (2.188) дает:

$$U(\mathbf{p},\mathbf{p}_1) = \frac{\pi^2}{m^* p_F}f^s(\mathbf{n},\mathbf{n}_1) = Z^2\Gamma_s^\omega(\mathbf{p},\mathbf{p}_1) \tag{2.194}$$

где через $\Gamma_s^\omega$ обозначили бесспиновую часть амплитуды.

Рассмотрим решение (2.188) для простейшего случая, когда $f^s(\mathbf{n},\mathbf{n}') = F_0$, т.е. сводится к единственной константе. Тогда (2.188) сводится к:

$$\rho(\mathbf{n}) = \frac{\mathbf{vq}}{\omega - \mathbf{vq}}F_0\int \rho(\mathbf{n}_1)\frac{d\Omega_1}{4\pi} \tag{2.195}$$

Выполняя интегрирование по углам (как мы это уже делали раньше), получаем уравнение:

$$-\frac{1}{F_0} = 1 - \frac{\omega}{2vq}\ln\left|\frac{\omega+vq}{\omega-vq}\right| + i\pi\frac{|\omega|}{2vq}\theta(vq-|\omega|) \tag{2.196}$$

решение которого и дает закон дисперсии нулевого звука. Вещественная частота (отсутствие затухания) соответствует области $|\omega| > vq$, или, если обозначить $\omega_q = svq$:

$$\frac{1}{F_0} = \frac{s}{2}\ln\frac{s+1}{s-1} - 1, \quad \text{где} \quad s > 1 \tag{2.197}$$

Нетрудно видеть, что правая часть здесь положительна, поэтому нулевой звук возможен только при $F_0 > 0$. В предельных случаях:

$$s_{F_0\to 0} = 1 + 2e^{-\frac{2}{F_0}} \qquad s_{F_0\to\infty} = \sqrt{F_0/3} \tag{2.198}$$

В заключение, приведем без деталей вывода ряд основных соотношений стандартной теории ферми – жидкости [10]. В частности, с использованием галилеевой инвариантности, можно показать, что эффективная масса $m^*$ определяется простым соотношением:

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{F_1^s}{3} \tag{2.199}$$

[12]Именно к $V_q(\mathbf{p})$ в теории Ландау – Силина нужно еще добавить вклад самосогласованного скалярного потенциала, определяющего электрическое поле, который определяется совместным решением кинетического уравнения и уравнения Пуассона.

Соответственно, теплоемкость ферми – жидкости (при $T = 0$):

$$c = \frac{m^*}{m} c_0 \tag{2.200}$$

где $c_0$ – теплоемкость ферми – газа.

Магнитная восприимчивость:

$$\chi = \frac{m^*}{m} \frac{1}{1 + F_0^a} \chi_0 \tag{2.201}$$

где $\chi_0$ – восприимчивость идеального ферми – газа. Аналогичным образом, сжимаемость ферми – жидкости есть:

$$\kappa = \frac{m^*}{m} \frac{1}{1 + F_0^s} \kappa_0 \tag{2.202}$$

где $\kappa_0$ – сжимаемость ферми – газа.

Используя эти соотношения можно прийти к некоторым общим выводам. Например из (2.201) и (2.202) сразу следуют условия устойчивости однородной ферми – жидкости:

$$1 + F_0^a > 0; \qquad 1 + F_0^s > 0 \tag{2.203}$$

В самом деле, $1 + F_0^s < 0$ привело бы к отрицательной сжимаемости (что может означать, что в системе происходит структурный фазовый переход, который переводит систему в новое устойчивое состояние!). Общий анализ устойчивости ферми – жидкости (И.Я.Померанчук, 1957) дает следующие неравенства, которые должны удовлетворяться для всех $l$:

$$1 + \frac{1}{2l + 1} F_l^{s,a} > 0 \tag{2.204}$$

Например, для $l = 1$ условие (2.204) гарантирует положительность $m^*$ из (2.199). Из (2.201) видно, что для систем, близких к магнитной неустойчивости, может быть $1 + F_0^a \ll 1$. Величину этого параметра можно экспериментально определить из измерений восприимчивости и теплоемкости, находя так называемое отношение Вильсона:

$$R_W = \frac{\pi^2 \chi T}{3\mu_B^2 c} = \frac{1}{1 + F_0^a} \tag{2.205}$$

## 2.10 Нефермижидкостное поведение.

Кроме нормальной ферми – жидкости существует еще целый ряд типов основного состояния многоэлектронных систем. В частности, система может перейти в сверхпроводящее состояние, возможны различные типы магнитного упорядочения или состояния с неоднородным распределением заряда (волной зарядовой плотности – CDW). Некоторые из этих состояний могут быть диэлектрическими. Многие из этих возможностей мы еще будем обсуждать ниже. Но существует и общий принципиальный вопрос — является-ли ферми – жидкость Ландау единственным возможным состоянием нормального металла, в котором не возникает какой – либо дальний порядок? Эта проблема активно обсуждается в последние годы, особенно в связи с физикой высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) на основе оксидов меди. Нефермижидкостное поведение, как правило, реализуется в одномерных моделях, основополагающий пример модели Томонага – Латтинжера будет рассмотрен

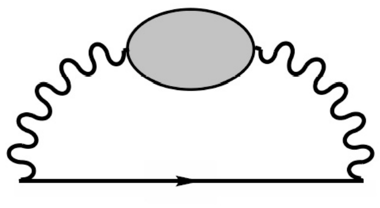


Рис. 2.24: Собственно – энергетическая часть в теории “маргинальной” ферми – жидкости.

в самом конце наших лекций. ВТСП системы относятся к пограничному случаю двумерных (квазидвумерных) систем, вопрос об их основном состоянии остается, в значительной мере, открытым. При этом для них существует целый ряд “сценариев” формирования нефермижидкостного поведения.

Здесь мы остановимся только на очень кратком обсуждении модели так называемой “маргинальной” ферми – жидкости [13]. В этой теории *предполагается*[13], что поляризационный оператор электронной системы $\Pi(\mathbf{q}\omega)$ не имеет заметной зависимости от $\mathbf{q}$, а его частотная зависимость его мнимой части имеет вид:

$$Im\Pi(\mathbf{q}\omega) = \begin{cases} -N(E_F)\frac{\omega}{T} & \text{при} \quad \omega \ll T \\ -N(E_F) & \text{при} \quad T \ll \omega \ll \omega_c \end{cases} \tag{2.206}$$

Здесь $\omega_c$ – определенная частота обрезания, причем предполагается, что $\omega_c \ll E_F$. Используя дисперсионные соотношения Крамерса – Кронига, можно восстановить вид действительной части $\Pi$, соответствующий (2.206):

$$Re\Pi(\mathbf{q}\omega) \sim N(E_F)\ln\left(\frac{\omega}{T}\right) \tag{2.207}$$

С помощью этих соотношений можно оценить собственно – энергетическую часть электрона, определяемую диаграммой Рис. 2.24:

$$\Sigma \sim \lambda\varepsilon\left[\ln\frac{x}{\omega_c} + i\frac{\pi}{2}sign\varepsilon\right] \tag{2.208}$$

где $x = Max(\varepsilon, T)$, а $\lambda$ – некоторая константа взаимодействия.

Тогда, используя (2.49) сразу же получаем:

$$Z = \frac{1}{1 - \frac{\partial Re\Sigma}{\partial\varepsilon}} \sim \frac{1}{1 - \lambda\ln\left(\frac{x}{\omega_c}\right)} \tag{2.209}$$

Таким образом получается, что вычет в полюсе функции Грина стремится к нулю при переходе на саму поверхность Ферми, так что как раз на ней квазичастицы уже не определены! Затухание квазичастиц, определяемое мнимой частью $\Sigma$ (2.208) линейно по энергии, отсчитанной от уровня Ферми: $\gamma \sim \varepsilon$. Поэтому квазичастицы определены только “маргинально” (в отличие от теории Ландау, в которой, как мы видели, имеем оценку $\gamma \sim \varepsilon^2$).

[13]Эти предположения соответствуют качественному поведению электронных свойств ВТСП купратов в нормальном состоянии.

Что может привести к такому поведению в настоящее время не вполне ясно, хотя феноменология “маргинальной” ферми – жидкости неплохо описывает основные аномалии электронных свойств ВТСП в нормальной фазе. Поэтому, в частности, она пользуется определенной популярностью при подгоночном описании экспериментов [13].

Заметим, что обсуждаемая проблема тесно связана с пониженной размерностью изучаемых систем. Как уже отмечалось, в одномерных моделях взаимодействующих электронов теория ферми – жидкости Ландау “не работает” никогда. Многие теоретики считают, что аналогичная ситуация реализуется и в двумерном случае, характерном для ВТСП систем. При этом считается, что физическая причина аномального поведения связана с наличием *сильных межэлектронных корреляций*, которые не удается описать в обычном фермижидкостном подходе, так или иначе стартующем с картины основного состояния типа идеального ферми – газа. В то же время, целый ряд детальных исследований показал, что, скорее всего, ферми – жидкостное описание сохраняется и для двумерных (квазидвумерных) систем.

# Глава 3

# ЭЛЕКТРОН – ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

## 3.1 Правила диаграммной техники.

Фононы представляют собой кванты колебаний кристаллической решетки. Фононы бывают акустические и оптические. Отличие между ними состоит в том, что частота акустических фононов обращается в нуль при $\mathbf{k} \to 0$, а частота оптических фононов остается в этом пределе конечной. Акустические фононы существуют всегда – это, фактически, голдстоуновская мода, связанная с нарушением трансляционной инвариантности системы. Оптические фононы существуют только в кристаллах, содержащих более одного атома в элементарной ячейке.

Для описания спектра фононов часто пользуются упрощенными моделями Дебая и Эйнштейна. В модели Дебая спектр фононов полагается равным $\omega_0(k) = ck$ ($c$ – скорость звука) при всех $k < k_D$. В модели Эйнщтейна частота фононов полагается не зависящей от волнового вектора: $\omega_0(k) = \Omega_0$ при всех значениях $k$. Дебаевские фононы – упрощенная модель акустических фононов, а эйнштейновские – оптических.

Из-за того, что ядра кристаллической решетки заряжены, фононы могут взаимодействовать с электронами. При колебаниях решетки электрическое поле ядер, действующее на электроны, отклоняется от среднего. Потенциал возникающего добавочного поля принято называть *деформационным потенциалом.* В принципе, изза того, что кулоновские силы дальнодействующие, взаимодействие электронов с фононами могло бы быть сильно нелокальным. В действительности, как мы видели выше, это электрическое поле (в металле) хорошо экранируется, поэтому, в большинстве случаев, электрон – фононное взаимодействие можно считать локальным.

Связь деформационного потенциала со смещением решетки различна для оптических и акустических фононов. При акустических колебаниях соседние атомы смещаются почти одинаково. Поэтому электрическое поле почти не меняется. Его изменение пропорционально разности смещений соседних атомов, а деформационный потенциал $U_{d-ac} \sim div\mathbf{u}$, где $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ – смещение. В случае оптических фононов соседние атомы колеблются в противофазе, так что $U_{d-op} \sim \mathbf{u}(\mathbf{r})$. Чтобы представить взаимодействие единым образом, введем (эрмитов!) оператор фононного поля в виде [1]:

$$\hat{\varphi}(\mathbf{r}t) = i\sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\omega_0(\mathbf{k})}{2V}} \left[\hat{b}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{kr}-i\omega_0(\mathbf{k})t} - \hat{b}^+_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{kr}+i\omega_0(\mathbf{k})t}\right] \tag{3.1}$$

где $\hat{b}^+_{\mathbf{k}}$, $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ – операторы рождения и уничтожения фононов, $V$ – объем системы. Тогда $\varphi(\mathbf{r}) \sim \nabla \mathbf{u}(\mathbf{r})$ для акустических фононов и $\varphi(\mathbf{r}) \sim \mathbf{u}(\mathbf{r})$ для оптических фононов. Соответственно, гамильтониан взаимодействия электронов с фононами записывается следующим образом [1]:

$$H_{int} = g\int d\mathbf{r}\hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\varphi}(\mathbf{r}) \tag{3.2}$$

где $g$ – константа электрон – фононного взаимодействия. Гамильтониан (3.2) содержит просто произведение электронной плотности на деформационный потенциал.

Правила диаграммной техники для электронов и фононов выглядят почти также, как и для двухчастичного взаимодействия [1]. Для расчета электронной функции Грина при $T = 0$ имеем:

- Отличны от нуля только диаграммы четного порядка по взаимодействию. Диаграмма порядка $2n$ содержит $3n+1$ внутренних (электронных и фононных) линий и $2n$ вершин, что соответствует $3n-1-(2n-1) = n$ независимым интегрированиям. Всем линиям приписываются определенные 4–импульсы, которые сохраняются в вершинах взаимодействия.

- Электрону сопоставляется *сплошная* линия, которой отвечает выражение для свободной функции Грина:

$$G_0(p) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) + i\delta sign\xi(\mathbf{p})} \qquad \text{где} \qquad \delta \to +0 \tag{3.3}$$

  причем

$$\xi(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} - \mu \approx v_F(|\mathbf{p}| - p_F) \tag{3.4}$$

  – энергетический спектр свободных фермионов, энергия которых отсчитывается от уровня Ферми (химического потенциала $\mu$), $p_F$ и $v_F$ – импульс и скорость на поверхности Ферми.

- *Пунктирной* линии сопоставляется фурье – образ фононной функции Грина:

$$D_0(k) = \frac{\omega_0^2(\mathbf{k})}{\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{k}) + i\delta} \qquad \text{где} \qquad \delta \to +0 \tag{3.5}$$

- Проводится интегрирование по $n$ независимым импульсам и частотам (4–импульсам).

- Результат умножается на коэффициент $(g)^{2n}(2\pi)^{-4n}(i)^n(2s+1)^F(-1)^F$, где $F$ – число замкнутых фермионных петель, а $s$ – спин фермиона (для электрона $s = 1/2$, так что фактически у нас всегда $2s+1 = 2$).

При $T > 0$ все аналогично:

- Каждой сплошной (электронной) линии с импульсом $\mathbf{p}$ и мацубаровской частотой $\varepsilon_n = (2n+1)\pi T$ сопоставляется выражение:

$$G_0(\varepsilon_n\mathbf{p}) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p})} \tag{3.6}$$

- Каждой фононной (пунктирной) линии с импульсом $\mathbf{k}$ и частотой $\omega_m = 2\pi mT$ сопоставляется:
$$D_0(k) = -\frac{\omega_0^2(\mathbf{k})}{\omega_m^2 + \omega_0^2(\mathbf{k})} \tag{3.7}$$

- Результат умножается на коэффициент $g^{2n}(-1)^n \frac{T^n}{(2\pi)^{3n}}(2s+1)^F(-1)^F$, где $F$ опять обозначает число фермионных петель диаграммы, а $s = 1/2$ – спин электрона.

Приведенный в диаграммных правилах вид фононной функции Грина соответствует принятой в (3.1) нормировке фононного оператора [1][1]:
$$\varphi(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\omega_0(\mathbf{k})}{2}}(b_{\mathbf{k}} + b^+_{-\mathbf{k}}) \tag{3.8}$$
В литературе часто используется и другая нормировка [5]:
$$\varphi(\mathbf{k}) = b_{\mathbf{k}} + b^+_{-\mathbf{k}} \tag{3.9}$$
Тогда функция Грина свободных фононов принимает вид [5]:
$$D_0(\mathbf{k}\omega) = \frac{1}{\omega - \omega_0(\mathbf{k}) + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_0(\mathbf{k}) - i\delta} = \frac{2\omega_0(\mathbf{k})}{\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{k}) + i\delta} \tag{3.10}$$
Соответственно, при использовании разных нормировок, возникают определенные отличия в записи матричных элементов электрон – фононного взаимодействия, которые компенсируют эти различия, так что физические результаты остаются одинаковыми. Это важно понимать при сравнении результатов различных авторов. При использовании (3.9) гамильтониан взаимодействия (3.2) записывается как [5] (для краткости полагаем здесь $V = 1$):
$$H_{int} = \sum_{\mathbf{pk}} \bar{g}_k a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} a_{\mathbf{p}} (b_{\mathbf{k}} + b^+_{-\mathbf{k}}) \tag{3.11}$$
Но если использовать нормировку (3.8), то имеем:
$$H_{int} = g\sum_{\mathbf{pk}} \sqrt{\frac{\omega_0(\mathbf{k})}{2}} a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} a_{\mathbf{p}} (b_{\mathbf{k}} + b^+_{-\mathbf{k}}) \tag{3.12}$$
что приводит к различию в определении констант электрон – фононного взаимодействия. В частности, для соответствующей безразмерной константы в отечественной литературе чаще используют [1]:
$$\zeta = g^2\nu_F \tag{3.13}$$
тогда, как в "западной" литературе обычно пишут:
$$\lambda = \frac{2\bar{g}_k^2\nu_F}{\omega_0(k)} \tag{3.14}$$
Прямое сравнение (3.11) и (3.12) дает:
$$\bar{g}_k = g\sqrt{\frac{\omega_0(k)}{2}} \tag{3.15}$$
В дальнейшем мы стараемся придерживаться обозначений [1].

Вычисление собственно – энергетической части электрона позволяет, в принципе, найти спектр электронов с учетом электрон – фононного взаимодействия. Для определения спектра фононов нужно найти полюса фононной функции Грина $D(\omega\mathbf{k})$. Как и для функции Грина электронов $G(E\mathbf{p})$, для фононной функции Грина можно провести выделение собственно – энергетической части, которая фактически является поляризационным оператором $\Pi(\omega\mathbf{k})$ с поправками от электрон – фононного взаимодействия, как это показано на Рис. 3.1. Уравнение Дайсона для фононной

[1]Дотошному читателю полезно убедиться в физической эквивалентности записей, принятых в (3.1) и (3.8.)

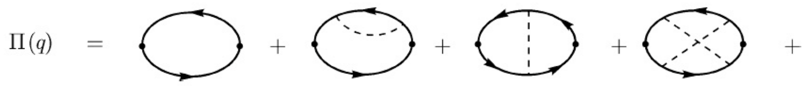



Рис. 3.1: Графики для собственно – энергетической части фонона.

функции Грина имеет вид:

$$D(\omega\mathbf{k}) = D_0(\omega\mathbf{k}) + D_0(\omega\mathbf{k})g^2\Pi(\omega\mathbf{k})D(\omega\mathbf{k}) \tag{3.16}$$

и имеет решение:

$$D^{-1}(\omega\mathbf{k}) = D_0^{-1}(\omega\mathbf{k}) - g^2\Pi(\omega\mathbf{k}) \tag{3.17}$$

Соответственно, спектр фононов определяется уравнением:

$$D_0^{-1}(\omega\mathbf{k}) = g^2\Pi(\omega\mathbf{k}) \tag{3.18}$$

Если ввести безразмерную константу электрон – фононного взаимодействия как $\zeta = g^2\nu_F$ ($\nu_F = \frac{mp_F}{2\pi^2\hbar^3}$ - плотность состояний на уровне Ферми в расчете на одну проекцию спина), то оценка из общих соображений дает обычно $\zeta \sim 1$. Поэтому, казалось бы, связь электронов с фононами всегда является достаточно сильной. Но оказывается, как мы увидим ниже, в рассматриваемой задаче существует дополнительный параметр малости, позволяющий найти достаточно простое решение без предположения о малости $g$. Это так называемый параметр адиабатичности $\frac{\omega_D}{E_F} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} \ll 1$ (здесь $\omega_D$ - дебаевская частота, $m$ – масса электрона, а $M$ – масса иона). Дело в том, что ионы, ввиду их большой массы, двигаются гораздо медленнее, нежели электроны. Соответственно, электроны не могут "раскачать" решетку, вместо этого они "подстраиваются" под ее локальную конфигурацию. Мы увидим, что в результате электрон – фононное взаимодействие не приводит к разрушению фермижидкостной картины.

## 3.2 Собственно – энергетическая часть электрона.

Рассмотрим [3] простейший вклад в собственно – энергетическую часть электрона, определяемый графиком Рис. 3.2. Соответствующее аналитическое выражение имеет вид (для случая взаимодействия с акустическими фононами):

$$\Sigma(E\mathbf{p}) = \frac{ig^2}{(2\pi)^4}\int \frac{d\omega d^3k}{E - \omega - \xi(\mathbf{p}-\mathbf{k}) + i\delta sign\xi(\mathbf{p}-\mathbf{k})}\frac{c^2k^2}{\omega^2 - c^2k^2 + i\delta} \tag{3.19}$$

Здесь имеются полюса при $\omega_1 = E - \xi(\mathbf{p}-\mathbf{k}) + i\delta sign\xi(\mathbf{p}-\mathbf{k})$ и $\omega_{2,3} = \pm(ck - i\delta)$. Можно замкнуть контур интегрирования так, чтобы внутри него оказался только один из полюсов фононной функции Грина. Интеграл по бесконечно удаленной полуокружности обращается в нуль. Соответственно, после элементарных выкладок получаем:

$$\Sigma(E\mathbf{p}) = \frac{-g^2}{(2\pi)^3}\left\{\int_{\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}<0}\frac{d^3k}{E + ck - \xi(\mathbf{p}-\mathbf{k}) - i\delta}\frac{c^2k^2}{(-2)ck} - \int_{\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}>0}\frac{d^3k}{E - ck - \xi(\mathbf{p}-\mathbf{k}) + i\delta}\frac{c^2k^2}{2ck}\right\} =$$

$$= \frac{g^2c}{16\pi^3}\left\{\int_{\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}>0}\frac{kd^3k}{E - ck - \xi(\mathbf{p}-\mathbf{k}) + i\delta} + \int_{\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}<0}\frac{kd^3k}{E + ck - \xi(\mathbf{p}-\mathbf{k}) - i\delta}\right\} =$$

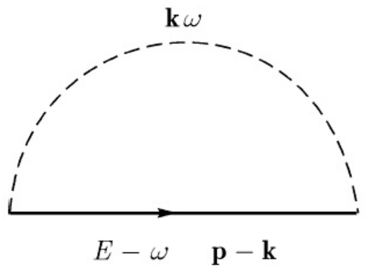



Рис. 3.2: Простейший вклад в собственно – энергетическую часть электрона от электрон – фононного взаимодействия.

$$= \frac{g^2 c}{16\pi^3}\left\{\int_{|\mathbf{p}-\mathbf{k}|>p_F}\frac{kd^3k}{E-ck-v_F(|\mathbf{p}-\mathbf{k}|-p_F)+i\delta}+\int_{|\mathbf{p}-\mathbf{k}|<p_F}\frac{kd^3k}{E+ck-v_F(|\mathbf{p}-\mathbf{k}|-p_F)-i\delta}\right\} \tag{3.20}$$

Обозначим через $x$ косинус угла между векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}$, тогда имеем $p_1^2=|\mathbf{p}-\mathbf{k}|^2 = p^2+k^2-2pkx$ и $d^3k=2\pi k^2dkdx$, так что $p_1dp_1=-pkdx$. Тогда (3.20) записывается как:

$$\Sigma(E\mathbf{p}) = -\frac{g^2c}{8\pi^2 p}\left\{\int_{p_1>p_F}\frac{k^2dkdp_1p_1}{E-ck-v_F(p_1-p_F)+i\delta}+\int_{p_1<p_F}\frac{k^2dkdp_1p_1}{E+ck-v_F(p_1-p_F)-i\delta}\right\} \tag{3.21}$$

Основной вклад в интегралы здесь дает окрестность полюсов, но в ней можно положить $p_1\approx p\approx p_F$, поскольку $\omega_D\ll E_F$. Поэтому можно пренебречь отличием $p_1$ от $p$ и записать:

$$\Sigma(E) = -\frac{g^2c}{8\pi^2}\left\{\int_{p_1>p_F}\frac{k^2dkdp_1}{E-ck-v_F(p_1-p_F)+i\delta}+\int_{p_1<p_F}\frac{k^2dkdp_1}{E+ck-v_F(p_1-p_F)-i\delta}\right\} \tag{3.22}$$

Тогда для мнимой части $\Sigma(E)$ получаем:

$$Im\Sigma(E) = \frac{g^2c}{8\pi}\left\{\int_{p_1>p_F}\delta(E-ck-v_F(p_1-p_F))k^2dkdp_1-\int_{p_1<p_F}\delta(E+ck-v_F(p_1-p_F))k^2dkdp_1\right\} \tag{3.23}$$

Первое слагаемое здесь (отличное от нуля при $E>0$) дает время жизни электронов, а второе (отличное от нуля при $E<0$) – время жизни дырок. Рассмотрим теперь предельное поведение затухания при $E\ll\omega_D$ и $E\gg\omega_D$.

- Случай $E\ll\omega_D$

При $E>0$ вклад дает только первый член в (3.23), где интегрирование по $k$ нужно проводить по области $k<E/c$, иначе $p_1$, определяемый аргументом $\delta$-функции, окажется меньше $p_F$. Поэтому имеем:

$$Im\Sigma(E) = \frac{g^2c}{8\pi}\int_{ck<E}\frac{1}{v_F}k^2dk = \frac{g^2cE^3}{24\pi v_Fc^3} \tag{3.24}$$

Вводя безразмерную константу электрон – фононного взаимодействия $\zeta=g^2\nu_F$, получаем:

$$Im\Sigma(E) = \frac{\zeta\pi E^3}{12p_F^2c^2} \tag{3.25}$$

При $E < 0$ вклад дает только второй член в (3.23). Вычисляя интеграл, снова получаем (3.25) – из-за электрон дырочной симметрии задачи (справедливой при $E \ll E_F$) мнимая часть $Im\Sigma(E)$ является нечетной функцией $E$.

Видим, что при $E \to 0$ имеем $Im\Sigma(E) \ll E$, так что электрон – фононное взаимодействие *не разрушает* фермижидкостную картину, причем в силу $E^3$ зависимости затухания роль фононов при $E \to 0$ вообще становится пренебрежимой по сравнению с обсуждавшимся выше затуханием от электрон – электронных столкновений, которое $\sim E^2$. В тоже время ясно, что это утверждение справедливо лишь при $E \to 0$ $(T \to 0)$.

- Случай $E \gg \omega_D$

В этом случае интегрирование по $p_1$ в (3.23) не создает ограничений на область интегрирования по $k$, которая распространяется теперь вплоть до $k = k_D$. Вычисляя интеграл типа (3.24), получим:

$$Im\Sigma(E) = \frac{g^2}{8\pi v_F} c \frac{k_D^3}{3} signE = \frac{g^2 k_D^3 mc}{24\pi p_F} signE \tag{3.26}$$

Выражая опять затухание через безразмерную константу $\zeta$, имеем:

$$Im\Sigma(E) = \frac{\zeta\pi k_D^3 c}{12 p_F^2} signE \tag{3.27}$$

Нетрудно видеть, что в данном пределе $Im\Sigma \sim \zeta\omega_D$. Таким образом даже при $\zeta \sim 1$ фононная перенормировка мала в силу $\omega_D \ll E_F$.

Перейдем теперь к расчету $Re\Sigma(E)$. Из (3.22) имеем:

$$Re\Sigma(E) = -\frac{g^2 c}{8\pi^2}\left\{\int_{p_1>p_F} \frac{k^2 dk dp_1}{E - ck - v_F(p_1 - p_F)} + \int_{p_1<p_F} \frac{k^2 dk dp_1}{E + ck - v_F(p_1 - p_F)}\right\} = \\ = -\frac{g^2 c}{8\pi^2}\int_{k<k_D} dk k^2 I_1(k) \tag{3.28}$$

где

$$I_1(k) = \int_{p_1>p_F} \frac{dp_1}{E - ck - v_F(p_1 - p_F)} + \int_{p_1<p_F} \frac{dp_1}{E + ck - v_F(p_1 - p_F)} \tag{3.29}$$

Формально первый интеграл расходится, но эта расходимость нефизическая, поскольку при большой разнице $p_1$ и $p$ нужно учитывать отклонение электронного спектра от используемого нами линейного приближения (а также и конечную ширину зоны). Поэтому можно просто обрезать интегрирование на $p_1 = p^* \sim p_F$. Точный выбор этого параметра обрезания несуществен, он не влияет на выражение для спектра, а приводит лишь к перенормировке химпотенциала (вкладу в $Re\Sigma(0)$). Таким образом получаем:

$$I_1(k) = \frac{1}{v_F}\ln\left|\frac{E + ck}{E + ck + v_F p_F}\right| + \frac{1}{v_F}\ln\left|\frac{E - ck - v_F(p^* - p_F)}{E - ck}\right| \tag{3.30}$$

Вычитая перенормировку химпотенциала $\delta\mu = \Sigma(0)$, получаем:

$$Re(\Sigma(E) - \Sigma(0)) = \frac{g^2 c}{8\pi^2}\int dk k^2 \frac{m}{p_F}\ln\left|\frac{E - ck}{E + ck}\right| \tag{3.31}$$

Характерная особенность собственно – энергетической части электрона, обусловленной электрон – фононным взаимодействием — отсутствие зависимости от импульса $p$. Это связано с "медленностью" фононов, по сравнению с электронами, приводящей к локальности процессов поглощения и испускания. Рассмотрим снова предельное поведение при $E \ll \omega_D$ и $E \gg \omega_D$.

- Случай $E \ll \omega_D$

В этом случае можно логарифм в (3.31) разложить, считая, что $E \ll ck$. Тогда имеем:

$$Re(\Sigma(E) - \Sigma(0)) = -\frac{2mg^2E}{8\pi^2 p_F}\int_0^{k_D} dkk = -\frac{mg^2k_D^2}{8\pi^2 p_F}E = -\frac{\zeta}{4}\frac{k_D^2}{p_F^2}E \equiv -\lambda E \tag{3.32}$$

где ввели константу перенормировки $\lambda = \frac{\zeta k_D^2}{4p_F^2} \sim \zeta$.

- Случай $E \gg \omega_D$

Теперь имеем $E \gg ck$, так что снова разлагаем логарифм в (3.31) и получаем:

$$Re(\Sigma(E) - \Sigma(0)) = -\frac{mg^2c^2}{4\pi^2 p_F}\int_0^{k_D}\frac{k^3dk}{E} = -\frac{mg^2c^2k_D^4}{16\pi^2 p_F E} = -\frac{\zeta c^2 k_D^4}{8p_F^2 E} \tag{3.33}$$

так что при $E \sim \omega_D$ рост $Re\Sigma(E)$ с энергией сменяется убыванием.

Спектр квазичастиц в области $E \ll \omega_D$ определяем из уравнения:

$$E - \xi(p) = Re(\Sigma(E) - \Sigma(0)) \tag{3.34}$$

где $\xi(p) = \frac{p^2}{2m} - \mu$. Тогда сразу же получаем:

$$E = \frac{p^2}{2m^*} - E_F \qquad E_F = \frac{p_F^2}{2m^*} \tag{3.35}$$

где эффективная масса определяется как:

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{\zeta k_D^2}{4p_F^2} \equiv 1 + \lambda \tag{3.36}$$

Поэтому, определенную таким образом $\lambda$ можно назвать константой перенормировки массы. Таким образом, электрон за счет взаимодействия с фононами эффективно "утяжеляется". Соответственно "подрастает" плотность состояний на уровне Ферми ($\sim m^*$) и электронный вклад в теплоемкость.

Рассмотрим теперь поведение собственно энергетической части электрона при конечных температурах. Это полезно и методически, поскольку при этом мы изучим общий метод суммирования по мацубаровским частотам. Имеем:

$$\Sigma(\varepsilon\mathbf{p}) = -\frac{g^2T}{(2\pi)^3}\sum_{\varepsilon_1}\int d^3p_1 G(\varepsilon_1\mathbf{p}_1)D(\varepsilon - \varepsilon_1, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \tag{3.37}$$

Все частоты здесь мацубаровские!

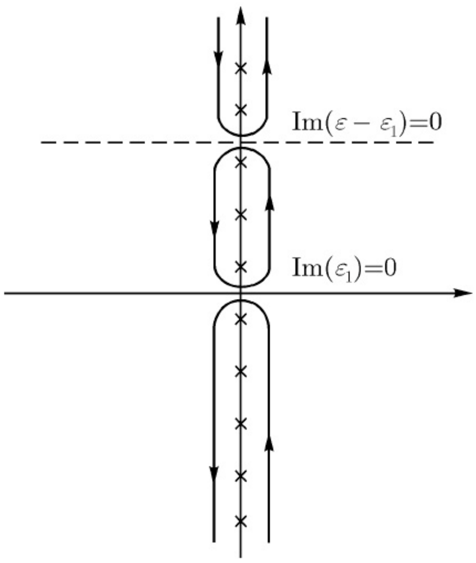



Рис. 3.3: Контур интегрирования, используемый при суммировании по мацубаровским частотам.

Общий метод вычисления сумм по мацубаровским частотам основан на использовании следующего приема [5]. Рассмотрим случай суммирования по нечетным (фермионным) частотам $i\varepsilon_n = i(2n+1)\pi T$. Соответствующую сумму можно записать в виде контурного интеграла в комплексной плоскости частоты $\varepsilon$:

$$T\sum_{n=-\infty}^{\infty} F(i\varepsilon_n) = -\frac{1}{2\pi i}\int_C d\varepsilon \frac{F(\varepsilon)}{e^{\beta\varepsilon}+1} = \frac{1}{2\pi i}\int_C d\varepsilon \frac{F(\varepsilon)}{e^{-\beta\varepsilon}+1} = \frac{1}{4\pi i}\int_C d\varepsilon F(\varepsilon) th\frac{\varepsilon}{2T} \tag{3.38}$$

где контур интегрирования $C$ окружает мнимую ось, как это показано на Рис. 3.3 и внутри которого, по предположению, нет никаких особенностей функции $F(\varepsilon)$. Справедливость (3.38) вытекает из теоремы Коши и того обстоятельства, что $e^{\beta\varepsilon}+1$ и $e^{-\beta\varepsilon}+1$ (где, как обычно, $\beta = \frac{1}{T}$) имеют простые нули в точках $\varepsilon = i\varepsilon_n$, что приводит к существованию соответствующих простых полюсов подинтегрального выражения (3.38) в соответствующих точках на мнимой оси. Аналогичная ситуация возникает и при использовании $th\frac{\varepsilon}{2T}$ в последнем равенстве в (3.38).

Для вычисления сумм по четным (бозонным) частотам $i\omega_m = i2\pi Tm$ можно воспользоваться совершенно аналогичным равенством:

$$T\sum_{m=-\infty}^{\infty} F(i\omega_m) = \frac{1}{2\pi i}\int_C d\omega \frac{F(\omega)}{e^{\beta\omega}-1} = -\frac{1}{2\pi i}\int_C d\omega \frac{F(\omega)}{e^{-\beta\omega}-1} = \frac{1}{4\pi i}\int_C d\omega F(\omega) cth\frac{\omega}{2T} \tag{3.39}$$

где полюса подинтегрального выражения расположены в точках $i\omega_m = i2\pi Tm$.

Дальнейший прием, как правило, состоит в том, что контур интегрирования $C$ “растягивается” на бесконечность, при этом возникают подлежащие вычислению вклады от особенностей функций $F(\varepsilon)$ или $F(\omega)$, которые обходит “растянутый” контур $C$. В большинстве случаев, остающийся интеграл по окружности бесконечного радиуса исчезает из-за быстрого убывания $F(\varepsilon)$ и $F(\omega)$ на этом контуре.

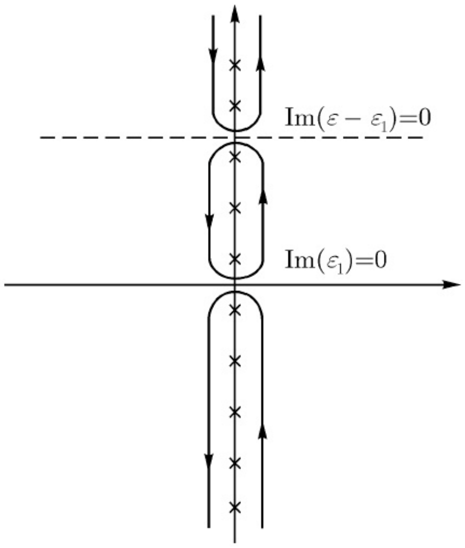



Рис. 3.4: Контур интегрирования, используемый при суммировании по мацубаровским частотам в собственно – энергетической части электрона.

Проиллюстрируем такой метод счета на примере вычисления (3.37). Здесь нам нужно вычислить сумму по частотам следующего вида:

$$S = T\sum_{\varepsilon_1} G(\varepsilon_1 \mathbf{p}_1)D(\varepsilon-\varepsilon_1, \mathbf{p}-\mathbf{p}_1) \tag{3.40}$$

где суммирование идет по фермионным частотам $i\varepsilon_n = i(2n+1)\pi T$. Поэтому, нужно поступить в духе (3.38). Для определенности будем считать, что $\varepsilon$ лежит в верхней полуплоскости[2]. Рассмотрим функцию:

$$f(z) = G(z, \mathbf{p}_1)D(\varepsilon - z, \mathbf{p}-\mathbf{p}_1)th\frac{z}{2T} \tag{3.41}$$

которая имеет полюса при значениях $z = i\varepsilon_n = i(2n+1)\pi T$ и вычислим интеграл:

$$I = \int_C dz f(z) \tag{3.42}$$

взятый по контуру $C$, показанному на Рис. 3.4, где обходятся прямые $Im(\varepsilon-\varepsilon_1)=0$ и $Im\varepsilon_1 = 0$, соответствующие *разрезам* точных функций Грина в (3.40)[3]. Во всей комплексной плоскости, кроме этих разрезов, функция $f(z)$ аналитична. Интеграл (3.42) можно теперь посчитать вычетами. Вычет $f(z)$ в полюсе $z_n = i(2n+1)\pi T$ равен просто:

$$Res_{z=z_n} f(z) = 2TG(z_n, \mathbf{p}_1)D(\varepsilon - z_n, \mathbf{p}-\mathbf{p}_1) \tag{3.43}$$

так что интеграл (3.42) сводится к $I = 4\pi i S$ и определяет интересующую нас сумму (3.40). С другой стороны, мы можем перейти к “растянутому” контуру интегрирования, показанному на Рис. 3.5. Теперь наш интеграл сводится к интегралам по

[2] В конечном счете мы хотим сделать аналитическое продолжение $i\varepsilon_n \to \varepsilon + i\delta$!

[3] Аналитическое продолжение из верхней и нижней полуплоскостей дает *разные* функции Грина $G^R$ и $G^A$ соответственно [1].

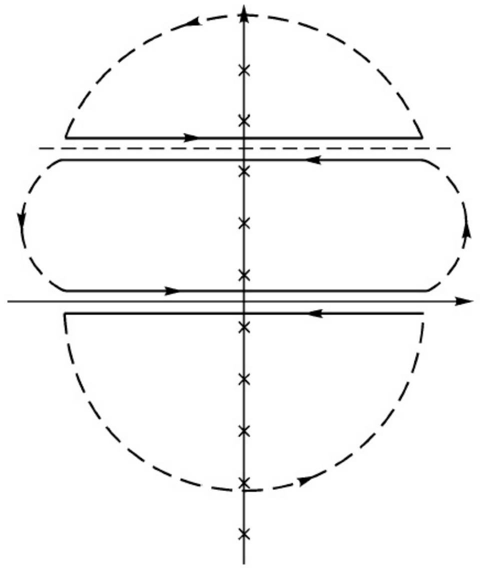


Рис. 3.5: "Растянутый"контур интегрирования, используемый при суммировании по мацубаровским частотам в собственно – энергетической части электрона.

прямым, показанным на Рис. 3.5 и идущим вдоль разрезов, так что вклад разных "берегов" каждого из разрезов определяется соответствующими скачками:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 \Big\{ (G^R(\varepsilon_1 \mathbf{p}_1) - G^A(\varepsilon_1 \mathbf{p}_1)) D^A(\varepsilon - \varepsilon_1, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) th \frac{\varepsilon_1}{2T} - \\ - G^R(-\varepsilon_1 + \varepsilon, \mathbf{p}_1)(D^R(\varepsilon_1, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) - D^A(\varepsilon_1, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)) th \frac{\varepsilon - \varepsilon_1}{2T} \Big\} \tag{3.44}$$

Учитывая, что $\varepsilon = i(2n+1)\pi T$, можем написать $th\frac{\varepsilon - \varepsilon_1}{2T} = -cth\frac{\varepsilon_1}{2T}$. Кроме того, мы используем:

$$G^R(\varepsilon \mathbf{p}) - G^A(\varepsilon \mathbf{p}) = 2iImG^R(\varepsilon \mathbf{p}) \tag{3.45}$$

и дисперсионное соотношение [1]:

$$G^{R(A)}(\varepsilon \mathbf{p}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ImG^{R(A)}(\omega \mathbf{p})}{\omega - \varepsilon \mp i\delta} d\omega \tag{3.46}$$

Подставляя эти соотношения в (3.44), получаем:

$$\Sigma(\varepsilon \mathbf{p}) = \frac{g^2}{(2\pi)^4 \pi} \int d\varepsilon_1 d\omega d^3 p_1 \Big\{ \frac{ImG^R(\varepsilon_1 \mathbf{p}_1) ImD^R(\omega \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)}{\omega - \varepsilon + \varepsilon_1 - i\delta} th \frac{\varepsilon_1}{2T} + \\ + \frac{ImG^R(\omega \mathbf{p}_1) ImD^R(\varepsilon_1 \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)}{\omega - \varepsilon + \varepsilon_1 - i\delta} cth \frac{\varepsilon_1}{2T} \Big\} \tag{3.47}$$

Меняя местами переменные интегрирования $\varepsilon_1$ и $\omega$ во втором слагаемом, запишем окончательно:

$$\Sigma(\varepsilon \mathbf{p}) = \frac{g^2}{(2\pi)^4 \pi} \int d\varepsilon_1 d\omega d^3 p_1 \frac{ImG^R(\varepsilon_1 \mathbf{p}_1) ImD^R(\omega \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)}{\omega - \varepsilon + \varepsilon_1 - i\delta} \left( th \frac{\varepsilon_1}{2T} + cth \frac{\omega}{2T} \right) \tag{3.48}$$

Здесь интегрирование уже ведется по вещественным $\varepsilon_1$ и $\omega$. После достаточно громоздкого анализа [1], можно показать, что из (3.48) при $\varepsilon \ll T \ll \omega_D$ (после аналитического продолжения $i\varepsilon_n \to \varepsilon + i\delta$) следует:

$$Im\Sigma^R(\varepsilon) \sim \zeta \frac{T^3}{c^2 p_F^2} \tag{3.49}$$

так что, фактически, затухание электронов за счет электрон – фононного взаимодействия при $\varepsilon \ll \omega_D$ и $T \ll \omega_D$ можно записать единым образом как (вспомним (3.25)):

$$Im\Sigma^R(\varepsilon) \sim \zeta \frac{Max[T^3, \varepsilon^3]}{c^2 p_F^2} \tag{3.50}$$

При $\varepsilon \gg \omega_D$ из (3.48) следует:

$$Im\Sigma^R(\varepsilon) = const \sim \omega_D \tag{3.51}$$

Из этих формул ясно, что затухание квазичастиц (электронов) сравнивается с их энергией при $\varepsilon \sim \omega_D$. В тоже время ясно, что при дальнейшем росте энергии возбуждений затухание за счет взаимодействия с фононами перестает расти и становится опять меньше энергии квазичастиц. Таким образом имеется две области, в которых понятие квазичастиц имеет смысл: $|\varepsilon| \ll \omega_D$ и $|\varepsilon| \gg \omega_D$. В обеих этих областях энергия электронов имеет вид $v_F(p - p_F)$, но скорости $v_F$ (эффективные массы) различны.

## 3.3 Теорема Мигдала.

Выше, при расчетах собственно – энергетической части электрона за счет электрон – фононного взаимодействия, мы ограничились простейшим вкладом, показанным на Рис. 3.2. Казалось – бы нужно учесть и другие графики, связанные с поправками к одной из вершин этой диаграммы. Фактически, этого делать не надо, поскольку соответствующие поправки к вершинной части малы по адиабатическому параметру $\frac{\omega_D}{E_F} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} \ll 1$ (теорема Мигдала) (А.Б.Мигдал, 1957). Покажем это, оценив простейшую поправку к вершине, определяемую графиком Рис. 3.6. Запишем, аналитическое выражение, соответствующее этой диаграмме:

$$\Gamma^{(1)} = -g^3 \int G(\mathbf{p}_1 \varepsilon_1) G(\mathbf{p}_1 + \mathbf{k}, \varepsilon_1 + \omega) D(\varepsilon - \varepsilon_1, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \frac{d^3 p_1 d\varepsilon_1}{(2\pi)^4} \tag{3.52}$$

Проведем грубую оценку этого выражения. Рассмотрим сначала интеграл по $\varepsilon_1$. Полагая, что характерная передача импульса за счет обмена фононом порядка $k_D \sim p_F$, и учитывая, что $D(\varepsilon - \varepsilon_1)$ квадратично спадает в области $|\varepsilon - \varepsilon_1| \gg \omega_D$, получаем, что основной вклад в интеграл дает область $|\varepsilon - \varepsilon_1| \sim \omega_D$. Тогда интеграл по $\varepsilon_1$ порядка $\omega_D$, и мы можем написать:

$$\Gamma^{(1)} \sim g^3 \omega_D \int \frac{d^3 p_1}{(\varepsilon_1 - \xi(\mathbf{p}_1) + i\delta sign\xi(\mathbf{p}_1))(\varepsilon_1 + \omega - \xi(\mathbf{p}_1 + \mathbf{k}) + i\delta sign\xi(\mathbf{p}_1 + \mathbf{k}))} \tag{3.53}$$

Рассмотрим оставшийся интеграл по $p_1$. Характерная передача импульса и здесь порядка $k_D \sim p_F$. Поэтому можно считать все знаменатели $\sim E_F$, а $\int d^3 p_1 \sim p_F^3$. Тогда имеем:

$$\Gamma^{(1)} \sim g^3 \omega_D \frac{p_F^2}{v_F} \frac{E_F}{E_F^2} \sim g^3 \frac{p_F^2}{v_F E_F} \omega_D \tag{3.54}$$

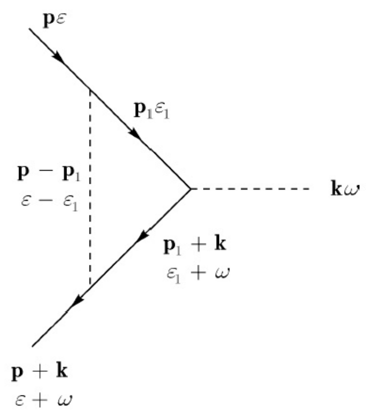



Рис. 3.6: Простейшая поправка к вершине электрон – фононного взаимодействия.

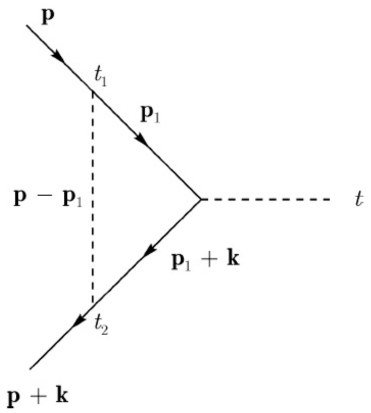



Рис. 3.7: Простейшая поправка к вершине электрон – фононного взаимодействия в “импульсно – временном” представлении.

Относительная величина этой поправки:

$$\frac{\Gamma^{(1)}}{g} \sim g^2 \frac{p_F^2}{v_F E_F}\omega_D \sim \zeta\frac{\omega_D}{E_F} \sim \zeta\sqrt{\frac{m}{M}} \tag{3.55}$$

где использовали $\frac{\omega_D}{E_F} \sim \sqrt{\frac{m}{M}}$. Электроны много легче ионов (ядер), поэтому рассмотренная поправка к вершинной части действительно пренебрежимо мала! Проведенное рассмотрение не совсем строго, например, оно ошибочно при $\omega \sim v_F k$ и $\omega \ll \omega_D$, когда полюса функций Грина в (3.53) сближаются и надо проводить более аккуратный анализ. Однако, в большинстве случаев, вклад этой области несущественен в силу $c \ll v_F$.

Чтобы лучше понять смысл происходящего, проведем оценку вершинной поправки в смешанном “импульсно – временном” представлении. Это позволит проследить роль разных масштабов времени. В связи с этим, введем сначала соответствующие функции Грина фонона и электрона:

$$D(\mathbf{k}t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} D(\omega\mathbf{k}) e^{-i\omega t} = -\frac{ick}{2} e^{-ick|t|} \tag{3.56}$$

$$G(\mathbf{p}t) = -ie^{-i\xi(p)t} \begin{cases} \theta(\xi(p)) & \text{при} \quad t > 0 \\ -\theta(-\xi(p)) & \text{при} \quad t < 0 \end{cases} \tag{3.57}$$

Заметим, что $D(\mathbf{k}t)$ является гораздо более медленно меняющейся функцией $t$, чем $G(\mathbf{p}t)$.

Запишем теперь вершинную поправку Рис. 3.7 в аналитическом виде:

$$\Gamma^{(1)} = -g^3 \int \frac{d^3p_1}{(2\pi)^3} \int dt G(\mathbf{p}_1, t - t_1) G(\mathbf{p}_1 + \mathbf{k}, t_2 - t) D(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1, t_1 - t_2) \tag{3.58}$$

При $p_1 \sim p_F$ электронные функции Грина существенно меняются за характерное время $\sim E_F^{-1}$. Поэтому можно считать, что в (3.58) $|t_1 - t| \sim |t_2 - t| \sim |t_1 - t_2| \sim E_F^{-1}$. Фононная функция Грина за такие времена практически не меняется и ее можно взять при $t_1 \approx t_2$. Поэтому она просто пропорциональна $c|\mathbf{p} - \mathbf{p}_1| \sim \omega_D$, что и приводит к возникновению параметра малости $\frac{\omega_D}{E_F}$. Иными словами, электроны быстро (за время $\sim E_F^{-1}$) поглощают фонон, подстраиваясь под деформацию решетки. При этом они не успевают за счет своего движения "раскачать" решетку – на это требуется время $\omega_D^{-1}$. Это есть проявление адиабатичности движения ионов решетки – в силу своей большой массы ионы движутся медленно и электроны всегда успевают "подстроиться" под их локальную конфигурацию.

Теорема Мигдала важна именно потому, что позволяет выделить из множества диаграмм только существенные вклады без использования предположения о малости самой константы электрон – фононного взаимодействия.

## 3.4 Собственно – энергетическая часть и спектр фонона.

Вернемся к рассмотрению уравнений для фононной функции Грина (3.16), (3.17) и (3.18), определяющих спектр фононов в системе с взаимодействием (металле). Воспользуемся простейшим приближением для поляризационного оператора электронного газа и запишем:

$$g^2\Pi_0(\omega\mathbf{k}) = -\frac{2ig^2}{(2\pi)^4} \int \frac{dEd^3p}{(E - \xi(\mathbf{p}) + i\delta sign\xi(\mathbf{p}))(E + \omega - \xi(\mathbf{p}+\mathbf{k}) + i\delta Sign\xi(\mathbf{p}+\mathbf{k}))} \tag{3.59}$$

Выше мы уже провели расчет такого поляризационного оператора и получили выражение (2.24), используя которое имеем:

$$g^2\Pi_0(\omega\mathbf{k}) = -\frac{g^2 m p_F}{\pi^2} \left\{ 1 - \frac{\omega}{2v_F k} \ln \left| \frac{\omega + v_F k}{\omega - v_F k} \right| + \frac{i\pi|\omega|}{2v_F k} \theta \left( 1 - \frac{|\omega|}{v_F k} \right) \right\} \tag{3.60}$$

Мы уже видели в (3.17), что фононная функция Грина в системе с взаимодействием определяется из уравнения Дайсона вида:

$$D^{-1}(\omega\mathbf{k}) = D_0^{-1}(\omega\mathbf{k}) - g^2\Pi(\omega\mathbf{k}) \tag{3.61}$$

Соответственно, спектр фононов определяется уравнением $D^{-1}(\omega\mathbf{k}) = 0$. Поскольку скорость звука гораздо меньше скорости электронов на поверхности Ферми, то можно спокойно считать, что $\omega \ll v_F k$. Тогда поляризационный оператор, определяющий фононную собственно – энергетическую часть, достаточно взять в статическом пределе ($\omega = 0$) и написать:

$$g^2\Pi_0 \approx -\frac{g^2 m p_F}{\pi^2} = -2\zeta \tag{3.62}$$

Соответственно (3.61) сводится к:

$$D^{-1}(\omega\mathbf{k}) = D_0^{-1}(\omega\mathbf{k}) - g^2\Pi = \frac{\omega^2 - c_0^2 k^2}{c_0^2 k^2} + 2\zeta \tag{3.63}$$

где $c_0$ – "затравочная скорость звука", а "перенормированный" спектр фононов имеет вид $\omega = ck$, где скорость звука определяется как:

$$c^2 = c_0^2(1 - 2\zeta) \tag{3.64}$$

Видим, что за счет электрон – фононного взаимодействия происходит "смягчение" решетки (уменьшение энергии фононов), в силу быстрого "подстраивания" электронов под деформацию решетки, происходит их скапливание в минимумах деформационного потенциала с общим понижением энергии системы.

Может показаться, что из (3.64) следует неустойчивость решетки ($\omega^2 < 0!$) при $\zeta > 1/2$. Однако, фактически, эта неустойчивость нефизическая. Дело в том, что более детальный анализ [14] показывает, что истинная константа электрон – фононного взаимодействия $\lambda$ связана с введенной выше константой взаимодействия $\zeta$ следующим соотношением:

$$\lambda = \zeta\frac{\omega_0^2}{\omega^2} = \frac{\zeta}{1 - 2\zeta} \tag{3.65}$$

Из этого выражения ясно, что $\lambda \approx \zeta$ при $\zeta \ll 1$, но при увеличении $\zeta$ константа связи $\lambda$ непрерывно возрастает, обращаясь в бесконечность в самой точке "неустойчивости". Поэтому условие $\zeta < 1/2$, фактически, не накладывает ограничений на величину $\lambda$. Вообще, надо заметить, что условие $\zeta < 1/2$, в некотором смысле, бессодержательно, поскольку в рамках обычной модели Фрелиха электрон – фононного взаимодействия не существует метода определения этой величины, а реально наблюдаемой является именно перенормированная константа $\lambda$. Из (3.65) можно написать обратную связь:

$$\zeta = \frac{\lambda}{1 + 2\lambda} \tag{3.66}$$

из которой видно, что при любых $\lambda > 0$ мы, фактически, имеем $\zeta < 1/2$.

Физический смысл "затравочных" параметров модели Фрелиха, в особенности, частоты $\omega_0(k) = c_0 k$, не вполне ясен, а реальный спектр фононов определяется рассмотренным выше уравнением Дайсона для фононной функции Грина, учитывающим взаимодействие с электронами, которое дает:

$$D(\omega\mathbf{k}) = \frac{\omega_0^2(k)}{\omega^2 - \omega^2(k) + i\delta} \tag{3.67}$$

где $\omega(k)$ – истинный фононный спектр. Тогда истинная константа электрон – фононного взаимодействия определяется [14] интегралом по $\mathbf{k}$ от $D(\omega = 0, \mathbf{k})$:

$$\lambda = \zeta\int_0^{2p_F} \frac{dkk}{2p_F^2}\frac{\omega_0^2(k)}{\omega^2(k)} \tag{3.68}$$

Если теперь пренебречь относительно слабой зависимостью $\Pi_0$ от $k$ и воспользоваться (3.62), то из (3.68) немедленно следует (3.65). Принято считать, что именно $\lambda$ входит, например, в известную формулу БКШ для температуры сверхпроводящего перехода [14].

Для того, чтобы найти затухание фононов, учтем теперь и мнимую часть поляризационного оператора (3.60):

$$g^2 Im\Pi_0(\omega\mathbf{k}) = -\pi\zeta\frac{|\omega|}{kv_F} \tag{3.69}$$

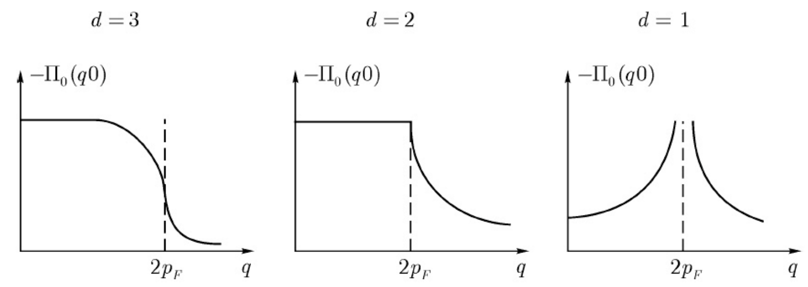



Рис. 3.8: Качественное поведение статического поляризационного оператора (в зависимости от $q$) газа свободных электронов для различных размерностей пространства.

Подставляя это выражение в уравнение Дайсона для фононной функции Грина, в котором теперь нужно искать решение для спектра в виде $\omega = ck + i\gamma$, нетрудно получить:

$$\gamma = \frac{\pi}{2}\zeta\frac{c^2}{v_F}k = \frac{\pi}{2}\zeta\frac{c}{v_F}\omega \tag{3.70}$$

Хотя затухание и оказывается пропорциональным частоте, фактически оно мало по сравнению с $Re\omega$ по параметру $c/v_F \sim \sqrt{m/M}$.

В обычных жидкостях и газах затухание звука по порядку величины равно:

$$\gamma \sim \frac{\eta\omega^2}{\rho c^3} \tag{3.71}$$

где $\eta$ – вязкость среды, а $\rho$ – ее плотность. Поэтому можно сказать, что в электрон – фононной системе эффективная вязкость электронного газа растет с уменьшением частоты: $\eta(\omega) \sim \omega^{-1}$. Физически, большая эффективная вязкость здесь связана с высокой плотностью электрон – дырочных возбуждений с энергией $\omega < ck$, которые возбуждаются фононами.

В предыдущей главе уже отмечалось, что при $q = 2p_F$ поляризационный оператор $\Pi_0(q0)$ имеет логарифмическую особенность в производной $\frac{\partial \Pi_0(q0)}{\partial q}|_{q=2p_F}$. Эта особенность становится более заметной для двумерной системы $d = 2$ и, особенно, в одномерном случае $d = 1$, когда имеется логарифмическая особенность в самом поляризационном операторе $\Pi_0(q0)$ (А.М.Афанасьев, Ю.М.Каган, 1962):

$$\Pi_0(q0) \sim \ln|q - 2p_F| \tag{3.72}$$

Качественное поведение $\Pi_0(q0)$ для различных размерностей показано на Рис. 3.8. Наличие таких особенностей приводит к важным следствиям. В самом деле, суть предыдущей дискуссии сводится к тому, что фононная функция Грина, с учетом взаимодействия с электронами, имеет вид:

$$D(\omega\mathbf{q}) = \frac{1}{D_0^{-1}(\omega\mathbf{q}) - g^2\Pi_0(\omega\mathbf{q})} = \frac{\omega_0^2(q)}{\omega^2 - \omega_0^2(q) - g^2\omega_0^2(q)\Pi_0(\omega q)} \tag{3.73}$$

так что спектр фононов имеет вид:

$$\omega^2(q) = \omega_0^2(q)[1 + g^2\Pi_0(\omega q)] \tag{3.74}$$

Тогда из $\Pi_0(q0) \to -\infty$ при $q = 2p_F$ (для случая $d = 1$) ясно, что частота фонона с $q = 2p_F$ становится *мнимой* ($\omega^2 < 0$), при любом (даже сколь – угодно

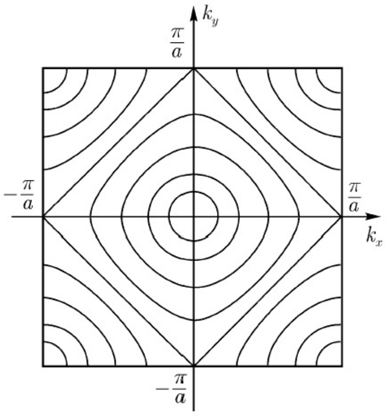



Рис. 3.9: Изоэнергетические поверхности, соответствующие простой модели спектра сильной связи для квадратной решетки.

малом) значении константы взаимодействия $g$. Это означает *неустойчивость* системы, приводящую к возникновению спонтанной (конечной) статической деформации (сверхструктуры) с волновым вектором $Q = 2p_F$ (т.е. с периодом $L = \frac{2\pi}{Q}$). Это так называемая *пайерлсовская* неустойчивость, к детальному рассмотрению которой мы еще вернемся в последней главе[4]. Даже для $d = 3$, когда особенность есть только у производной поляризационного оператора, все равно возникает аномалия фононного спектра при $q = 2p_F$ (W.Kohn, 1959) (так называемая "коновская" аномалия, для $d = 1$ иногда говорят о "гигантской" коновской аномалии). Такие аномалии действительно наблюдаются в фононных спектрах металлов в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов.

До сих пор, мы всегда имели в виду ситуацию с изотропным электронным спектром типа $\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m^*}$. В тоже время, в реальных материалах, электронный спектр может быть анизотропным, а соответствующие поверхности Ферми не обязательно являются сферами ($d = 3$) или окружностями ($d = 2$). Часто они имеют довольно сложную форму. В частности, на поверхности Ферми могут возникать *плоские* участки. Например, для $d = 2$ и квадратной решетки, в приближении сильной связи имеем спектр вида:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu = -2t(\cos p_x a + \cos p_y a) - \mu \tag{3.75}$$

где $t$ – интеграл переноса, который считается отличным от нуля только для ближайших соседей. Изоэнергетические поверхности в зоне Бриллюэна, соответствующие такому спектру при различных значениях химпотенциала $\mu$ (концентрации электронов), показаны на Рис. 3.9. В частности, для $\mu = 0$ (полузаполненная зона, один электрон на атом), поверхность Ферми имеет вид квадрата. Достаточно простой расчет показывает, что в этом случае $\Pi_0(\mathbf{q}0)$ имеет при $\mathbf{q} \to \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ особенность "одномерного" типа: $\Pi_0(\mathbf{q}0) \sim \ln|\mathbf{q} - \mathbf{Q}|$, где $\mathbf{Q} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$, что опять приводит к "гигантской" коновской аномалии фононного спектра и структурному переходу пайерлсовского типа (удвоению периода решетки).

В более общей ситуации, для возникновения подобных "гигантских" аномалий требуется специальное свойство поверхности Ферми, именуемое "нестингом" (nesting).

[4]Для $d = 1$ такая неустойчивость приводит к образованию щели в энергетическом спектре электронов при $\pm p_F$, т.е. к переходу металлической цепочки в диэлектрическое состояние.

Это свойство означает, что определенные участки поверхности Ферми накладываются друг на друга (конгруэнтны) при сдвиге на определенный вектор $\mathbf{Q}$ (вектор нестинга). В приведенном выше примере $\mathbf{Q} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$, но возможны и более общие случаи. Математически требуется только выполнение следующего условия на спектр электронов:

$$\varepsilon(\mathbf{p}+\mathbf{Q}) - \mu = -\varepsilon(\mathbf{p}) + \mu \tag{3.76}$$

что и называют условием нестинга. Видим, например, что спектр (3.75) удовлетворяет этому условию для $\mu = 0$ (полузаполненная зона) и $\mathbf{Q} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$. Аналогичным образом, этому условию удовлетворяет спектр приближения сильной связи для ПК решетки ($d = 3$), аналогичный (3.75):

$$\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu = -2t(\cos p_x a + \cos p_y a + \cos p_z a) - \mu \tag{3.77}$$

при $\mu = 0$ и $\mathbf{Q} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$. Поверхность Ферми в этом случае обладает свойством нестинга, хотя и не имеет плоских участков.

Во всех случаях с нестингом, вычисление поляризационного оператора приводит к появлению расходимости при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ и, соответственно, к появлению гигантской коновской аномалии фононного спектра и соответствующей неустойчивости решетки (структурному фазовому переходу с возникновением сверхструктуры с волновым вектором $\mathbf{Q}$.)

## 3.5 Плазменная модель металла.

Рассмотрим простейшую “последовательную” модель металла и электрон – фононного взаимодействия [5, 14].Начнем с плазмы, состоящей из электронов и ионов с неэкранированным кулоновским взаимодействием. Собственными модами колебаний в такой системе являются, фактически, соответствующие плазменные колебания электронов и ионов. Покажем как последовательный учет электронной экранировки позволяет ввести “обычные” фононы и описать возникающее при этом электрон – фононное взаимодействие. Исходный электрон – ионный гамильтониан имеет вид:

$$\begin{aligned} H = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}\lambda} \Omega_{\mathbf{q}\lambda} \left( b^+_{\mathbf{q}\lambda} b_{\mathbf{q}\lambda} + \frac{1}{2} \right) + \\ + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\lambda} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\lambda} a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} \left( b_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'\lambda} + b^+_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}\lambda} \right) + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{k}\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} a^+_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{p}} \end{aligned} \tag{3.78}$$

где $V_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi e^2}{q^2}$, а $E_{\mathbf{k}}$ – энергия блоховского электрона, определяемая уравнением Шредингера:

$$\left\{ \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + \sum_n V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + U_H(\mathbf{r}) \right\} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{3.79}$$

где $V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ — потенциал электрон – ионного взаимодействия, $U_H(\mathbf{r})$ — хартриевский вклад от межэлектронного взаимодействия, $\Omega_{\mathbf{q}\lambda}$ — “затравочные” частоты колебаний плазмы ионов.

В простейшей *модели желе*, в которой ионы считаются однородной бесструктурной средой, имеем:

$$\Omega^2_{q\lambda} = \frac{4\pi n(Ze)^2}{M} \tag{3.80}$$

где $n$ – плотность ионов, $Z$ – их заряд, а $M$ – их масса. В модели желе это есть единственная (продольная) мода ионных колебаний[5].

Константа затравочного электрон – фононного взаимодействия $g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\lambda}$ определяется как:

$$g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\lambda} = -\left(\frac{n}{M\Omega^2_{\mathbf{k}\lambda}}\right)^{1/2} < \mathbf{k}'|\nabla_i V_{ei}|\mathbf{k} > \mathbf{e}_{\mathbf{q}\lambda}, \qquad (\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}') \tag{3.82}$$

где $\mathbf{e}_{\mathbf{q}\lambda}$ – вектор поляризации затравочных фононов. Нетрудно понять, что в простейшей модели типа желе эта затравочная константа, точнее $g^2_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\lambda}$, имеет сингулярность “кулоновского” типа:

$$g^2_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\lambda} \sim \frac{1}{(\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2} \tag{3.83}$$

Теперь нужно перейти к перенормированным величинам, с учетом экранировки, устраняющей такие сингулярности. Для кулоновского взаимодействия электронов, как мы видели выше, можно сразу написать RPA – выражение:

$$\mathcal{V}(q\omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2\epsilon_e(q\omega)} \tag{3.84}$$

где

$$\epsilon_e(q\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2}\Pi_0(q\omega) \tag{3.85}$$

– диэлектрическая проницаемость газа свободных электронов. Соответствующее диаграммное представление приведено на Рис. 2.4(b). Аналогичным образом, как это показано на Рис. 3.10, можно описать и экранирование электрон – фононной вершины:

$$\tilde{g}(q,\lambda) = g + gV_q\Pi_0 + gV_q\Pi_0V_q\Pi_0 + ... = \frac{g(q,\lambda)}{\epsilon_e(q\omega)} \tag{3.86}$$

а для определения “истинного” фононного спектра написать уравнение Дайсона, показанное на Рис. 3.11:

$$\begin{aligned} D^{-1}(q\lambda,\omega) &= D_0^{-1}(q\lambda,\omega) - g^2\Pi_0(q\omega) - g^2\Pi_0(q\omega)V_q\Pi_0(q\omega) - ... = \\ &= D_0^{-1}(q\lambda,\omega) - \frac{g^2(q,\lambda)}{V_q}\left(\frac{1}{\epsilon_e(q\omega)} - 1\right) \end{aligned} \tag{3.87}$$

где

$$D_0(q\lambda,\omega) = \frac{\Omega^2_{q\lambda}}{\omega^2 - \Omega^2_{q\lambda} + i\delta} \tag{3.88}$$

[5] В кристалле существует три ветви ионных колебаний $\lambda = 1,2,3$. Из них две поперечные имеют звуковой характер, а затравочная продольная ветвь имеет характер оптического плазменного колебания. При этом выполняется правило сумм:

$$\sum_\lambda \Omega^2_{q\lambda} = \frac{4\pi n(Ze)^2}{M} \tag{3.81}$$

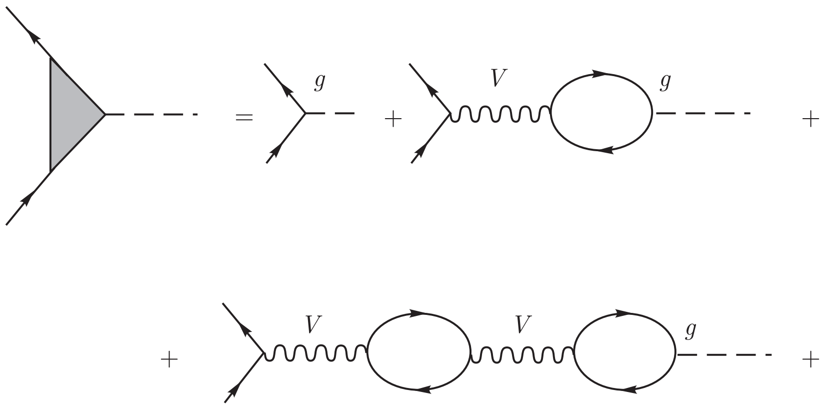



Рис. 3.10: Экранировка вершины электрон – фононного взаимодействия.

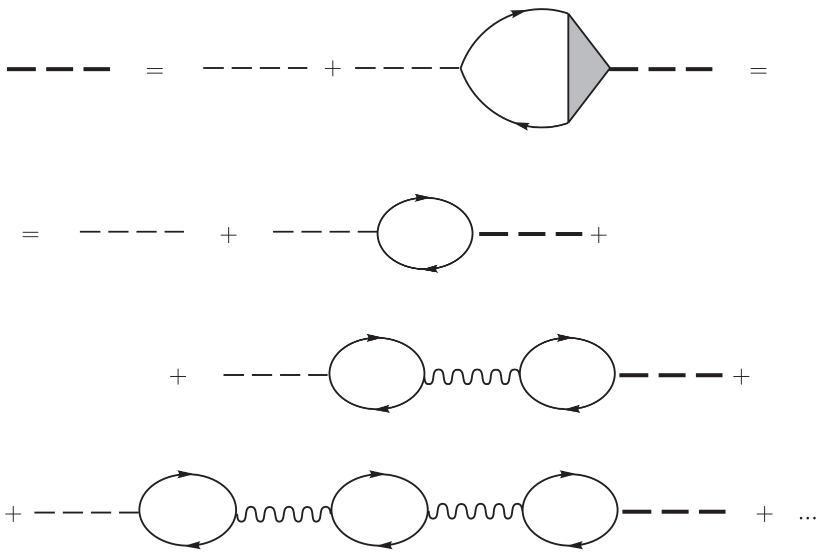



Рис. 3.11: Уравнение Дайсона для фононной функции Грина в обобщенной модели желе.

Тогда из (3.85), (3.87) и (3.88) немедленно получаем:

$$D(q\lambda,\omega)=\frac{\Omega_{q\lambda}^2}{\omega^2-\frac{g^2(q\lambda)\Omega_{q\lambda}^2}{V_q\epsilon_e(q0)}-\Omega_{q\lambda}^2\left[1-\frac{g^2(q\lambda)}{V_q}\right]+i\delta} \tag{3.89}$$

В этом выражении мы пренебрегли частотной зависимостью $\epsilon_e(q\omega)$, поскольку при малых $\omega$ порядка фононных частот эта зависимость несущественна.

В простой модели желе, как легко видеть из (3.80) и (3.82), выполняется равенство:

$$\frac{g^2(q\lambda)}{V_q}=1 \tag{3.90}$$

В этом случае (3.89) упрощается до:

$$D(q\lambda,\omega)=\frac{\Omega_{q\lambda}^2}{\omega^2-\frac{\Omega_{q\lambda}^2}{\epsilon_e(q0)}+i\delta} \tag{3.91}$$

Полюса этого выражения определяют частоты перенормированных фононов (D.Bohm, T.Staver, 1950):

$$\omega^2(q\lambda)=\frac{\Omega_{q\lambda}^2}{\epsilon_e(q0)}\approx\frac{\Omega_{q\lambda}^2}{1+\frac{\kappa_D^2}{q^2}}=\frac{mZ}{3M}v_F^2q^2 \tag{3.92}$$

где учли (2.28) и (2.29), где плотность электронов следует взять равной $Zn$ (для обеспечения электронейтральности). Видим, что перенормированные фононы в модели желе имеют акустический закон дисперсии со скоростью звука $c=\left(\frac{mZ}{3M}\right)^{1/2}v_F$. В этом же можно убедиться и в более общем (чем модель желе) случае, когда потенциал $V_{ei}(q)$ отличается от чисто кулоновского, поскольку при малых $q$ из условия электронейтральности следует, что $V_{ei}(q)$ все равно равен просто $Ze^2/q^2$.

В рассматриваемой модели можно еще определить и полное (эффективное) межэлектронное взаимодействие, которое нужно, например, для вычисления сверхпроводящих свойств металлов. Это взаимодействие изображается диаграммами, показанными на Рис. 3.12 и равно:

$$V_{eff}(q\omega)=\frac{4\pi e^2}{q^2\epsilon_e(q\omega)}+\frac{g^2(q\lambda)}{\epsilon_e(q0)}\frac{\Omega_{q\lambda}^2}{\omega-\omega^2(q\lambda)} \tag{3.93}$$

где $\omega^2(q\lambda)$ – спектр перенормированных фононов, следующий из (3.87):

$$\omega^2(q\lambda)=\Omega_{q\lambda}^2\left\{1-\frac{g^2(q\lambda)}{V_q}\left(1-\frac{1}{\epsilon_e(q0)}\right)\right\} \tag{3.94}$$

В модели желе $V_{eff}(q\omega)$ сводится к:

$$V_{eff}(q\omega)=\frac{4\pi e^2}{q^2\epsilon_{eff}(q\omega)} \tag{3.95}$$

где $\epsilon_{eff}(q\omega)$ – *полная* диэлектрическая проницаемость:

$$\epsilon_{eff}(q\omega)=\epsilon_e(q\omega)-\frac{\Omega_{q\lambda}^2}{\omega^2} \tag{3.96}$$

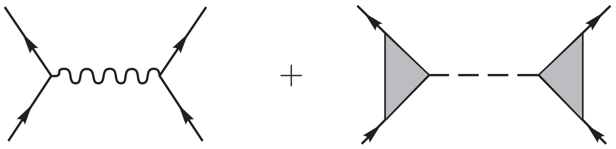


Рис. 3.12: Эффективное взаимодействие электронов в металле.

В более общем случае (чем модель желе), межэлектронное взаимодействие также сводится к виду (3.95), но $\epsilon_{eff}(q\omega)$ имеет вид:

$$\epsilon_{eff}(q\omega) = \epsilon_e(q\omega) - \frac{g^2(q\lambda)}{V_q}\frac{\Omega^2_{q\lambda}}{\omega^2 - \Omega^2_{q\lambda}\left[1 - \frac{g^2(q\lambda)}{V_q}\right]} \tag{3.97}$$

Условие устойчивости решетки сводится к требованию $\omega^2(q\lambda) > 0$, так что из (3.94) получаем:

$$1 + \frac{g^2(q\lambda)}{V_q}\frac{1-\epsilon_e(q0)}{\epsilon_e(q0)} > 0 \tag{3.98}$$

Из этих формул можно определить, когда эффективное взаимодействие в металле может стать *притягивающим*, в частности для $q \sim 2p_F$, что необходимо для формирования сверхпроводящего состояния [14]. Разумеется, в *реальных* металлах требуется выход за рамки использовавшегося нами RPA.

Выражение (3.94) для фононного спектра можно записать в более общем виде как:

$$\omega^2(q\lambda) = \Omega^2_{q\lambda}\left\{1 + g^2(q\lambda)\chi(q,\omega(q\lambda))\right\} \tag{3.99}$$

где введена обобщенная восприимчивость электронной подсистемы, связанная с соответствующей диэлектрической проницаемостью соотношением:

$$\chi_e(q\omega) = \frac{1}{V_q}\left(\frac{1}{\epsilon_e(q\omega)} - 1\right) \tag{3.100}$$

и учтена зависимость от $\omega$, которой выше пренебрегалось, что соответствовало адиабатическому приближению для плазменной модели металла. Расчет поправок на *неадиабатичность* следует осуществлять путем решения трансцендентного уравнения (3.99). Нетрудно убедиться, что из-за малости скорости ионов, по сравнению с фермиевской скоростью, учет зависимости $\chi_e(q\omega)$ от частоты приведет к изменению фононных частот на малую величину $\sim \sqrt{\frac{m}{M}}$.

Отсюда ясно, что "смягчение" частот реальных фононов и неустойчивость решетки можно связать с изменением эффективного межионного взаимодействия, обусловленным, в свою очередь, изменением статической диэлектрической проницаемости электронов. Такова, например, ситуация в одномерных и квазиодномерных металлических системах (а также в условиях нестинга при $d = 2,3$), где, как уже отмечалось выше, поляризационный оператор, а с ним и $\epsilon_e(q\omega)$ при $T = 0$ имеют логарифмическую особенность и обращается в бесконечность при $q = 2p_F$. В этом случае фононная частота и фурье – компонента эффективного межионного взаимодействия при $q = 2p_F$ обращаются в нуль.

## 3.6 Фононы и флуктуации.

Рассмотрим, следуя [3], корреляционную функцию атомных смещений:

$$C_T(r) = \sum_{\alpha\beta} < u_\alpha(r)u_\beta(0) > \tag{3.101}$$

и изучим ее асимптотику на больших расстояниях $r \to \infty$. Величину (3.101) можно выразить через соответствующую мацубаровскую функцию Грина фононов. При этом нужно учесть, что стандартная фононная функция Грина [1] определяет, фактически, коррелятор *градиентов* смещений, что обеспечивает удобную запись гамильтониана электрон – фононного взаимодействия. Функция Грина атомных смещений получается делением этой функции Грина на величину $\rho\omega_k^2$ (где $\rho$ – плотность сплошной среды, сопоставляемой кристаллу) и сменой знака[6]. Тогда имеем:

$$C_T(r) = \frac{T}{\rho}\sum_m \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega_m^2+\omega_k^2} \tag{3.102}$$

где $\omega_k$ – спектр фононов. Суммирование по (четным) мацубаровским частотам в (3.102) выполняется с помощью соотношения:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty}\frac{1}{m^2+a^2} = \frac{\pi}{a}cth\pi a \tag{3.103}$$

В результате получаем:

$$C_T(r) = \frac{1}{2\rho}\int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{1}{\omega_k}cth\frac{\omega_k}{2T}e^{i\mathbf{kr}} \tag{3.104}$$

Отсюда можно по отдельности выделить вклады тепловых и квантовых (нулевых) ($T = 0$) флуктуаций (колебаний) с помощью формулы:

$$\frac{1}{2}cth\frac{\omega}{2T} = \frac{1}{2} + n_B(\omega) \tag{3.105}$$

где $n_B(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\omega}{T}}-1}$ – функция Бозе. Очевидно, что $n_B \to 0$ при $T \to 0$, так что соответствующий вклад определяет тепловые флуктуации[7].

Итак, выпишем два вклада в искомый коррелятор:

$$C_0(r) = C_{T=0}(r) = \frac{1}{2\rho}\int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega_k} \tag{3.106}$$

$$\Delta C(r,T) = \frac{1}{\rho}\int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{n_B(\omega_k)}{\omega_k}e^{i\mathbf{kr}} \tag{3.107}$$

Нас интересует поведение этих функций при $r \to \infty$. Поэтому в $\Delta C(r,T)$ дают вклад только самые малые $k \sim \frac{1}{r}$, такие что $\omega_k \ll T$. Поэтому бозе – функцию можно аппроксимировать как $n_B(\omega_k) \approx \frac{T}{\omega_k}$ и записать:

$$\Delta C(r,T) \approx \frac{T}{\rho}\int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega_k^2} \tag{3.108}$$

Ясно, что эта формула является простым следствием закона равнораспределения [11] классической статистики.

Дальнейшие расчеты проведем для различных размерностей пространства. Сначала рассмотрим $C_0(r)$.

[6] В этом нетрудно убедиться, сравнивая формулы (7.9), (7.10) и (7.13) в книге [1]

[7] Заметим что, все эти формулы можно вывести и не используя мацубаровские функции Грина, а просто усредняя вторично – квантованные операторы смещений с гиббсовской матрицей плотности.

Таблица 3.1: Асимптотика ($r \to \infty$) корреляционной функции квантовых и тепловых флуктуаций атомных смещений для различных размерностей пространства.

| $d$ | $C_0(r)$ | $\Delta C_T(r)$ |
|---|---|---|
| 3 | $\sim \frac{1}{r^2}$ | $\sim \frac{T}{r}$ |
| 2 | $\sim \frac{1}{r}$ | $\sim T \ln \frac{L}{r}$ |
| 1 | $\sim \ln \frac{L}{r}$ | $\sim TL$ |

Для $d = 3$ имеем:

$$C_0^{(3)}(r) = \frac{4\pi}{(2\pi)^3 \rho} \int_0^\infty \frac{dkk^2}{ck} \frac{\sin kr}{kr} \sim \frac{1}{4\pi^2 \rho c r^2} \tag{3.109}$$

где ввели обрезание формально расходящегося на верхнем пределе интеграла при $k \sim \frac{1}{r}$, поскольку при больших $k$ осцилляции подинтегрального выражения гасят друг друга.

Для $d = 2$:

$$C_0^{(2)}(r) = \frac{1}{4\pi\rho c} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \int_0^\infty dk e^{ikr\cos\theta} = \frac{1}{4\pi\rho c} \int_0^\infty dk J_0(kr) = \frac{1}{4\pi\rho c r} \tag{3.110}$$

где $J_0(r)$ – соответствующая функция Бесселя.

Наконец для $d = 1$ имеем:

$$C_0^{(1)}(r) = \frac{1}{4\pi\rho c} \int_{-\infty}^\infty \frac{dk}{|k|} e^{ikr} = \frac{1}{2\pi\rho c} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \cos kr = \frac{1}{2\pi\rho c} \ln \frac{L}{r} \tag{3.111}$$

При вычислении последнего интеграла было снова (аналогично (3.109)) произведено обрезание логарифмической расходимости на верхнем пределе при $k \sim \frac{1}{r}$, а на нижнем при $k \sim \frac{1}{L}$ ($L$ – размер системы).

Рассмотрим теперь тепловые флуктуации.

Для $d = 3$ имеем:

$$\Delta C_T^{(3)}(r) = \frac{T}{2\pi^2 \rho c^2 r} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \sin kr = \frac{T}{4\pi\rho c^2 r} \tag{3.112}$$

Для $d = 2$:

$$\Delta C_T^{(2)}(r) = \frac{T}{(2\pi)^2 \rho c^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty \frac{dk}{k} e^{ikr\cos\theta} \tag{3.113}$$

Этот интеграл также расходится и его нужно обрезать, аналогично тому, как это делалось при расчете $C_1(r)$. В итоге получим:

$$\Delta C_T^{(2)}(r) = \frac{T}{2\pi\rho c^2} \ln \frac{L}{r} \tag{3.114}$$

Для $d = 1$, аналогичным образом:

$$\Delta C_T^{(1)}(r) = \frac{T}{\pi\rho c^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k^2} \cos kr = Const L \tag{3.115}$$

В этом случае интеграл при малых $k$ расходится степенным образом и определение коэффициента в общем виде невозможно – в частности он зависит от граничных условий, а также от того, как точки среды, в которых измеряются смещения, расположены по отношению к границам.

Итоги наших вычислений сведены в приведенной выше Таблице. Эти результаты позволяют изучить вопрос о разрушении дальнего (в данном случае кристаллического!) дальнего порядка квантовыми и тепловыми флуктуациями (колебаниями). В самом деле, для этого, как раз, достаточно рассмотреть асимптотики $C(r)$ при $r \to \infty$. Если при этом $C(r) \to 0$, то дальний порядок (кристаллическая решетка) флуктуациями не разрушается – даже значительное отклонение $u(0)$ от среднего значения не приводит к сильному изменению $u(r)$. Но если $C(r) \to \infty$, то это означает, что дальний порядок исчезает. Такая ситуация имеет место для квантовых флуктуаций при $d = 1$, а для тепловых — при $d = 1, 2$!

# Глава 4

# ЭЛЕКТРОНЫ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ

## 4.1 Диаграммная техника для рассеяния на "примесях".

Рассмотрим электрон, движущийся в пространстве в поле, создаваемом $N_i$ рассеивателями ("примесями"), которые расположены случайным образом (хаотически) с фиксированной плотностью (концентрацией) $\rho_i = \frac{N_i}{V}$, где $V$ – объем системы. Суммарный потенциал (случайное поле!), создаваемый примесями есть:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{N_i} v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \tag{4.1}$$

где $v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ – потенциал отдельного рассеивателя, расположенного в (случайной!) точке $\mathbf{R}_j$. Абсолютно случайное распределение рассеивателей в пространстве соответствует их функции распределения вида:

$$\mathcal{P}\{\mathbf{R}_j\} = V^{-N_i} \tag{4.2}$$

Для заданной конфигурации рассеивателей функция Грина электрона удовлетворяет уравнению:

$$\left\{ i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \sum_{j=1}^{N_i} v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \right\} G(\mathbf{r}\mathbf{r}'t\{\mathbf{R}_j\}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t) \tag{4.3}$$

и зависит функционально от всех $\mathbf{R}_j$. Обычно, в теории неупорядоченных систем предполагается [15], что физические величины (измеряемые на эксперименте) определяются как средние по ансамблю образцов со всеми возможными положениями "примесей" (усреднение по примесям). Таким образом, нас интересуют, прежде всего, усредненная функция Грина, которая определяется как:

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) =< G(\mathbf{r}\mathbf{r}'t) >= \frac{1}{V^{N_i}} \int ... \int \prod_{j=1}^{N_i} d\mathbf{R}_j G(\mathbf{r}\mathbf{r}'t\{\mathbf{R}_j\}) \tag{4.4}$$

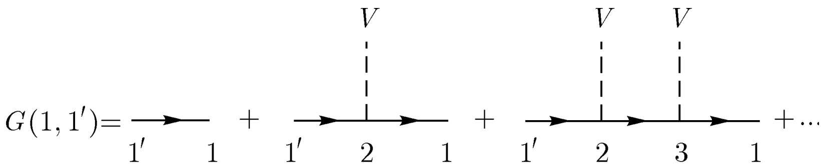



Рис. 4.1: Рассеяние электрона на потенциале, создаваемом фиксированной конфигурацией рассеивателей.

Считая потенциал рассеивателей слабым, можно развить теорию возмущений, записав вторично – квантованный гамильтониан взаимодействия электрона с полем (4.1) как:

$$H_{int} = \int d\mathbf{r}\psi^{+}(\mathbf{r})V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \tag{4.5}$$

Такая теория возмущений (по “внешнему” полю [1]) очень проста. Соответствующий ряд теории возмущений для функции Грина (4.3) имеет хорошо известный вид:

$$G(1,1') = G_0(1,1') + \int d2G_0(1,2)V(2)G_0(2,1') + \\ + \int d2d3G_0(1,2)V(2)G_0(2,3)V(3)G_0(3,1') + ... \tag{4.6}$$

где $1 = (\mathbf{r},t)$, $1' = (\mathbf{r}',t')$ и т. д. Графически это разложение представляется диаграммами, показанными на Рис. 4.1. Но нас интересует усредненная функция Грина $< G(\mathbf{r}\mathbf{r}'t) >$, определенная в (4.4). Соответственно, при усреднении ряда (4.6) по (4.2), возникают средние вида:

$$< V(2) >, \qquad < V(2)V(3) >, \qquad < V(2)V(3)V(4) >, ... \tag{4.7}$$

Для случайно расположенных примесей (случайного поля (4.1) и распределения (4.2)) все эти средние можно рассчитать в общем виде. Для этого, прежде всего, введем фурье – представление:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{j} v(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)} \tag{4.8}$$

где $v(\mathbf{p})$ — фурье – образ потенциала отдельного рассеивателя, $v(-\mathbf{p}) = v^*(\mathbf{p})$. Для простоты будем считать, в большинстве случаев, этот потенциал точечным, так что $v(\mathbf{p}) = v = const$. Это ограничение совершенно непринципиально.

С учетом (4.8), задача вычисления средних типа (4.7) сводится к вычислению величин типа:

$$M_s(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, ..., \mathbf{p}_s) =< \rho(\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{p}_2)...\rho(\mathbf{p}_s) >\equiv \left\langle \sum_{l_1} \sum_{l_2} ... \sum_{l_s} \exp(-i \sum_{j} \mathbf{p}_j \mathbf{R}_{l_j}) \right\rangle \tag{4.9}$$

Удобно перейти к рассмотрению несколько иного (несколько более общего и “реалистического”!) варианта нашей модели. Пусть $N_i$ рассеивателей (примесей) распределены случайным образом по $N$ узлам регулярной (для простоты кубической) решетки. Тогда вместо введенной выше размерной плотности $\rho_i$ введем безразмерную концентрацию примесей $\rho = \frac{N_i}{N}$, которая может изменяться в интервале от 0 до 1. Тогда результат усреднения произвольной суммы по положениям примесей очевидно сводится к:

$$\left\langle \sum_{l_i} ... \right\rangle \to \frac{N_i}{N} \sum_{l} ... = \rho \int \frac{d\mathbf{R}_l}{a^3} ... = \rho_i \int d\mathbf{R}_l ... \tag{4.10}$$

где вторая сумма уже берется по всем узлам нашей решетки, а величина $a$ обозначает постоянную решетки. При этом мы учли, что введенная выше размерная плотность рассеивателей $\rho_i = \frac{N_i}{V} = \frac{N_i}{Na^3} = \rho a^{-3}$. Переход к рассматривавшейся выше "непрерывной" модели соответствует $a \to 0$, так что фиксированное значение $\rho$ соответствует пределу $\rho_i \to \infty$. В тоже время, если фиксировать $\rho_i$, то предел $a \to 0$ означает $\rho = \rho_i a^3 \to 0$. Если же, как это часто принимается в теории твердого тела, положить объем системы $V = 1$, то $N = a^{-3}$, то различия в определении концентраций просто исчезают. Поэтому в дальнейшем мы используем для нее единое обозначение $\rho$.

Последующие вычисления достаточно просты, надо только аккуратно выделить специальные случаи, когда происходит совпадение индексов суммирования (примесей) в (4.9). Прямой счет дает (для решеточной модели):

$$M_1(\mathbf{p}) = \left\langle \sum_l \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{R}_l) \right\rangle = \rho \int d\mathbf{R} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{R}} = (2\pi)^3 \rho \delta(\mathbf{p}) \tag{4.11}$$

$$\begin{aligned} M_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) &= \left\langle \sum_l \exp[-i(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)\mathbf{R}_l] + \sum_{l \neq m} \exp[-(\mathbf{p}_1 \mathbf{R}_l + \mathbf{p}_2 \mathbf{R}_m)] \right\rangle = \\ &= (2\pi)^3 \rho \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2) + \rho^2 [(2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}_1)(2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}_2) - (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)] = \\ &= (2\pi)^6 \rho^2 \delta(\mathbf{p}_1)\delta(\mathbf{p}_2) + (2\pi)^3 (\rho - \rho^2) \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2) \equiv \\ &\equiv < \rho(\mathbf{p}_1) >_c < \rho(\mathbf{p}_2) >_c + < \rho(\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{p}_2)) >_c \end{aligned} \tag{4.12}$$

где ввели, по определению, *кумулянты* $< ... >_c$ [1]. Аналогичным образом получаем:

$$\begin{aligned} M_3(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3) &= < \rho(\mathbf{p}_1) >_c < \rho(\mathbf{p}_2) >_c < \rho(\mathbf{p}_3) >_c + < \rho(\mathbf{p}_1) >_c < \rho(\mathbf{p}_2)\rho(\mathbf{p}_3) >_c + \\ &+ < \rho(\mathbf{p}_2) >_c < \rho(\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{p}_3) >_c + < \rho(\mathbf{p}_3) >_c < \rho(\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{p}_2) >_c + < \rho(\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{p}_2)\rho(\mathbf{p}_3) >_c \end{aligned} \tag{4.14}$$

В итоге, после усреднения разложения (4.6) возникают следующие элементы нового (усредненного) ряда теории возмущений:

$$v < \rho(\mathbf{p}_1) >_c = (2\pi)^3 \rho v \delta(\mathbf{p}_1) \qquad (a) \tag{4.15}$$

$$v^2 < \rho(\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{p}_2) >_c = (2\pi)^3 (\rho - \rho^2) v^2 \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2) \quad (b) \tag{4.16}$$

$$v^3 < \rho(\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{p}_2)\rho(\mathbf{p}_3) >_c = (2\pi)^3 v^3 (\rho - 3\rho^2 + 2\rho^3) \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3) \qquad (c) \tag{4.17}$$

$$v^4 < \rho(\mathbf{p}_1)\rho(\mathbf{p}_2)\rho(\mathbf{p}_3)\rho(\mathbf{p}_4) >_c = (2\pi)^3 v^4 (\rho - 7\rho^2 + 12\rho^3 - 6\rho^4) \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4) \qquad (d) \tag{4.18}$$

которым сопоставляются диаграммы, показанные на Рис. 4.2 (a-d). Кумулянты более высоких порядков имеют еще более громоздкий вид.

[1] Формальное соотношение между средними моментами и кумулянтами дается равенством:

$$\left\langle \exp \sum_j \alpha_j \rho(\mathbf{p}_j) \right\rangle = \exp \left\langle \exp \left[ \sum_j \alpha_j \rho(\mathbf{p}_j) \right] - 1 \right\rangle_c \tag{4.13}$$

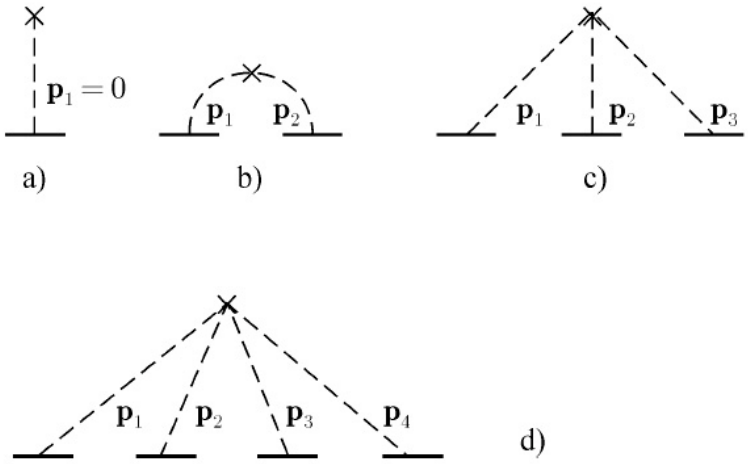



Рис. 4.2: Графики, сопоставляемые различным кумулянтам в усредненном ряде теории возмущений.

## 4.2 Одноэлектронная функция Грина.

Итог предыдущей дискуссии сводится к тому, что диаграммное разложение для одноэлектронной функции Грина, усредненной по случайным конфигурациям рассеивателей (примесей), представляется в виде, показанном на Рис. 4.3. Иногда говорят, что линии взаимодействия с примесями собираются в “пучки”, объединяемые “крестами” (“крестовая” диаграммная техника (S.F.Edwards, 1958)).

При малой концентрации ($\rho \to 0$) примесей (или в “непрерывной” модели) мы можем ограничиться здесь членами линейными по $\rho$. Тогда, с учетом предполагаемой малости потенциала ($v \to 0$), можно ограничиться только вкладами от (4.15), (4.16), или, соответственно, графиками для кумулянтов (взаимодействий), показанными на Рис. 4.2 (a,b). При этом вклад от (4.15) тривиален и сводится к константе, приводящей к сдвигу начала отсчета энергии электрона на величину $\rho v$ (или к соответствующей перенормировке химпотенциала)[2]. Второй же кумулянт (Рис. 4.2 (b)) сводится при этом к $(2\pi)^3\rho v^2\delta(\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2)$. Тогда разложение для усредненной функции Грина сводится к сумме графиков, показанных на Рис. 4.4. Этому случаю соответствует простейшая *факторизация* корреляторов случайного поля (4.7) “по Вику”:

$$
\begin{aligned}
&< V(1)V(2) > \neq 0\\
< V(1) >= 0 \qquad &< V(1)V(2)V(3) >= 0\\
&\text{– и т. д. для всех нечетных степеней,}\\
< V(1)V(2)V(3)V(4) > = < V(1)V(2) &>< V(3)V(4) > + < V(1)V(4) >< V(2)V(3) >\\
&\text{– и т. п. для всех четных степеней.}
\end{aligned}
\tag{4.19}
$$

[2]Поэтому, можно просто считать, что в (4.7) $< V(2) >= 0$ и отсчитывать энергию от среднего уровня случайногополя. В самом деле, ограничиваясь для собственно – энергетической части электрона вкладом диаграммы Рис. 4.2 (a) имеем $\Sigma = \rho v(0) = \rho \int d\mathbf{r} v(\mathbf{r})$ и, соответственно, функцию Грина: $G(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(p) - \rho v(0)}$, что и доказывает сделанное утверждение.

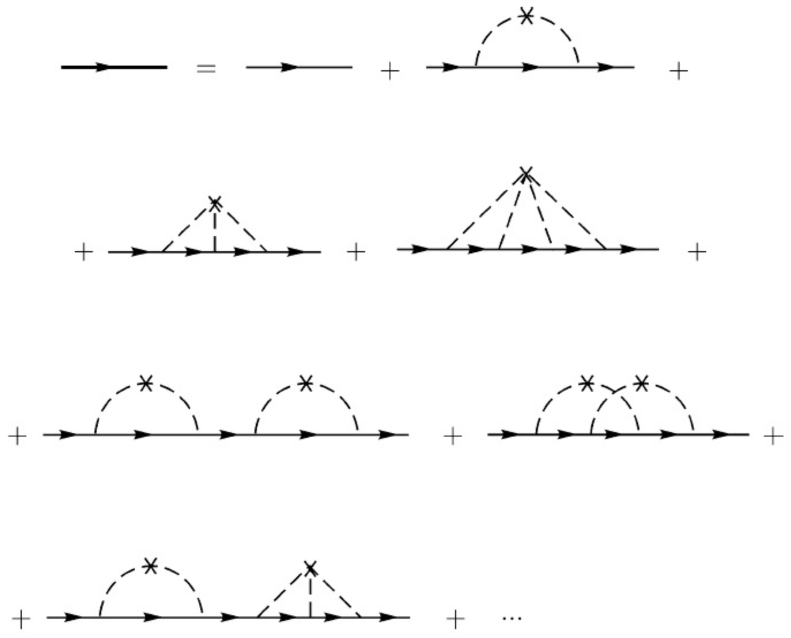



Рис. 4.3: Диаграммное разложение усредненной функции Грина случайном поле общего вида.

что, с точки зрения математики, определяет *гауссово* случайное поле[3].

В рассматриваемой задаче "двухточечный" коррелятор случайного поля в координатном пространстве имеет вид:

$$< V(\mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_2) >= (2\pi)^3\rho v^2 \int \frac{d^dp_1}{(2\pi)^3}e^{i\mathbf{p}_1\mathbf{r}_1} \int \frac{d^dp_2}{(2\pi)^3}e^{i\mathbf{p}_2\mathbf{r}_2}\delta(\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2) =$$

$$= \rho v^2 \int \frac{d^dp_1}{(2\pi)^3}e^{i\mathbf{p}_1(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} = \rho v^2\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) \qquad (4.20)$$

Поэтому обычно говорят, что здесь рассматриваемая задача сводится к изучению движения электрона в гауссовом случайном поле с коррелятором типа "белого шума".

Разложение Рис. 4.3 можно записать в виде уравнения Дайсона:

$$G(1,1') = G_0(1,1') + \int d2d3G_0(1,2)\Sigma(2,3)G(3,1') \qquad (4.21)$$

или, в импульсном представлении (мацубаровская техника)[4]:

$$G(\mathbf{p}\varepsilon_n) = G_0(\mathbf{p}\varepsilon_n) + G_0(\mathbf{p}\varepsilon_n)\Sigma(\mathbf{p}\varepsilon_n)G(\mathbf{p}\varepsilon_n) \qquad (4.22)$$

где собственно – энергетическая часть $\Sigma(1,2)$ представляется графиками, показанными на Рис. 4.5. Рассмотрим вклад первой диаграммы на Рис. 4.5, соответствую-

[3]Можно показать, что этот же результат возникает из всего ряда теории возмущений для "непрерывной" модели распределения "примесей" в формальном пределе $\rho_i \to \infty$, $v^2 \to 0$, но $\rho_i v^2 \to const$!

[4]Усредненная функция Грина $< G(\mathbf{r}\mathbf{r}'\varepsilon_n) >= G(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\varepsilon_n)$ зависит только от $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ – усреднение "восстанавливает" трансляционную инвариантность системы.

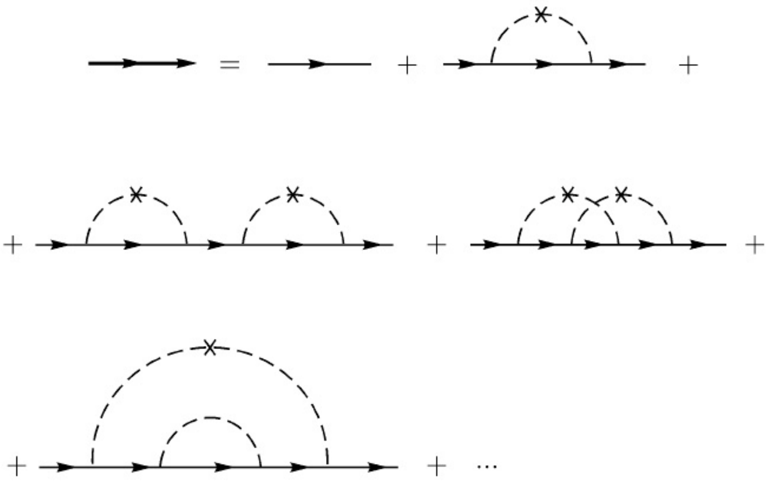


Рис. 4.4: Диаграммное разложение усредненной функции Грина в гауссовом случайном поле.

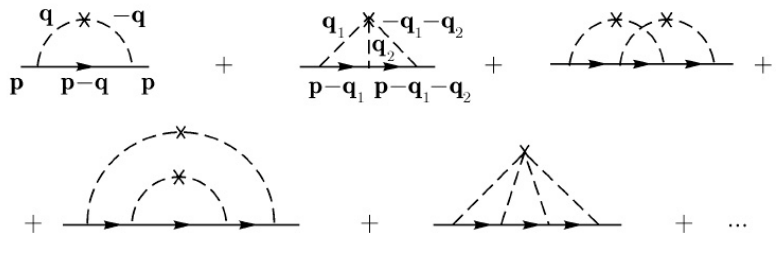



Рис. 4.5: Диаграммы для собственно – энергетической части электрона в случайном поле.

щей, как мы сейчас увидим, первому борновскому приближению для рассеяния на примесях (1BA) ($v(-\mathbf{p}) = v^*(\mathbf{p})$):

$$\Sigma^{1BA}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \rho \sum_{\mathbf{q}} |v(\mathbf{q})|^2 \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}-\mathbf{q})} = \rho \sum_{\mathbf{p}'} |v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2 \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}')} \tag{4.23}$$

где, как всегда, $\xi(\mathbf{p}) = \varepsilon_p - \mu \approx v_F(|\mathbf{p}| - p_F)$.

В типичных металлах $E_F \sim 7eV \sim 80000K$ и в большинстве случаев нас интересуют электроны вблизи уровня Ферми $E_F \approx \mu$. Например, для $T < 800K$ имеем $\frac{T}{E_F} < 10^{-2}$. Таким образом, нам надо знать $\Sigma^{1BA}(\varepsilon_n \mathbf{p})$ при $|\mathbf{p}| \sim p_F$ и[5] $|i\varepsilon_n \to \varepsilon + isign(\varepsilon_n)\delta| \ll E_F$. Кроме того, из проведенного выше рассмотрения экранировки кулоновского взаимодействия электронов ясно, что совершенно аналогичным образом экранируется и потенциал примеси, так что, фактически, $v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$ является достаточно плавно меняющейся функцией на интервале $0 < |\mathbf{p}-\mathbf{p}'| < 2p_F$.

С учетом сделанных замечаний и проведем последующие вычисления. Имеем:

$$\Sigma^{1BA}(\mathbf{p}, \varepsilon + isign(\varepsilon_n)\delta) = \rho \sum_{\mathbf{p}'} |v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2 \frac{1}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}') + isign(\varepsilon_n)\delta} =$$

$$= \rho \sum_{\mathbf{p}'} |v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2 \left\{ \frac{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}')}{(\varepsilon - \xi(\mathbf{p}'))^2 + \delta^2} - isign(\varepsilon_n)\pi\delta(\varepsilon - \xi(\mathbf{p}')) \right\} \tag{4.24}$$

Поскольку $|v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2$ меняется достаточно медленно и нас интересуют $|\varepsilon - \xi(p')| \ll E_F \approx \mu$, мы имеем качественную картину, показанную на Рис. 4.6. В частности, из того обстоятельства, что $\frac{\varepsilon - \xi(p')}{(\varepsilon - \xi(p'))^2 + \delta^2}$ является нечетной функцией $\varepsilon - \xi(p')$, следует, что $Re\Sigma^{1BA}(\mathbf{p}\varepsilon_n) \approx 0$[6]. Тогда (4.24) сводится к чисто мнимому выражению:

$$\Sigma^{1BA}(\mathbf{p}\varepsilon) = -i\pi sign(\varepsilon_n) \sum_{\mathbf{p}'} \rho |v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2 \delta(\varepsilon - \xi(\mathbf{p}')) \approx -i\frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}\frac{1}{2\tau_p} \equiv -i\frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}\gamma_p \tag{4.25}$$

где, с учетом $\varepsilon \approx \xi(p)$ (вблизи полюса!) ввели

$$\frac{1}{\tau_p} = 2\gamma_p = 2\pi \sum_{\mathbf{p}'} \rho |v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2 \delta(\xi(\mathbf{p}) - \xi(\mathbf{p}')) \tag{4.26}$$

— частоту рассеяния электрона на примесях, посчитанную в борновском приближении (“золотое правило” Ферми).

Если, для простоты, сразу ввести точечный потенциал примеси $v(\mathbf{p}) = v$ и линеаризованный спектр электронов вблизи поверхности Ферми, то все вычисления упрощаются и мы немедленно получаем:

$$\Sigma^{1BA}(\mathbf{p}\varepsilon_n) = \rho v^2 \sum_{\mathbf{p}'} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}')} \approx -\rho v^2 \nu_F \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{i\varepsilon_n + \xi}{\varepsilon_n^2 + \xi^2} =$$

$$= -i\rho v^2 \nu_F arctg \frac{\xi}{\varepsilon_n}\bigg|_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|} = -i\frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}\pi\rho v^2 \nu_F \tag{4.27}$$

---

[5] Учтем, что, в конце концов, нам нужно выполнить аналитическое продолжение на вещественную ось из верхней полуплоскости $\varepsilon_n > 0$, т.е. $i\varepsilon_n \to \varepsilon + i\delta$, или из нижней полуплоскости, где $\varepsilon_n < 0$, т.е. $i\varepsilon_n \to \varepsilon - i\delta$.

[6] Строго говоря, интеграл по $p'$ в первом члене (4.24) может быть разбит на две части: по $p'$ далеким от $p_F$ и по $p'$ вблизи $p_F$. Пределы второго интеграла можно взять симметричными по $p' - p_F$, что и даст нуль (в пренебрежении изменением $v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$ вблизи $p_F$). Интеграл по далеким областям дает действительную константу, которую опять можно включить в перенормировку химпотенциала.

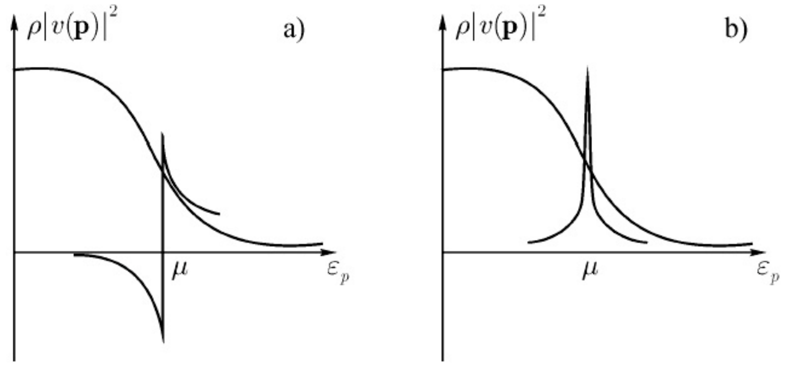



Рис. 4.6: (a) – сравнение $\rho|v(p)|^2$ и функции $\frac{\varepsilon-\varepsilon_p+\mu}{(\varepsilon-\varepsilon_p+\mu)^2+\delta^2}$, входящей в $Re\Sigma^{1BA}(p\varepsilon)$. (b) – сравнение $\rho|v(p)|^2$ и функции $\frac{\delta}{(\varepsilon-\varepsilon_p+\mu)^2+\delta^2}$, входящей в $Im\Sigma^{1BA}(p\varepsilon)$.

что, по сути дела, совпадает с (4.25), причем:

$$\gamma_p = \pi\rho v^2 \nu_F \tag{4.28}$$

и является просто константой, определяемой потенциалом примеси и плотностью электронных состояний на уровне Ферми.

Таким образом, в рассматриваемом приближении, получаем усредненную одноэлектронную функцию Грина в виде:

$$G^{1BA}(\mathbf{p}\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(p) + i\gamma_p sign\varepsilon_n} \tag{4.29}$$

что, после продолжения $i\varepsilon_n \to z$, дает:

$$G^{1BA}(\mathbf{p}z) = \begin{cases} \frac{1}{z-\xi(p)+i\gamma_p} & Imz > 0 \\ \frac{1}{z-\xi(p)-i\gamma_p} & Imz < 0 \end{cases} \tag{4.30}$$

и при $z \to \varepsilon \pm i\delta$ (где $\delta \to +0$) определяет $G^{R(A)}(\mathbf{p}\varepsilon)$. Таким образом, в соответствии с общими требованиями [1], $G^{1BA}(\mathbf{p}z)$ имеет разрез вдоль действительной оси и аналитична (по отдельности) в верхней и нижней полуплоскости $z$.

После элементарного преобразования Фурье имеем:

$$G^R(\mathbf{p}t) = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{e^{-i(\varepsilon+i\delta)t}}{\varepsilon - \xi(p) + i\gamma_p} = -i\theta(t)e^{-i\xi(p)t}e^{-\gamma_p t} \tag{4.31}$$

и аналогично:

$$G^R(\mathbf{r}\varepsilon) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{pr}}}{\varepsilon - \xi(p) + i\gamma_p} = -\frac{\pi\nu_F}{p_F r} e^{ik_F r} e^{-r/2l_p} \tag{4.32}$$

где $l_p = v_F \tau_p$ [7]. Таким образом $\gamma_p = \frac{1}{2\tau_p}$ определяет временное и пространственное (на длине $l_p$, аналогичной длине свободного пробега) "затухание" усредненной функции Грина.

[7] В самом деле, (4.32) можно записать как (воспользуемся $p - p_F = \xi/v_F$):

$$G^R(\mathbf{r}\varepsilon) = \frac{\nu_F}{p_F r} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\sin pr}{\varepsilon - \xi + \frac{i}{2\tau_p}} =$$

Спектральная плотность, соответствующая (4.30), имеет вид простого лорентциана с шириной $\gamma_p$:

$$A(\mathbf{p}\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} ImG^R(\mathbf{p}\varepsilon) = \frac{1}{\pi}\frac{\gamma_p}{(\varepsilon - \xi(p))^2 + \gamma_p^2} \tag{4.34}$$

что, естественно, переходит в $A(\mathbf{p}\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \xi(p))$ газа свободных электронов при $\gamma_p \to 0$.

Рассмотрим теперь роль отброшенных диаграмм и возможные обобщения. Можно ввести "полное" борновское приближение, точное в низшем порядке по концентрации примесей $\rho$, и учитывающее многократное рассеяние электрона на одной примеси. Соответствующие диаграммы для собственно – энергетической части показаны на Рис. 4.7 (a). Соответствующее выражение имеет вид:

$$\Sigma^{FBA}(\mathbf{p}\varepsilon_n) = t_{\mathbf{pp}}(\varepsilon_n) \tag{4.35}$$

и сводится к диагональному элементу матрицы рассеяния ($t$-матрицы) $t_{\mathbf{pp}'}$, которая определяется уравнением, представленным в графическом виде на Рис. 4.7 (b), или, в аналитическом виде:

$$t_{\mathbf{pp}'}(\varepsilon_n) = \rho v(0)\delta_{\mathbf{pp}'} + \sum_{\mathbf{p}''} v(\mathbf{p}-\mathbf{p}'')G_0(\mathbf{p}'')t_{\mathbf{p}''\mathbf{p}}(\varepsilon_n) \tag{4.36}$$

Задача опять существенно упрощается для электронов вблизи поверхности Ферми. Действительная часть диагонального элемента $t$-матрицы $t_{\mathbf{pp}}(i\varepsilon_n)$ практически является при $|\mathbf{p}| \sim p_F$ константой и может быть включена в определение $\mu$. Тогда остается рассмотреть $Imt_{\mathbf{pp}}(i\varepsilon_n)$. Применяя оптическую теорему квантовой теории рассеяния[8]

$$Imt_{\mathbf{pp}} = Im\sum_{\mathbf{p}'} t^+_{\mathbf{pp}'}G_0(\mathbf{p}')t_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} \tag{4.38}$$

имеем:

$$Im\Sigma^{FBA}(\mathbf{p}\varepsilon_n) = Imt_{\mathbf{pp}}(\varepsilon_n) = Im\sum_{\mathbf{p}'}\frac{|t_{\mathbf{pp}'}|^2}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}')} = -sign\varepsilon_n\pi\sum_{\mathbf{p}'}|t_{\mathbf{pp}'}|^2\delta(\varepsilon - \xi(\mathbf{p}')) \tag{4.39}$$

где в последнем равенстве $i\varepsilon_n \to \varepsilon + i\delta sign\varepsilon_n$. Выражение (4.39) совпадает по форме с (4.25), с учетом замены $\rho|v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2$ на $|t_{\mathbf{pp}'}|^2$:

$$\Sigma^{FBA}(\mathbf{p}\varepsilon_n) = -isign\varepsilon_n\frac{1}{2\tau_p} = -isign\varepsilon_n\gamma_p \tag{4.40}$$

где

$$\frac{1}{\tau_p} = 2\gamma_p = 2\pi\sum_{\mathbf{p}'}|t_{\mathbf{pp}'}|^2\delta(\xi(\mathbf{p}) - \xi(\mathbf{p}')) \tag{4.41}$$

---

$$= \frac{\nu_F}{2ip_Fr}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\exp(ip_Fr + i\frac{\xi}{v_F}r) - \exp(-ip_Fr - i\frac{\xi}{v_F}r)}{\varepsilon - \xi + \frac{i}{2\tau_p}} = -\frac{\pi\nu_F}{p_Fr}e^{ip_Fr}e^{-\frac{r}{2v_F\tau_p}} \tag{4.33}$$

[8] Имеем из (4.36): $t = v + vG_0t$, $v^+ = v$, так что $v = -t^+G_0^+v + t^+$ и $t = v + (t^+G_0t - t^+G_0^+vG_0t)$ и, в силу эрмитовости $v$ и $t^+G_0^+vG_0t$, получаем:

$$Imt_{\mathbf{pp}} = Im < \mathbf{p}|t^+G_0t|\mathbf{p} >= Im\sum_{\mathbf{p}'}t^+_{\mathbf{pp}'}G_0t_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} \tag{4.37}$$

что и сводится к (4.38).

Если в (4.26) заменить $\rho|v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2$ на $|t_{\mathbf{pp}'}|^2$, то именно это и получим. В этом смысле, можно ограничиться только второй диаграммой на Рис. 4.7 (a), как это и делалось выше, но подразумевать, что $v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$ представляет собой матричный элемент амплитуды рассеяния на одной примеси.

Теперь можно перейти к рассмотрению самосогласованного борновского приближения, сводящегося к процедуре "ужирнения" внутренних электронных линий в собственно – энергетической части, как это показано на Рис. 4.7 (c). В аналитическом виде получаем:

$$\Sigma^{SCBA}(\mathbf{p}\varepsilon_n) = \rho v(0)\delta_{\mathbf{pp}} + \sum_{\mathbf{p}'} v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')G(\mathbf{p}'\varepsilon_n)t_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} \tag{4.42}$$

где, по сравнению с (4.36), произошла замена функции Грина $G_0$, на:

$$G(\mathbf{p}\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(p) - \Sigma(\mathbf{p}\varepsilon_n)} \tag{4.43}$$

так что, фактически, возникает процедура самосогласования для определения собственно – энергетической части (функции Грина).

Далее логика нашего рассмотрения повторяется. Пользуемся тем, что $t_{\mathbf{pp}}$ слабо зависит от энергии при $|\mathbf{p}| \approx p_F$ и $\varepsilon \ll E_F$, а также, что рассеяние является умеренным, в смысле выполнения неравенства $|\Sigma^{SCBA}| \ll E_F$, снова получаем результат типа (4.39). При этом роль играет только $Im\Sigma$, а $Re\Sigma$ может быть "спрятана" в химпотенциал $\mu$. В итоге получаем:

$$\begin{aligned} Im\Sigma^{SCBA}(\mathbf{p}\varepsilon_n) = Imt_{\mathbf{pp}} = Im\sum_{\mathbf{p}'} \frac{|t_{\mathbf{pp}'}|^2}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}') - iIm\Sigma^{SCBA}(\mathbf{p}'\varepsilon_n)} \approx \\ \approx -sign(\varepsilon_n - Im\Sigma^{SCBA})\pi\sum_{\mathbf{p}'}|t_{\mathbf{pp}'}|^2\delta(\varepsilon - \xi(\mathbf{p}')) \end{aligned} \tag{4.44}$$

где приближенное равенство справедливо при малых $Im\Sigma^{SCBA}$. Для самосогласованности надо просто взять $Im\Sigma^{SCBA}(i\varepsilon_n) \sim -sign(\varepsilon_n)$, что проверяется простой подстановкой. Разница между рассмотренным выше борновским приближением и его самосогласованным вариантом возникает только в случае достаточно сильного рассеяния, когда $\delta$ – функция в (4.44) заменяется лорентцианом конечной ширины, что в модели с точечным рассеянием (ср. (4.27)) не меняет вообще ничего.

Итак имеем опять знакомый ответ:

$$\Sigma^{SCBA}(\mathbf{p}\varepsilon_n) = -isign(\varepsilon_n)\frac{1}{2\tau_p} = -isign(\varepsilon_n)\gamma_p \tag{4.45}$$

где $\tau_p$ и $\gamma_p$ определяются как в (4.41), а для случая точечных примесей выражением типа (4.28)[9].

Наше приближение, таким образом, соответствует в разложении функции Грина учету, показанном на Рис. 4.4, учету всех диаграмм *без пересечений* линий взаимодействия. Почему и при каких условиях можно пренебречь "перекрестными" графиками. Рассмотрим этот вопрос подробно на примере сравнения двух диаграмм, показанных на Рис. 4.8. При расчете вклада диаграммы Рис. 4.8 (a) импульсы интегрирования $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_2$ могут принимать любые значения в сферическом слое толщиной

[9] При рассмотрении зоны конечной ширины, в этом случае $\nu_F$ обозначает плотность состояний на уровне Ферми, с учетом влияния эффектов рассеяния.

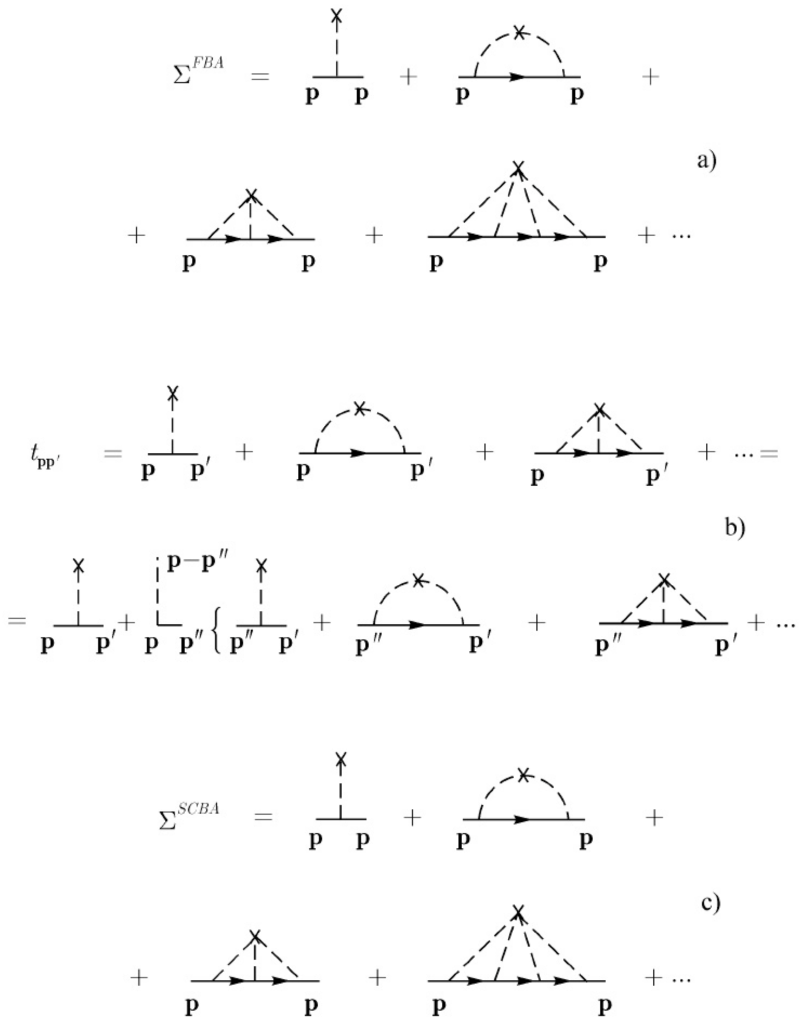



Рис. 4.7: (a) – графики для собственно – энергетической части, учитывающие многократное рассеяние на примеси. (b) – уравнение для $t$ – матрицы. (c) – графики для собственно – энергетической части в самосогласованном приближении, с учетом многократного рассеяния.

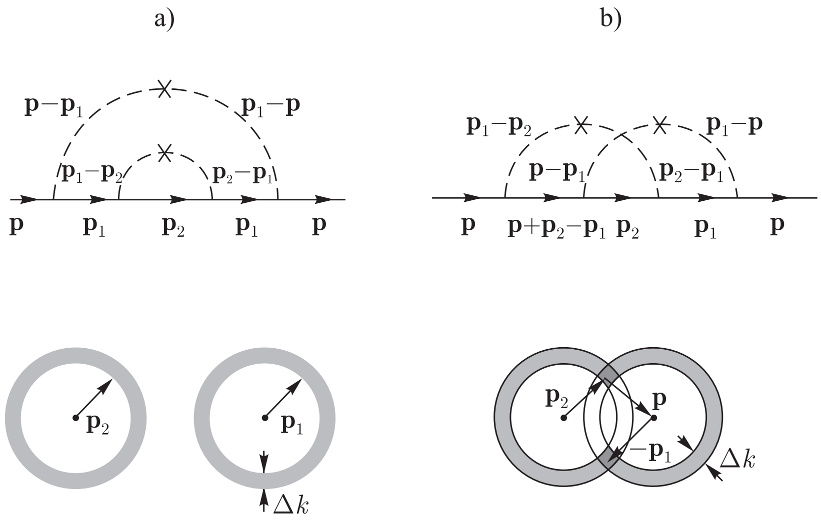



Рис. 4.8: Диаграмма без пересечения линий взаимодействия (a) и с “перекрестами” (b). Показаны также соответствующие области интегрирования в импульсном пространстве.

$\Delta k \sim 1/l$. Соответствующий фазовый объем $\Omega_a \approx (4\pi p_F^2 \hbar \Delta k)^2$. В случае диаграммы Рис. 4.8 (b) существуют такие же ограничения на значения $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_2$, но кроме этого, должно еще выполняться условие $|\mathbf{p}+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_1| \approx p_F$. При фиксированном $\mathbf{p}_2$ изменение $\mathbf{p}_1$ ограничено областью пересечения его слоя и соответствующего слоя импульса $\mathbf{p}+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_1$, что соответствует дважды заштрихованным областям на Рис. 4.8 (b). Фазовый объем этого кольца, образованного пересечением двух сферических слоев, есть $\Omega_b \approx (4\pi p_F^2 \hbar \Delta k)(2\pi p_F \hbar^2 \Delta k^2)$. Поэтому, отношение вклада диаграммы с “перекрестами” к “неперекрестной” есть, по порядку величины, $\frac{\Omega_b}{\Omega_a} \sim \frac{\hbar \Delta k}{p_F} = \frac{\hbar}{p_F l} \ll 1$ (“слабый” беспорядок соответствует достаточно большой длине свободного пробега, $p_F l/\hbar \gg 1$). Таким образом, параметр малости нашей теории есть $\frac{\hbar}{p_F l} \ll 1$, что, очевидно, эквивалентно также условию $\frac{\hbar}{E_F \tau_p} \ll 1$. С учетом $p_F \sim \hbar/a$ (где $a$ – межатомное расстояние), малость этого параметра соответствует выполнению условия $l \gg a$, так что длина пробега должна существенно превышать межатомное расстояние. Фактически, это есть обычное условие применимости кинетической теории.

## 4.3 Модель Келдыша.

Критерий $p_F l/\hbar \gg 1 (l \gg a)$ позволяет, как мы видели только что, ограничиться некоторой подпоследовательностью доминирующих диаграмм (диаграммы без пересечений линий взаимодействия) фейнмановского ряда теории возмущений. В большинстве задач, решаемых диаграммным методом, приходится поступать именно таким образом, т.е. отбирать (пользуясь некоторым физическим критерием) бесконечную подпоследовательность диаграмм, которую *удается* просуммировать. С точки зрения математики это, конечно, не очень хорошо! Отброшенные диаграммы (хотя они и малы по физическому параметру) тоже составляют бесконечную подпоследовательность полного ряда и вклад их остается, строго говоря, неизвестным. В некоторых (очень редких!) случаях удается просуммировать *весь* ряд фейнмановских диаграмм и получить, таким образом, точное решение задачи. К сожалению это удается, как правило, сделать лишь в очень упрощенных (чисто модельных!) задачах. Тем не менее, выводы, полученные из таких моделей могут быть весьма полезны.

В качестве примера рассмотри модель движения электрона в гауссовом случайном поле, когда диаграммный ряд для функции Грина имеет вид, показанный на Рис. 4.4, с модельным парным коррелятором, задаваемым в импульсном представлении выражением $W^2(\mathbf{q}) = (2\pi)^3 W^2 \delta(\mathbf{q})$. В этом случае импульс, передаваемый электрону каждой линией взаимодействия равен нулю. В координатном представлении это соответствует парному коррелятору случайных полей вида:

$$< V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}') >= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}(2\pi)^3 W^2 \delta(\mathbf{q}) = W^2 \tag{4.46}$$

что соответствует случаю "предельно дальнодействующих" корреляций случайного поля $V(\mathbf{r})$, т.е. противоположному предельному случаю, по сравнению с коррелятором типа "белого шума" (4.20)[10].

Оказывается, что в этой модели можно легко просуммировать весь фейнмановский ряд (Л.В.Келдыш, 1965). Вернемся к ряду для неусредненной функции Грина, показанному на Рис. 4.1. При усреднении по гауссову случайному полю, линии взаимодействия с внешним полем объединяются "попарно" всеми возможными способами и мы получаем диаграммный ряд Рис. 4.4. Соответственно в $n$-м порядке по коррелятору гауссова поля в каждом члене разложения усредненной функции Грина имеется $2n$ вершин, соединенных попарно линиями взаимодействия (все диаграммы этого порядка получаются, если перебрать все попарные соединения линий взаимодействия в члене порядка $2n$ на Рис. 4.1). Если каждая линия взаимодействия передает электрону нулевой импульс, то вклады всех диаграмм в данном порядке теории (включая "перекрестные"!) возмущений просто равны. В результате, разложение функции Грина представляется в виде:

$$G(\varepsilon\mathbf{p}) = G_0(\varepsilon\mathbf{p}) \left\{ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} A_n W^{2n} G_0^{2n}(\varepsilon\mathbf{p}) \right\} \tag{4.47}$$

где $A_n$ – полное число диаграмм в $n$-м порядке этого ряда (в порядке $2n$ по амплитуде взаимодействия $W$). Вклад произвольной диаграммы просто равен:

$$W^{2n} G_0^{2n+1}(\varepsilon\mathbf{p}) \tag{4.48}$$

что соответствует $2n$ вершинам (множитель $W^{2n}$), соединенным попарно пунктирными линиями, а также произведению $2n+1$ свободных функций Грина. Множитель $A_n$ легко определить из комбинаторных соображений — это число способов, которыми можно попарно соединить $2n$ вершин пунктирными линиями взаимодействия. Легко видеть, что

$$A_n = (2n-1)!! \tag{4.49}$$

В самом деле, в каждой диаграмме имеется $2n$ вершин и $2n+1$ электронная линия. Выберем произвольную вершину. Ее можно соединить $2n-1$ способом с любой из остальных $2n-1$ вершин. После этого у нас в распоряжении остается еще $2n-2$

[10] В общем случае, коррелятор $< V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}') >$ характеризуется некоторой ***корреляционной длиной*** $\xi$ флуктуаций случайного поля. "Белый шум" соответствует $\xi \to 0$, в рассматриваемой здесь модели $\xi \to \infty$

"свободных" вершин. Снова беря любую из них, можем соединить ее с оставшимися $2n-3$ способами. После этого остается $2n-4$ "свободных". Любую из них можно соединить с оставшимися $2n-5$ способами, и т. д. Таким образом, полное число способов соединить $2n$ вершин в данном порядке равно $(2n-1)(2n-3)(2n-5)... = (2n-1)!!$, что и дает (4.49).

Теперь можно воспользоваться известным интегральным представлением[11]:

$$(2n-1)!! = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dt t^{2n} e^{-\frac{t^2}{2}} \tag{4.54}$$

Тогда (4.47) сводится к:

$$\begin{aligned}G(\varepsilon\mathbf{p}) &= G_0(\varepsilon\mathbf{p})\left\{1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dt t^{2n} e^{-\frac{t^2}{2}} W^{2n} G_0(\varepsilon\mathbf{p})^{2n}\right\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{t^2}{2}} G_0(\varepsilon\mathbf{p})\left\{1+\sum_{n=1}^{\infty} t^{2n} W^{2n} G_0^{2n}(\varepsilon\mathbf{p})\right\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{t^2}{2}} G_0(\varepsilon\mathbf{p})\left\{1+\frac{t^2 G_0^2(\varepsilon\mathbf{p})W^2}{1-t^2G_0^2(\varepsilon\mathbf{p})W^2}\right\}\end{aligned} \tag{4.55}$$

где, по ходу дела, мы поменяли местами суммирование и интегрирование, и просуммировали возникшую прогрессию[12]. После элементарных преобразований получаем:

$$\begin{aligned}G(\varepsilon\mathbf{p}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{t^2}{2}} G_0(\varepsilon\mathbf{p})\frac{1}{1-t^2W^2G_0^2(\varepsilon\mathbf{p})} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{t^2}{2}} G_0(\varepsilon\mathbf{p})\frac{1}{2}\left\{\frac{1}{1-tWG_0(\varepsilon\mathbf{p})}+\frac{1}{1+tWG_0(\varepsilon\mathbf{p})}\right\}\end{aligned} \tag{4.56}$$

так что окончательно:

$$G^R(\varepsilon\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{t^2}{2}}\frac{G_0(\varepsilon\mathbf{p})}{1-tWG_0(\varepsilon\mathbf{p})} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{t^2}{2}}\frac{1}{\varepsilon-\varepsilon_p-tW+i\delta} \tag{4.57}$$

где учли явный вид $G_0^R(\varepsilon\mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon-\varepsilon_p+i\delta}$, и далее подразумевается $\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}$ [13]. После

[11] По определению: $(2n)!! = 2.4.6...(2n) = 2^n n!$. Аналогично:

$$(2n-1)!! = 1.3.5...(2n-1) = 2^n\frac{1}{\sqrt{\pi}}\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{4.50}$$

Пользуясь интегральным представлением $\Gamma$-функции:

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} dx x^{z-1} e^{-x} \tag{4.51}$$

легко получить весьма полезное, для дальнейшего, соотношение:

$$n! = \Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} dx x^n e^{-x} \tag{4.52}$$

а также

$$\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) = \int_0^{\infty} dx x^{n-1/2} e^{-x} = \int_0^{\infty} dx x^{\frac{2n-1}{2}} e^{-x} \tag{4.53}$$

что после замены $x \to t^2/2$, и с учетом (4.50), дает (4.54).

[12] Использованный здесь прием в математике называется *суммированием по Борелю.*

[13] Определим функцию комплексной переменной $z$:

$$\Psi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{t^2}{2}}\frac{1}{z-t} \tag{4.58}$$

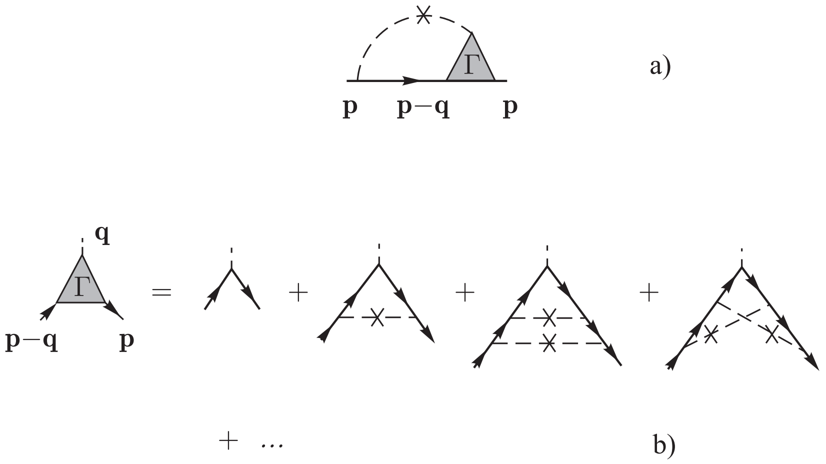



Рис. 4.9: Диаграммы для точной собственно – энергетической части электрона в гауссовом случайном поле (a) и определяющей ее вершинной части (b).

переобозначения $tW = V$ перепишем (4.57) в более наглядном виде:

$$G^R(\varepsilon\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}W}\int_{-\infty}^{\infty} dV e^{-\frac{V^2}{2W^2}} \frac{1}{\varepsilon - \frac{p^2}{2m} - V + i\delta} \tag{4.60}$$

Физический смысл этого результата очевиден — электрон движется в пространственно – однородном поле $V$, величина которого распределена по Гауссу с шириной $W$. Усредненная функция Грина описывает ансамбль “образцов”, в каждом из которых поле $V$ постоянно вдоль всего образца, но величина его в каждом из “образцов” (элементов ансамбля) случайна.

Приведем еще один вариант вывода этого красивого результата (Л.В.Келдыш, 1965, А.Л.Эфрос, 1970). Запишем уравнение Дайсона:

$$G^{-1}(\varepsilon\mathbf{p}) = \varepsilon - \frac{p^2}{2m} - \Sigma(\varepsilon\mathbf{p}) \tag{4.61}$$

где собственно – энергетическая часть может быть представлена графиком Рис. 4.9 (a) и в аналитическом виде имеет вид:

$$\Sigma(\varepsilon\mathbf{p}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{p}-\mathbf{q},\mathbf{q})G(\varepsilon\mathbf{p}-\mathbf{q})W^2(\mathbf{q}) \tag{4.62}$$

Здесь $\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{p}-\mathbf{q},\mathbf{q})$ – точная вершинная часть, определяемая диаграммами, показанными на Рис. 4.9 (b)[14]. С учетом того, что в рассматриваемой задаче $W^2(\mathbf{q}) =$

---

Тогда (4.57) можно записать:

$$G(\varepsilon\mathbf{p}) = \frac{1}{W}\Psi\left(\frac{1}{WG_0(\varepsilon\mathbf{p})}\right) \tag{4.59}$$

[14]Заметим, что оба электронных “конца” этой вершины соответствуют запаздывающей (опережающей) функции Грина $G^{R(A)}$, в соответствии с тем, которая из этих функций определяется из (4.61). Именно это обстоятельство позволяет воспользоваться для вычисления вершины $\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{p},0)$ простым дифференциальным тождеством Уорда (4.64)

$(2\pi)^3W^2\delta(\mathbf{q})$, уравнения (4.61), (4.62) сводятся к:

$$\varepsilon - \frac{p^2}{2m} - G^{-1}(\varepsilon\mathbf{p}) = W^2G(\varepsilon\mathbf{p})\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{p},0) \tag{4.63}$$

Вершина $\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{p},0)$ удовлетворяет тождеству Уорда вида:

$$\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{p},0) = \frac{dG^{-1}(\varepsilon\mathbf{p})}{d\varepsilon} \tag{4.64}$$

которое легко выводится прямым дифференцированием диаграммного ряда для собственно – энергетической части $\Sigma(\varepsilon\mathbf{p})$. Тогда из (4.63) возникает дифференциальное уравнение для функции Грина:

$$W^2\frac{dG}{dx} + Gx - 1 = 0 \tag{4.65}$$

где ввели $x = \varepsilon - \frac{p^2}{2m} + i\delta$. Прямое решение (4.65) с граничным условием $G(x) = \frac{1}{x}$ при $x \to \infty$ немедленно дает (4.60).

Результат (4.60), полученный *точным* суммированием всего фейнмановского ряда (4.47) довольно показателен. Например, спектральная плотность, соответствующая (4.60), имеет вид:

$$A(\varepsilon\mathbf{p}) = \frac{1}{\pi}\frac{1}{\sqrt{2\pi}W}\int_{-\infty}^{\infty} dVe^{-\frac{V^2}{2W^2}}\delta\left(\varepsilon - \frac{p^2}{2m} - V\right) = \frac{1}{\pi\sqrt{2\pi}W}\exp\left(-\frac{(\varepsilon-\frac{p^2}{2m})^2}{2W^2}\right) \tag{4.66}$$

и представляет собой размытый гауссов пик. Вообще, нужно заметить, что выражение (4.60), с очевидностью, не сводится к чему – то типа (4.30), т.е. к функции Грина с размытым "квазичастичным" полюсом, она вообще не имеет полюсов.

Из (4.60) и (4.66) нетрудно рассчитать плотность электронных состояний:

$$\begin{aligned} N(\varepsilon) &= -\frac{2}{\pi}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}ImG^R(\varepsilon\mathbf{p}) = 2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}A(\varepsilon\mathbf{p}) = \\ &= \frac{2}{\sqrt{2\pi}W}\int_{-\infty}^{\infty}dVe^{-\frac{V^2}{2W^2}}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\delta\left(\varepsilon-\frac{p^2}{2m}-V\right) \end{aligned} \tag{4.67}$$

где множитель 2 происходит от суммирования по спину. Соответственно:

$$N(\varepsilon) = \frac{2^{3/4}m^{3/2}W^{1/2}}{\pi^2\hbar^3}G_0\left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{2}W}\right) \tag{4.68}$$

где безразмерная функция $G_0(x)$ определена как:

$$G_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{x}dye^{-y^2}(x-y)^{1/2} \tag{4.69}$$

а вид ее показан на Рис. 4.10. При $\varepsilon > 0$ и $\varepsilon \gg W$, имеем:

$$N(\varepsilon) = N_0(\varepsilon) - \frac{(2m)^{3/2}W^2}{16\pi^2\hbar^3\varepsilon^{3/2}} \tag{4.70}$$

где второе слагаемое представляет собой малую поправку к плотности состояний свободных электронов (пунктир на Рис. 4.10):

$$N_0(\varepsilon) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3}\sqrt{\varepsilon} \tag{4.71}$$

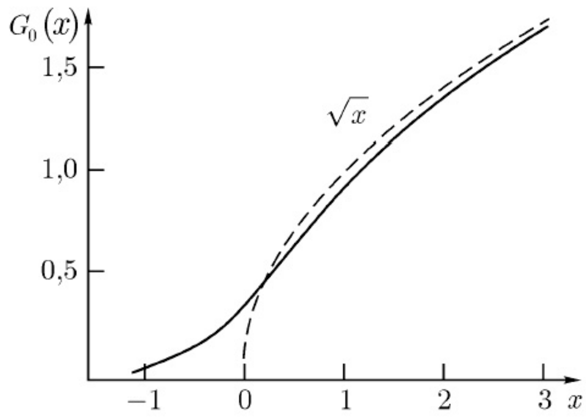



Рис. 4.10: Функция $G(x)$, определяющая плотность состояний в модели Келдыша.

Наиболее существенной особенностью полученного точного решения является появление "хвоста" плотности состояний в области $\varepsilon < 0$. При $\varepsilon < 0$ и $|\varepsilon| \gg W$ для "хвоста" получаем гауссову асимптотику:

$$N(\varepsilon) = \frac{2^{1/4} m^{3/2} \sqrt{W}}{4\pi^2 \hbar^3} \left( \frac{\sqrt{2} W}{\varepsilon} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{\varepsilon^2}{2W^2} \right) \tag{4.72}$$

Образование "хвоста" плотности состояний в запрещенной зоне является общим результатом электронной теории неупорядоченных систем [15]. Разумеется, конкретный вид плотности состояний в этой области энергий не является универсальным и зависит от модели случайного поля ("беспорядка").

В частности, "хвост" плотности состояний у края зоны проводимости возникает и в рассмотренной выше модели "белого шума". Удается показать, что в этой модели (для $d = 3$) при $\varepsilon < 0$ [15]:

$$N(\varepsilon) \sim \exp\left\{ -const \frac{|\varepsilon|^{1/2} \hbar^3}{m^{3/2} \rho v^2} \right\} \tag{4.73}$$

при $|\varepsilon| \gg E_{sc} \sim m^3(\rho v^2)/\hbar^6$, что соответствует условию $|\varepsilon| \gg \gamma(\varepsilon)$, где $\gamma(\varepsilon) = \pi \rho v^2 N_0(\varepsilon) \sim \rho v^2 \frac{m^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{\varepsilon}$.

Для модели гауссова случайного поля с коррелятором, характеризующимся конечной корреляционной длиной $\xi$, возникают характерные области энергии, показанные на Рис. 4.11, где для пространства размерности $d < 4$ энергия $E_{sc}$, определяющая размеры области "сильной связи" (из условия $\gamma(\varepsilon) = \varepsilon$) определяется как (М.В.Садовский, 1977):

$$E_{sc} = \frac{m^{\frac{d}{4-d}}}{\hbar^{2d}} (\rho v^2)^{\frac{2}{4-d}} \tag{4.74}$$

Кроме того, в этой задаче возникает еще одна характерная энергия:

$$E_0 \sim \frac{\hbar^2}{m\xi^2} \tag{4.75}$$

При этом форма "хвоста" плотности состояний в области $E_{sc} \ll |\varepsilon| \ll E_0$ определяется выражением, обобщающим (4.73) (М.В.Садовский, 1979):

$$N(\varepsilon) \sim \exp\left\{ -A_d \frac{|\varepsilon|^{2-\frac{d}{2}} \hbar^d}{\rho v^2} \right\} = \exp\left\{ -A_d \left( \frac{|\varepsilon|}{E_{sc}} \right)^{2-\frac{d}{2}} \right\} \tag{4.76}$$

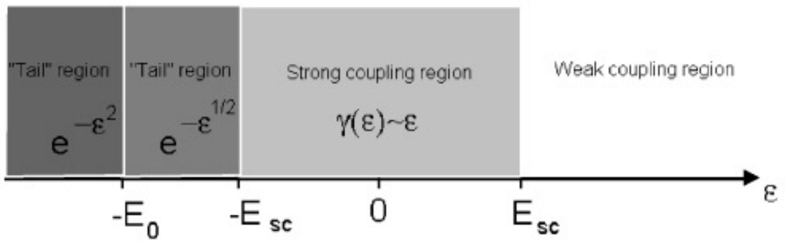



Рис. 4.11: Характерные области энергий в задаче об электроне в случайном поле.

где $A_d = const$, зависящая только от $d$. В области $|\varepsilon| \gg E_0$ асимптотика "хвоста" становится гауссовой:

$$N(\varepsilon) \sim \exp\left\{-\frac{\xi^d}{\rho V^2}E^2\right\} \tag{4.77}$$

что аналогично полученному выше результату (4.72).

## 4.4 Проводимость и двухчастичная функция Грина.

Продолжим рассмотрение задачи об электроне в поле случайных примесей (гауссовом случайном поле с коррелятором типа "белого шума"). Важнейший вопрос – общий метод расчета проводимости такой системы. Выше мы уже видели, что для вычисления проводимости нужно знать функцию отклика типа плотность – плотность $\chi(\mathbf{q}\omega)$, тогда можно использовать (2.110) и (2.115). При этом мы убедились, что эта функция отклика (с точностью до знака) может быть получена аналитическим продолжением ($i\omega_m \to \omega + i\delta$) мацубаровского поляризационного оператора $\Pi(i\omega_m \mathbf{q})$ электронного газа:

$$\sigma(\omega) = -\lim_{q\to 0}\frac{ie^2}{q^2}\omega\chi(\mathbf{q}\omega) = \lim_{q\to 0}\frac{ie^2}{q^2}\omega\Pi(\mathbf{q}i\omega_m \to \omega + i\delta) \tag{4.78}$$

Мы рассматриваем свободные (невзаимодействующие между собой) электроны в поле случайных примесей[15]. С точки зрения квантовой механики задача является одночастичной, для такого электрона всегда существуют некоторые (неизвестные нам!) *точные* собственные функции и энергии в поле, задаваемом заданной (фиксированной) конфигурацией примесей[16]:

$$H\varphi_n(\mathbf{r}) = \varepsilon_n\varphi_n(\mathbf{r}) \tag{4.79}$$

где

$$H = \int d\mathbf{r}\psi^+(\mathbf{r})\left\{-\frac{\nabla^2}{2m} + \sum_i v(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)\right\}\psi(\mathbf{r}) \tag{4.80}$$

[15]Общее обсуждение излагаемого ниже подхода можно найти в [16, 17].

[16]Именно обсуждавшаяся выше процедура усреднения придает задаче формально "многочастичный" вид, но усредненные функции Грина уже не являются функциями Грина *квантовомеханической* задачи! Они описывают картину, усредненную по статистическому ансамблю "образцов" со всевозможными конфигурациями рассеивателей.

Соответственно, можно ввести (неусредненные!) запаздывающие и опережающие функции Грина уравнения Шредингера (4.79) как:

$$G^{R,A}(\mathbf{rr}',\varepsilon)=\sum_n\frac{\varphi_n(\mathbf{r})\varphi_n^*(\mathbf{r}')}{\varepsilon-\varepsilon_n\pm i\delta}\tag{4.81}$$

или, после фурье – преобразования по каждой из координат отдельно:

$$G^{R,A}(\mathbf{pp}',\varepsilon)=\sum_n\frac{\varphi_n(\mathbf{p})\varphi_n^*(\mathbf{p}')}{\varepsilon-\varepsilon_n\pm i\delta}\tag{4.82}$$

Разлагая электронные операторы в представлении точных собственных функций:

$$\psi(\mathbf{r})=\sum_n a_n\varphi_n(\mathbf{r})\qquad \psi^+(\mathbf{r})=\sum_n a_n^+\varphi_n^*(\mathbf{r})\tag{4.83}$$

определим оператор плотности электронов как:

$$\rho(\mathbf{r})=\psi^+(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})=\sum_{mn}\varphi_n^*(\mathbf{r})\varphi_m(\mathbf{r})a_n^+a_m\tag{4.84}$$

Тогда соответствующую функцию отклика плотность – плотность можно вычислить по общей схеме, описанной выше в (2.81) – (2.87), так что при $T=0$ получаем:

$$\begin{aligned}\chi(\mathbf{rr}',\omega)&=i\int_0^\infty dte^{i(\omega+i\delta)t}<0|[\rho(\mathbf{r},t),\rho(\mathbf{r}',0)]|0>=\\&=2\sum_{mn}\varphi_n^*(\mathbf{r})\varphi_m(\mathbf{r})\varphi_m^*(\mathbf{r}')\varphi_n(\mathbf{r}')\frac{n(\varepsilon_m)-n(\varepsilon_n)}{\omega+\varepsilon_n-\varepsilon_m+i\delta}\end{aligned}\tag{4.85}$$

где усреднение ведется по основному состоянию, а множитель 2 учитывает оба направления спина электрона. Выражение (4.85) дает конкретный вид (2.81) для рассматриваемой задачи. Фактически, нас интересует *усредненная* (по примесным конфигурациям) функция отклика $\chi(\mathbf{r}-\mathbf{r}',\omega)=<\chi(\mathbf{rr}',\omega)>$, пространственный фурье – образ которой может быть записан как:

$$\begin{aligned}\chi(\mathbf{q}\omega)&=2\sum_{\mathbf{pp}'}\sum_{nm}\left\langle\varphi_m(\mathbf{p}_+)\varphi_m^*(\mathbf{p}'_+)\varphi_n(\mathbf{p}'_-)\varphi_n^*(\mathbf{p}_-)\frac{n(\varepsilon_m)-n(\varepsilon_n)}{\omega+\varepsilon_n-\varepsilon_m+i\delta}\right\rangle=\\&=2\sum_{\mathbf{pp}'}\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon\left\{[n(\varepsilon+\omega)-n(\varepsilon)]<G^R(\mathbf{p}_+\mathbf{p}'_+,\varepsilon+\omega)G^A(\mathbf{p}'_-\mathbf{p}_-,\varepsilon)>+\right.\\&\qquad+n(\varepsilon)<G^R(\mathbf{p}_+\mathbf{p}'_+,\varepsilon+\omega)G^R(\mathbf{p}'_-\mathbf{p}_-,\varepsilon)>-\\&\qquad\left.-n(\varepsilon+\omega)<G^A(\mathbf{p}_+\mathbf{p}'_+,\varepsilon+\omega)G^A(\mathbf{p}'_-\mathbf{p}_-,\varepsilon)>\right\}\end{aligned}\tag{4.86}$$

где второе выражение проверяется непосредственно с использованием (4.82), и мы ввели $\mathbf{p}_\pm=\mathbf{p}\pm\frac{1}{2}\mathbf{q}$. Выражение (4.86) можно переписать как:

$$\chi(\mathbf{q}\omega)=-\int_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon\{[n(\varepsilon+\omega)-n(\varepsilon)]\Phi^{RA}(\varepsilon\omega\mathbf{q})+n(\varepsilon)\Phi^{RR}(\varepsilon\omega\mathbf{q})-n(\varepsilon+\omega)\Phi^{AA}(\varepsilon\omega\mathbf{q})\}\tag{4.87}$$

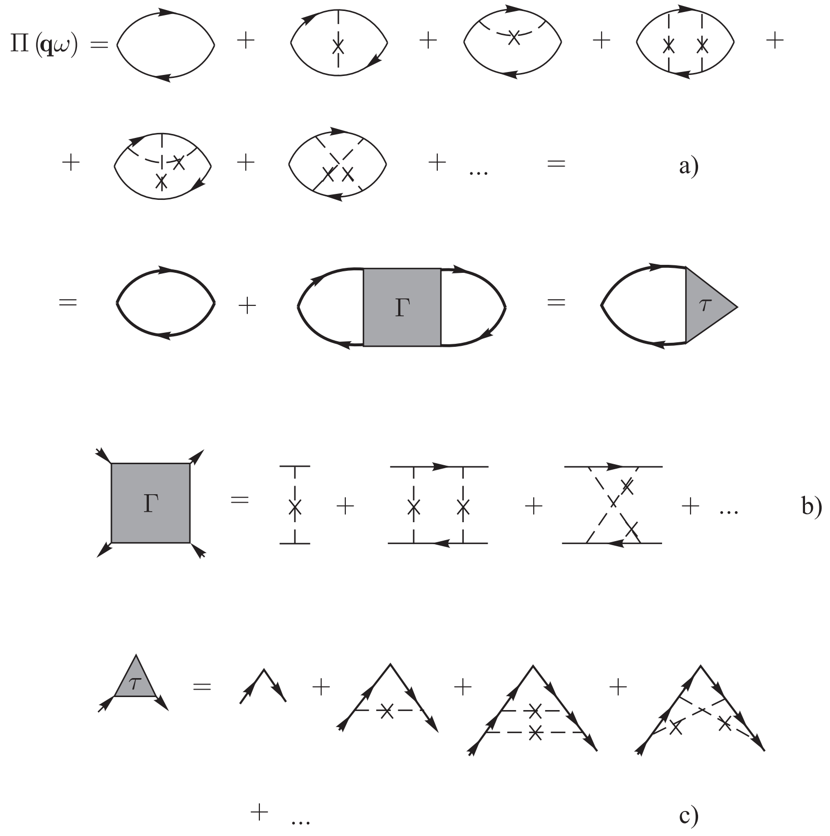



Рис. 4.12: Диаграммное разложение поляризационного оператора в примесной системе (a) и определяющих его вершин Γ (b) и $\mathcal{T}$ (c).

где ввели обозначение:

$$\Phi^{RA}(\varepsilon\omega\mathbf{q}) = -\frac{1}{2\pi i}2\sum_{\mathbf{pp}'} < G^R(\mathbf{p}_+\mathbf{p}'_+,\varepsilon+\omega)G^A(\mathbf{p}'_-\mathbf{p}_-,\varepsilon) > \tag{4.88}$$

и аналогичные выражения для $\Phi^{RR}$ и $\Phi^{AA}$. Заметим, что мы включили в эти определения спиновую “двойку”.

Предыдущее рассмотрение относилось к $T=0$. Убедимся, что аналогичные для $T\neq 0$ выражения получаются и аналитическим продолжением соответствующих мацубаровских функций.

Пользуясь правилами “примесной” диаграммной техники, мы можем представить мацубаровский поляризационный оператор в виде, показанном на Рис. 4.12 (a). В аналитическом виде имеем:

$$\Pi(\mathbf{q}\omega_m) = 2T\sum_n\sum_{\mathbf{p}} G(\mathbf{p}\varepsilon_n)G(\mathbf{p}+\mathbf{q}\varepsilon_n+\omega_m)\mathcal{T}(\mathbf{p},\mathbf{p}+\mathbf{q},\varepsilon_n,\varepsilon_n+\omega_m) \tag{4.89}$$

а уравнения для вершин Γ и $\mathcal{T}$, представлены графически на Рис. 4.12 (b),(c). Сумму по частотам в (4.89) можно рассчитать, пользуясь общим методом, описанным выше в связи с (3.40) – (3.44). Наличие в (4.89) двух функций Грина (с частотами,

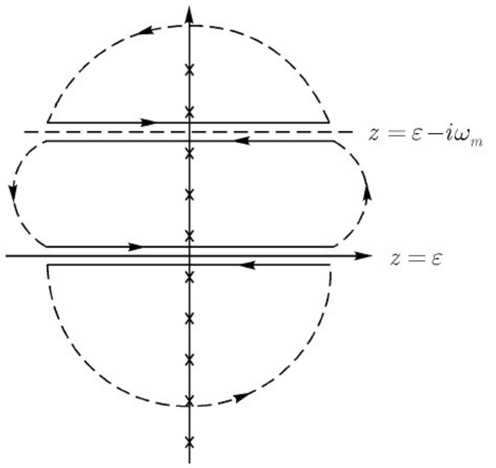



Рис. 4.13: Контур интегрирования, используемый при вычислении суммы по мацубаровским частотам.

отличающимися на $i\omega_m$) приводит к появлению в их произведении двух разрезов[17] в комплексной плоскости частоты — одного вдоль $z=\varepsilon$, а другого – вдоль $z=\varepsilon-i\omega_m$. Тогда, пользуясь формулой (3.38) можно записать входящую в (4.89) сумму в виде:

$$S(i\omega_m)=T\sum_n f(i\varepsilon_n,i\varepsilon_n+i\omega_m)=-\int_C\frac{dz}{2\pi i}n(z)f(z,z+i\omega_m) \tag{4.90}$$

где $f(z,z+i\omega_m)=G(z)G(z+i\omega_m)\mathcal{T}(z,z+i\omega_m)$ (импульсы для краткости опускаем!), а $n(z)$ – функция Ферми. При этом контур интегрирования $C$ показан на Рис. 4.13. Соответственно, расписывая (4.90) в виде интегралов по четырем прямым участкам контура $C$ (интегралы по бесконечно удаленным дугам окружности исчезают!), получаем:

$$S(i\omega_m)=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi i}n(\varepsilon)[f(\varepsilon+i\delta,\varepsilon+i\omega_m)-f(\varepsilon-i\delta,\varepsilon+i\omega_m)]-$$
$$-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi i}n(\varepsilon-i\omega_m)[f(\varepsilon-i\omega_m,\varepsilon+i\delta)-f(\varepsilon-i\omega_m,\varepsilon-i\delta)] \tag{4.91}$$

Сделав замену $\omega_m\to\omega+i\delta$, получим:

$$S(\omega)=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi i}n(\varepsilon)[f^{RR}(\varepsilon,\varepsilon+\omega)-f^{RA}(\varepsilon,\varepsilon+\omega)+f^{RA}(\varepsilon-\omega,\varepsilon)-f^{AA}(\varepsilon-\omega,\varepsilon)] \tag{4.92}$$

где обозначения типа $f^{RA}(\varepsilon,\varepsilon')$ означают $f(\varepsilon-i\delta,\varepsilon+i\delta)$ и т. д. Сдвиг переменной $\varepsilon\to\varepsilon+\omega$ в последних двух членах дает:

$$S(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi i}[n(\varepsilon)-n(\varepsilon+\omega)]f^{RA}(\varepsilon,\varepsilon+\omega)-$$
$$-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi i}[n(\varepsilon)f^{RR}(\varepsilon,\varepsilon+\omega)-n(\varepsilon+\omega)f^{AA}(\varepsilon,\varepsilon+\omega)] \tag{4.93}$$

[17]Напомним, что функция Грина $G(\mathbf{p}z)$ имеет разрез в комплексной плоскости $z$ вдоль прямой, определяемой условием $Imz=0$.

А это, по сути дела, совпадает с (4.87), если ввести обозначение:

$$\Phi^{RA}(\varepsilon\omega\mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi i}f^{RA}(\varepsilon,\varepsilon+\omega) = -\frac{1}{2\pi i}2\sum_{\mathbf{p}} G^R(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})G^A(\varepsilon\mathbf{p})\mathcal{T}(\mathbf{p},\mathbf{p}+\mathbf{q},\varepsilon,\varepsilon+\omega) \tag{4.94}$$

что есть просто другая форма записи (4.88), где все уже выражено через усредненные функции Грина $G^R(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})$ и $G^A(\varepsilon\mathbf{p})$, а также усредненную вершину $\mathcal{T}(\mathbf{p},\mathbf{p}+\mathbf{q},\varepsilon,\varepsilon+\omega)$. Кроме того, поскольку расчеты велись в мацубаровской технике, фермиевские функции в (4.93) взяты теперь при $T>0$. Таким образом, при $T>0$ имеем:

$$\chi(\mathbf{q}\omega) = -\Pi(\mathbf{q}i\omega_m\to\omega+i\delta) = -\int_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon\left\{[n(\varepsilon+\omega)-n(\varepsilon)]\Phi^{RA}(\varepsilon\omega\mathbf{q}) + \right.$$
$$\left. + n(\varepsilon)\Phi^{RR}(\varepsilon\omega\mathbf{q}) - n(\varepsilon+\omega)\Phi^{AA}(\varepsilon\omega\mathbf{q})\right\} \tag{4.95}$$

что есть полный эквивалент (4.87), как и следовало ожидать!

Вернемся к выражению (4.88). Используя $G^A(\mathbf{p}\mathbf{p}',\varepsilon) = [G^R(\mathbf{p}'\mathbf{p},\varepsilon)]^*$, получим $\Phi^{RR}(\varepsilon 00) = -[\Phi^{AA}(\varepsilon 00)]^*$. Далее, нетрудно видеть, что:

$$\Phi^{RR}(\varepsilon 00) = \frac{1}{2\pi i}2\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\partial}{\partial\varepsilon} < G^R(\mathbf{p}\mathbf{p}',\varepsilon) > \tag{4.96}$$

где $< G^{R,A}(\mathbf{p}\mathbf{p}',\varepsilon) > \equiv G^{R,A}(\mathbf{p}\varepsilon)\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$ и

$$G^{R,A}(\mathbf{p}\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \frac{p^2}{2m} + \mu - \Sigma^{R,A}(\mathbf{p}\varepsilon)} \tag{4.97}$$

– запаздывающая (опережающая) функция Грина, определяемая описанной выше “примесной” диаграммной техникой[18]. Нетрудно убедиться, что выполняется следующее тождество:

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon n(\varepsilon) Im\left\{-2\pi i\Phi^{RR}(\varepsilon 00)\right\} = \pi N(E_F) \tag{4.98}$$

что получается прямой подстановкой (4.96) в (4.98) и последующим интегрированием по частям, с учетом определения плотности состояний:

$$N(\varepsilon) = -\frac{2}{\pi}\sum_{\mathbf{p}} ImG^R(\mathbf{p}\varepsilon) \tag{4.99}$$

При $T \ll E_F$ имеем[19]:

$$\left(-\frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right) \approx \delta(\varepsilon) \tag{4.100}$$

и соответственно:

$$n(\varepsilon+\omega) - n(\varepsilon) = -\omega\delta(\varepsilon) \tag{4.101}$$

Тогда из (4.87) или (4.95), с использованием (4.98), для малых $q \ll p_F$ и $\omega \ll E_F$, имеем:

$$\chi(\mathbf{q}\omega) = \omega\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega) + N(E_F) \tag{4.102}$$

[18]При расчетах в мацубаровской технике получаем $R$ или $A$ функции после аналитического продолжения $i\varepsilon_n \to \varepsilon \pm i\delta$

[19]Напомним, что у нас $E_F$ играет роль начала отсчета энергии, так что, фактически, во всех формулах $E_F = 0$.

где ввели обозначение

$$\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega) = \Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega\varepsilon = 0) \tag{4.103}$$

При $q = 0$ функция отклика плотность – плотность должна обращаться в нуль при произвольных значениях $\omega$ из общих соображений [10]. Это ясно, например, из сравнения (2.113) и (2.114). Соответственно, из (4.102) получаем:

$$\Phi^{RA}(0\omega) = -\frac{N(E_F)}{\omega} \tag{4.104}$$

что представляет собой некоторый вариант тождества Уорда, связанного с законом сохранения заряда. Тогда можно переписать (4.102) как:

$$\chi(\mathbf{q}\omega) = \omega\left\{\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega) - \Phi^{RA}(0\omega)\right\} \tag{4.105}$$

а общее выражение для проводимости системы (2.110) сводится к:

$$\sigma(\omega) = -\lim_{q\to 0} ie^2\frac{\omega^2}{q^2}\left\{\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega) - \Phi^{RA}(0\omega)\right\} \tag{4.106}$$

Это выражение чрезвычайно удобно при конкретных вычислений, поскольку для расчета двухчастичной функции Грина (петли) $\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega)$ можно использовать рассмотренную выше "примесную" диаграммную технику.

Часто, для расчета проводимости системы диаграммными методами используется несколько иной подход, основанный на рассмотрении отклика на внешний вектор – потенциал. Общее выражение для тензора проводимости имеет тогда вид[20]:

$$\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega) = \frac{1}{i\omega}\left\{\Phi_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega + i\delta) - \Phi_{\mu\nu}(\mathbf{q}0 + i\delta)\right\} \tag{4.107}$$

где

$$\Phi_{\mu\nu}(\mathbf{q}i\omega_m) = T\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{i\omega_m(\tau-\tau')} < T_\tau J_\mu(\mathbf{q}\tau)J_\nu(-\mathbf{q},\tau') > \tag{4.108}$$

где $\mathbf{J}(\mathbf{p})$ – фурье-образ оператора (т.н. "парамагнитного") тока:

$$\mathbf{J}(\mathbf{q}) = -\frac{ie}{2m}\int d\mathbf{r}e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\left[\psi^+(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r}) - \nabla\psi^+(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})\right] \tag{4.109}$$

Схематически, вывод этих выражений выглядит следующим образом. Рассмотрим отклик системы на внешний векторный потенциал, взаимодействие с которым описывается добавкой к плотности гамильтониана следующего вида:

$$\mathcal{H}_{ext} = -\mathbf{J}(\mathbf{r})\mathbf{A}(\mathbf{r}t) \tag{4.110}$$

причем возьмем $\mathbf{A}(\mathbf{r}t)$ в виде плоской волны:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}t) = \mathbf{A}(\mathbf{q}\omega)e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}-i\omega t} \tag{4.111}$$

так что соответствующее электрическое поле имеет вид:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}t) = -\frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r}t)}{\partial t} = i\omega\mathbf{A}(\mathbf{q}\omega)e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}-i\omega t} \tag{4.112}$$

[20] Разумеется, в изотропной системе и в отсутствие внешнего магнитного поля $\sigma_{\mu\nu} = \sigma\delta_{\mu\nu}$

Тогда, в соответствии с общим формализмом Кубо [11], получаем ("парамагнитный") отклик системы в виде:

$$J_\mu(\mathbf{q}\omega) = \chi^p_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega)A^\nu(\mathbf{q}\omega) = \frac{\chi^p_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega)}{i\omega}i\omega A^\nu(\mathbf{q}\omega) = \frac{\chi^p_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega)}{i\omega}E^\nu(\mathbf{q}\omega) \tag{4.113}$$

где

$$\chi^p_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega) = i\int_0^\infty dt e^{i\omega t} < [J_\mu(\mathbf{q}t), J_\nu(-\mathbf{q}0)] > \tag{4.114}$$

Из проведенного выше общего обсуждения связи линейного отклика с мацубаровским формализмом ясно, что $\chi^p_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega) = \Phi_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega + i\delta)$, т.е. получается аналитическим продолжением (4.108).

Полный электрический ток в системе, в присутствии внешнего вектор – потенциала, равен:

$$\mathbf{J}^{tot} = \mathbf{J} - \frac{ne^2}{m}\mathbf{A} \tag{4.115}$$

где второе слагаемое представляет собой "диамагнитный" ток, связанный с тем, что скорость электрона в этом случае имеет вид $\mathbf{v} = \frac{1}{m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})$. С другой стороны, при $\omega = 0$ (статический вектор – потенциал (магнитное поле)) электрический ток в системе (нормальном металле) отсутствует, так что "диамагнитная" составляющая в (4.115) полностью компенсирует "парамагнитную"[21]. Тогда имеем:

$$\chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}0) = \Phi_{\mu\nu}(\mathbf{q}0) = \frac{ne^2}{m}\delta_{\mu\nu} \tag{4.116}$$

откуда немедленно следует общая формула (4.107) для проводимости. Фактически (4.116), подобно (4.104), также есть некоторый вариант тождества Уорда.

Теперь ясно, что диагональный элемент тензора проводимости при $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ можно записать в виде:

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{1}{i\omega}\left\{\Phi_{xx}(\omega + i\delta) - \Phi_{xx}(0 + i\delta)\right\} \tag{4.117}$$

где, аналогично (4.89), можно написать:

$$\Phi_{xx}(i\omega_m) = -2eT\sum_n\sum_{\mathbf{p}}\frac{p_x}{m}J_x(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \varepsilon_n, \varepsilon_n + \omega_m)G(\varepsilon_n\mathbf{p})G(\varepsilon_n + \omega_m\mathbf{p}) \tag{4.118}$$

При этом мы ввели "токовую" вершину:

$$J_\mu(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \varepsilon_n, \varepsilon_n + \omega_m) \equiv \frac{e}{m}p_\mu\Xi(\mathbf{p}, \varepsilon_n, \varepsilon_n + \omega_m) \tag{4.119}$$

разложение которой, определяется графиками Рис. 4.12 (с), в которых "затравочной" вершине сопоставляется множитель $\frac{e}{m}p_\mu$.

Соответственно, переписав (4.118) в виде:

$$\Phi_{xx}(i\omega_m) = -2e^2T\sum_n\sum_{\mathbf{p}}\frac{p_x^2}{m^2}\Xi(\mathbf{p}, \varepsilon_n, \varepsilon_n + \omega_m)G(\varepsilon_n\mathbf{p})G(\varepsilon_n + \omega_m\mathbf{p}) \tag{4.120}$$

и выполнив суммирование по $n$ и аналитическое продолжение $i\omega_m \to \omega + i\delta$ в точности также, как это делалось выше, получим для статической проводимости ($\omega \to 0$):

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2\pi}\sum_{\mathbf{p}}\frac{p_x^2}{m^2}\Xi(\mathbf{p})G^R(\mathbf{p}, 0)G^A(\mathbf{p}, 0) \tag{4.121}$$

[21] С точностью до малого вклада диамагнетизма Ландау! Более подробное обсуждение этой ситуации будет проведено ниже в главе, посвященной сверхпроводимости.

где введен статический предел $\Xi(\mathbf{p}) = \Xi(\mathbf{p}, 0 - i\delta, 0 + i\delta)$.

Приведем для справок и без вывода аналогичное общее выражение для недиагональной (холловской) проводимости в присутствие (слабого) внешнего магнитного поля $H$ (H.Fukuyama, H.Ebisawa, Y.Wada, 1969):

$$\sigma_{xy} = \frac{eH}{m}\frac{e^2}{4\pi i}\sum_{\mathbf{p}}\frac{p_x}{m}\Xi^2(\mathbf{p})\left\{G^R(\mathbf{p},0)\frac{\partial}{\partial p_x}G^A(\mathbf{p}0) - \frac{\partial}{\partial p_x}G^R(\mathbf{p},\mathbf{0})G^A(\mathbf{p},0)\right\} \tag{4.122}$$

что дает диаграммный метод расчета эффекта Холла.

## 4.5 Уравнение Бете – Солпитера, “диффузон” и “куперон”.

Итак, согласно (4.105), для расчета функции отклика плотность – плотность $\chi(\mathbf{q}\omega)$, а с ней и проводимости системы (4.106), нам необходимо научиться вычислять величину[22]:

$$\Phi^{RA}(\omega\mathbf{q}) = -\frac{1}{2\pi i}2\sum_{\mathbf{pp}'} < G^R(\mathbf{p}_+\mathbf{p}'_+, E+\omega)G^A(\mathbf{p}'_-\mathbf{p}_-, E) > \tag{4.123}$$

которая, в свою очередь, определяется двухчастичной функцией Грина вида:

$$\Phi^{RA}_{\mathbf{pp}'}(E\omega\mathbf{q}) = -\frac{1}{2\pi i} < G^R(\mathbf{p}_+\mathbf{p}'_+, E+\omega)G^A(\mathbf{p}'_-\mathbf{p}_-, E) > \tag{4.124}$$

и которая определяется графиками, показанными на Рис. 4.14 (a). Удобно ввести вершинную функцию $\Gamma_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$, определяемую равенством[23]:

$$\Phi^{RA}_{\mathbf{pp}'}(E\omega\mathbf{q}) = -\frac{1}{2\pi i}G^R(\mathbf{p}_+E+\omega)G^A(\mathbf{p}_-E)\left\{\delta_{\mathbf{pp}'} + \Gamma_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)G^R(\mathbf{p}'_+E+\omega)G^A(\mathbf{p}'_-E)\right\} \tag{4.125}$$

и графиками, показанными на Рис. 4.14 (b).

Далее удобно провести классификацию графиков для вершины на приводимые (разрезаемые по двум электронным $R$ и $A$ линиям) и неприводимые в “$R - A$ – канале” (канале “частица – дырка”). Например, на Рис. 4.14 второй и пятый графики в правой части приводимы, а остальные являются неприводимыми. Тогда ясно, что полная вершина $\Gamma_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ описывается интегральным уравнением Бете – Солпитера, показанным графически на Рис. 4.15 и имеющим аналитический вид:

$$\Gamma_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega) = U_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega) + \sum_{\mathbf{p}''}U_{\mathbf{pp}''}(\mathbf{q}\omega)G^R(E+\omega\mathbf{p}''_+)G^A(E\mathbf{p}''_-)\Gamma_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega) \tag{4.126}$$

где блок $U_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ обозначает сумму всех диаграмм, неразрезаемых (неприводимых) в $R - A$ – канале, типа показанных на Рис. 4.15 (b).

В простейшем приближении, для $U_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ можно взять только первую диаграмму из правой части Рис. 4.15 (b) или:

$$U_0(\mathbf{p}-\mathbf{p}') = \rho|v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2 \qquad \text{или} \qquad U_0 = \rho v^2 \tag{4.127}$$

[22] В дальнейшем, для краткости, всюду подразумевается $\mu = E_F \equiv E$, $T = 0$

[23] В дальнейшем изложении в этом и следующих разделах данной главы мы, в основном, следуем [16] и [17].

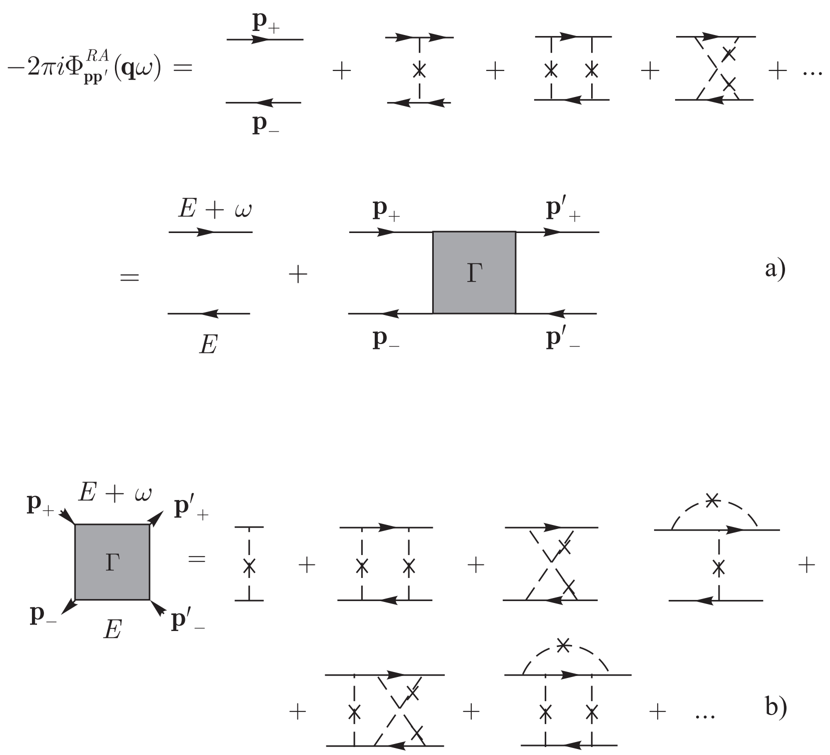



Рис. 4.14: Диаграммы для двухчастичной функции Грина (a) и вершинной части $\Gamma_{\mathbf{pp'}}(\mathbf{q}\omega)$ (b). Верхняя электронная линия соответствует запаздывающей функции Грина $G^R(\mathbf{p}_+E+\omega)$ (“частица”), а нижняя — опережающей $G^A(\mathbf{p}_-E)$ (“дырка”).

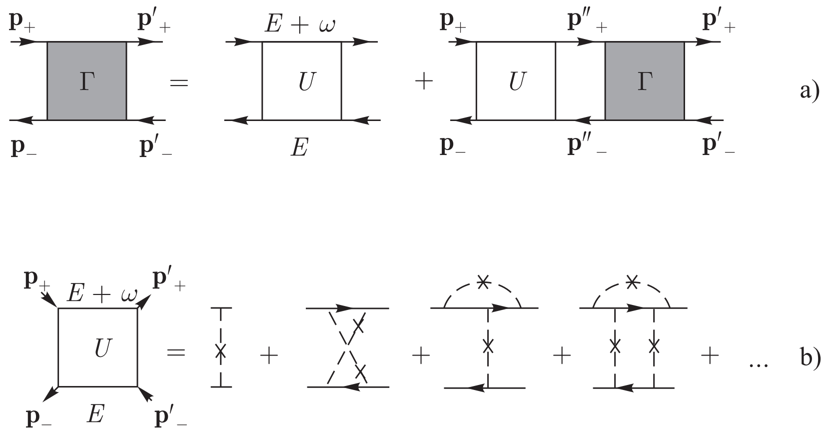



Рис. 4.15: Уравнение Бете – Солпитера для вершинной части $\Gamma_{\mathbf{pp'}}(\mathbf{q}\omega)$ (a) и графики низшего порядка для неприводимой в $R-A$ – канале вершины $U_{\mathbf{pp'}}(\mathbf{q}\omega)$ (b).

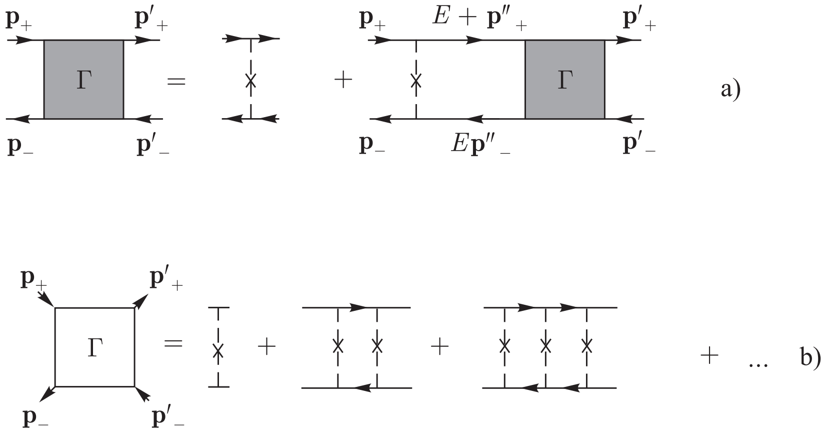



Рис. 4.16: Уравнение Бете – Солпитера для вершинной части $\Gamma_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ в “лестничном” приближении (a) и соответствующие графики низших порядков (b).

где второе равенство справедливо для точечных примесей. Тогда (4.126) приобретает вид, показанный графически на Рис. 4.16 (a), решение которого имеет вид:

$$\Gamma^0_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega) = \frac{U_0}{1 - U_0\sum_{\mathbf{p}} G^R(E+\omega\mathbf{p}_+)G^A(E\mathbf{p}_-)} \tag{4.128}$$

и определяет вершину $\Gamma_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ в виде суммы “лестничных” диаграмм, показанных на Рис. 4.16 (b).

Перейдем к явным вычислениям, причем проведем их для пространства произвольной размерности $d$. “Основной” элемент, определяющий (4.128), может быть записан как:

$$I_d(\mathbf{q}\omega) = \sum_{\mathbf{p}} G^R(E+\omega\mathbf{p}_+)G^A(E\mathbf{p}_-) =$$
$$= \int \frac{d^dp}{(2\pi)^d} G^R\left(E+\omega\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)G^A\left(E\mathbf{p}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right) = \int \frac{d^dp}{(2\pi)^d} G^R(E+\omega\mathbf{p}-\mathbf{q})G^A(E\mathbf{p}) =$$
$$= \int \frac{d^dp}{(2\pi)^d}\frac{1}{E+\omega-\xi(p)+v_Fq\cos\theta+i\gamma}\frac{1}{E-\xi(p)-i\gamma} \tag{4.129}$$

где взяли усредненные функции Грина в простейшем приближении (4.29), (4.30). Здесь скорость на уровне Ферми $v_F = \sqrt{\frac{2E}{m}}$, а затухание в модели точечных рассеивателей $\gamma = \pi\rho v^2\nu(E) = \pi U_0\nu(E)$, где $\nu(E)$ – плотность состояний электронов на уровне Ферми $E$ в $d$ – мерном пространстве для одного направления спина.

Встречающиеся ниже интегралы по полярному углу $\theta$ в $d$ – мерном пространстве, вычисляются с помощью следующего простого правила:

$$\int \frac{d^dp}{(2\pi)^d} f(p,\theta) = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_0^\infty dpp^{d-1}\Omega_{d-1}\int_0^\pi d\theta\sin^{d-2}\theta f(p,\theta) =$$
$$= \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d}\int_0^\infty dpp^{d-1}\frac{\Omega_{d-1}}{\Omega_d}\int_0^\pi d\theta\sin^{d-2}\theta f(p,\theta) \approx \nu(E)\int_{-\infty}^\infty d\xi\frac{\Omega_{d-1}}{\Omega_d}\int_0^\pi d\theta\sin^{d-2}\theta f(\xi,\theta) \tag{4.130}$$

где $\Omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$ – поверхность сферы единичного радиуса в $d$ – мерном пространстве.

Для малых $\omega$ и $q$ можно написать[24]:

$$\frac{1}{E+\omega-\xi(p)\pm v_F q\cos\theta+i\gamma}\approx$$
$$\approx\frac{1}{E-\xi(p)+i\gamma}-\frac{\omega\pm v_F q\cos\theta}{(E-\xi(p)+i\gamma)^2}+\frac{(\omega\pm v_F q\cos\theta)^2}{(E-\xi(p)+i\gamma)^3}+\cdots \tag{4.131}$$

так что:

$$I_d(q\omega)\approx\nu(E)\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\frac{\Omega_{d-1}}{\Omega_d}\int_0^\pi d\theta\sin^{d-2}\theta\frac{1}{E-\xi-i\gamma}\times$$
$$\times\left\{\frac{1}{E-\xi+i\gamma}-\frac{\omega+v_F q\cos\theta}{(E-\xi+i\gamma)^2}+\frac{(\omega+v_F q\cos\theta)^2}{(E-\xi+i\gamma)^3}+\cdots\right\} \tag{4.132}$$

Интегралы по $\xi$ элементарно вычисляются методом вычетов, так что получаем:

$$I_d(q\omega)\approx\nu(E)\frac{\Omega_{d-1}}{\Omega_d}2\pi i\int_0^\pi d\theta\sin^{d-2}\theta\left\{\frac{1}{2i\gamma}-\frac{\omega+v_F q\cos\theta}{(2i\gamma)^2}+\frac{(\omega+v_F q\cos\theta)^2}{(2i\gamma)^3}+\cdots\right\}=$$
$$=\frac{\pi}{\gamma}\nu(E)\frac{\Omega_{d-1}}{\Omega_d}\int_0^\pi d\theta\sin^{d-2}\theta\left\{\left[1+\frac{i\omega}{2\gamma}-\frac{\omega^2}{4\gamma^2}\right]+\left[\frac{iv_F q}{2\gamma}-\frac{v_F q\omega}{2\gamma^2}\right]\cos\theta-\frac{v_F^2 q^2}{4\gamma^2}\cos^2\theta\right\} \tag{4.133}$$

Интегралы по $\theta$ элементарны:

$$\frac{\Omega_{d-1}}{\Omega_d}\int_0^\pi d\theta\sin^{d-2}\theta=1 \tag{4.134}$$
$$\frac{\Omega_{d-1}}{\Omega_d}\int_0^\pi d\theta\sin^{d-2}\theta\cos\theta=0 \tag{4.135}$$
$$\frac{\Omega_{d-1}}{\Omega_d}\int_0^\pi d\theta\sin^{d-2}\theta\cos^2\theta=\frac{1}{d} \tag{4.136}$$

Тогда, с учетом $\frac{\pi}{\gamma}\nu(E)=U_0$ и $\gamma=\frac{1}{2\tau}$, окончательно получаем для знаменателя в (4.128):

$$1-U_0I_d(q\omega)=-\frac{i\omega}{2\gamma}+\frac{\omega^2}{4\gamma^2}+D_0\frac{q^2}{2\gamma}\approx-i\omega\tau+D_0\tau q^2 \tag{4.137}$$
$$1-U_0I_d^*(q\omega)\approx i\omega\tau+D_0\tau q^2 \tag{4.138}$$

где

$$D_0=\frac{1}{d}v_F^2\tau=\frac{1}{d}\frac{2E}{m}\tau=\frac{1}{d}\frac{E}{m\gamma} \tag{4.139}$$

– обычный “друдевский” коэффициент диффузии в $d$ – мерном пространстве. Соответственно из (4.128), получаем следующее типичное и весьма важное выражение для вершины с *диффузионным полюсом*:

$$\Gamma^0_{\mathbf{pp'}}(\mathbf{q}\omega)=\frac{U_0\tau^{-1}}{-i\omega+D_0q^2}=\frac{2U_0\gamma}{-i\omega+D_0q^2} \tag{4.140}$$

[24]Из последующего рассмотрения ясно, что речь идет о $\omega\ll\gamma$ и $v_Fq\ll\gamma$

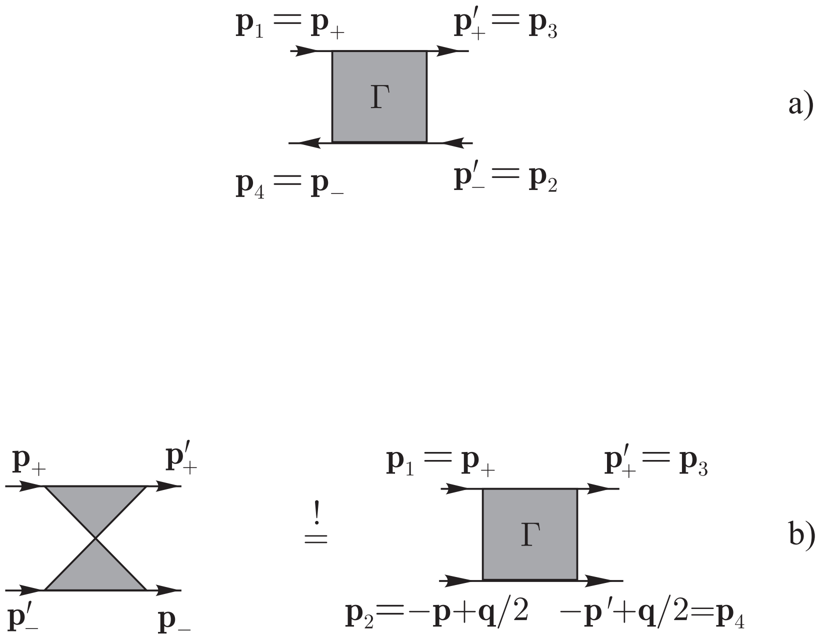



Рис. 4.17: Вершинная часть общего вида (a) и вершина, получающаяся из нее обращением направления одной из электронных линий (b). Первый график (b) получен простым “разворотом” графика (a), очевидно, что он просто совпадает с (a). Второй график (b) получается из первого обращением направления нижней линии, что возможно при наличии инвариантности относительно обращения времени.

или, так называемый *диффузон*[25].

Интересно и весьма важно заметить, что при наличии в системе инвариантности по отношению к обращению времени, полная вершинная часть $\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\mathbf{q},\omega)$ обладает следующим общим свойством:

$$\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\mathbf{q},\omega) = \Gamma_{\frac{1}{2}(\mathbf{p}-\mathbf{p}'+\mathbf{q}),\frac{1}{2}(\mathbf{p}'-\mathbf{p}+\mathbf{q})}(\mathbf{p}+\mathbf{p}',\omega) \tag{4.141}$$

В самом деле, рассмотрим вершину общего вида, показанную на Рис. 4.17 (a). Здесь проведено “упорядочение” нумерации импульсов: на нижней линии номера импульсов четные, а на верхней – нечетные. При этом меньший номер соответствует входящей линии, а больший – выходящей. Имеем общий закон сохранения:

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4 = \mathbf{p} + \mathbf{p}' \tag{4.142}$$

так что

$$\mathbf{q} = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4 = \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_2 \qquad \mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_4) \qquad \mathbf{p}' = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3) \tag{4.143}$$

Но при наличии инвариантности относительно обращения времени одночастичные состояния $\mathbf{p}$ и $-\mathbf{p}$ просто эквивалентны! Тогда мы можем обратить направление,

---

[25]Отметим, что сокращение вклада не зависящего от $\omega$ и $q$ в знаменателе (4.128), приводящее к существованию диффузионного полюса в (4.140), фактически, является следствием закона сохранения числа частиц (тождества Уорда) (С.В.Малеев, Б.П.Топерверг, 1975).

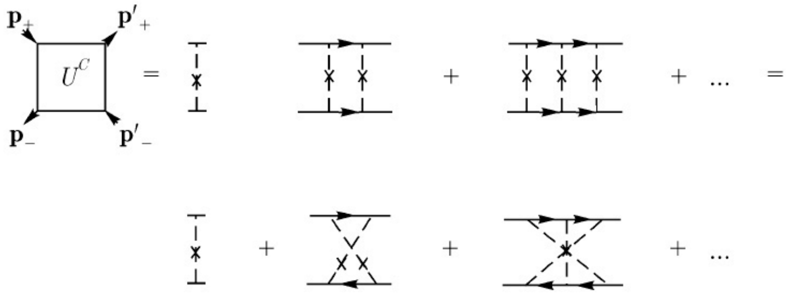



Рис. 4.18: "Куперон" — обращение направления электронной линии в диффузоне дает "лестницу" в канале "частица – частица" или последовательность "максимально перекрещивающихся" графиков в канале "частица – дырка".

скажем, нижней ("дырочной") линии, поменяв знак ее импульса. Тогда диаграмма Рис. 4.17 (a) перейдет во вторую диаграмму на Рис. 4.17 (b). При этом, соотношения (4.142) и (4.143) перейдут в:

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4 = \mathbf{q} \tag{4.144}$$

и

$$\mathbf{p}+\mathbf{p}' = \mathbf{p}_1-\mathbf{p}_4 = \mathbf{p}_3-\mathbf{p}_2 \qquad \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_4) = \frac{1}{2}(\mathbf{p}-\mathbf{p}'+\mathbf{q}) \qquad \frac{1}{2}(\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_3) = \frac{1}{2}(\mathbf{p}'-\mathbf{p}+\mathbf{q}) \tag{4.145}$$

Таким образом, обращение направления нижней линии на графике Рис. 4.17 (a), допустимое при наличии симметрии $t \to -t$, эквивалентно следующей замене в аргументах этой вершины:

$$\mathbf{q} \to \mathbf{p}+\mathbf{p}' \qquad \mathbf{p} \to \frac{1}{2}(\mathbf{p}-\mathbf{p}'+\mathbf{q}) \qquad \mathbf{p}' \to \frac{1}{2}(\mathbf{p}'-\mathbf{p}+\mathbf{q}) \tag{4.146}$$

что и дает соотношение (4.141).

Применим рассмотренную процедуру к диффузону (4.140) и графикам Рис. 4.16 (b). Видим, что обращение направления нижней линии на этих диаграммах дает "лестницу" в канале "частица – частица", или, что тоже самое, последовательность "максимально перекрещивающихся" графиков (графики Лангера – Нила (J.S.Langer, T.Neal, 1966)), что показано на Рис. 4.18. Аналитическое выражение для суммы таких диаграмм легко получается заменой переменных (4.146) в выражении для диффузона (4.140)[26]:

$$U^C_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega) = \frac{2\gamma U_0}{-i\omega + D_0(\mathbf{p}+\mathbf{p}')^2}; \qquad \mathbf{p} \approx -\mathbf{p}' \tag{4.147}$$

По причинам очевидной аналогии с графиками, возникающими при расчете куперовской неустойчивости в теории сверхпроводимости, эта сумма и результат (4.147)

[26]Разумеется, суммирование такой последовательности графиков можно провести и прямо "в лоб"!

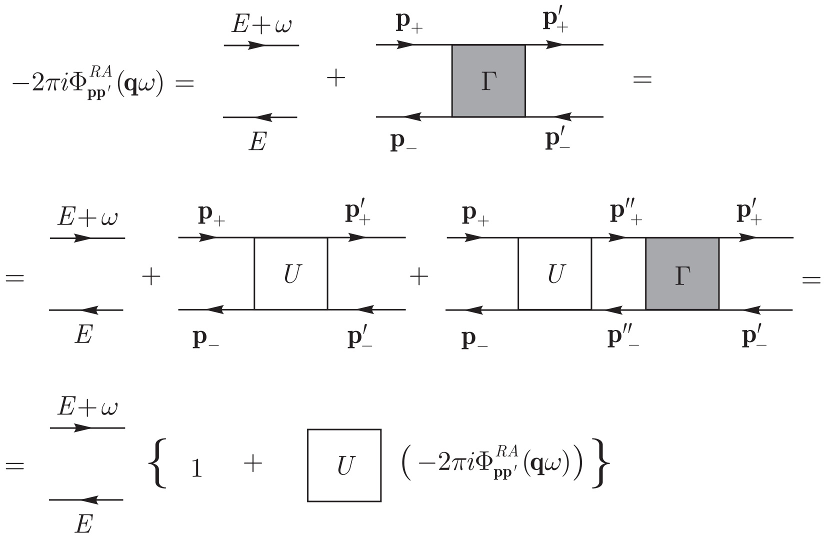



Рис. 4.19: Уравнение Бете – Солпитера для двухчастичной функции Грина.

называют *“купероном”* (Л.П.Горьков, А.И.Ларкин, Д.Е.Хмельницкий, 1979). Условие $\mathbf{p} \approx -\mathbf{p}'$ с очевидностью следует из критериев применимости диффузионного приближения (малость $q$ и $\omega$ в (4.140)) и соответствует в купероне рассмотрению частиц с почти противоположными импульсами (рассеяние “почти назад”).

Заметим теперь, что последовательность диаграмм Рис. 4.18 *неприводима* в $RA$ – канале (“частица – дырка”). Таким образом, выражение (4.147) можно использовать в качестве неприводимой вершины $U_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ в уравнении Бете – Солпитера (4.126), показанном графически на Рис. 4.15. При этом мы, конечно, получаем гораздо более “рафинированное” приближение, нежели (4.127), которое учитывает, как будет показано ниже, квантовые (локализационные) поправки к распространению электрона в системе случайно расположенных в пространстве примесей (и, соответственно, к проводимости системы).

Возвращаясь к общему анализу, воспользуемся (4.126) в (4.125) и запишем уравнение Бете – Солпитера для двухчастичной функции Грина в виде:

$$\Phi^{RA}_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega) = G^R(E+\omega\mathbf{p}_+)G^A(E\mathbf{p}_-)\left\{-\frac{1}{2\pi i}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') + \sum_{\mathbf{p}'} U_{\mathbf{pp}''}(\mathbf{q}\omega)\Phi^{RA}_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega)\right\} \tag{4.148}$$

показанном графически на Рис. 4.19. Входящее сюда произведение двух гриновских функций можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned} & G^R\left(E+\omega\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)G^A\left(E\mathbf{p}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right) = \\ &= \frac{1}{(E+\omega-\xi(\mathbf{p}_+)-\Sigma^R(E+\omega,\mathbf{p}_+))\,(E+\xi(\mathbf{p}_-)-\Sigma^A(E,\mathbf{p}_-))} = \\ &= \left\{\frac{1}{E-\xi(\mathbf{p}_-)-\Sigma^A(E,\mathbf{p}_-)} - \frac{1}{E+\omega-\xi(\mathbf{p}_+)-\Sigma^R(E+\omega,\mathbf{p}_+)}\right\}\times \\ &\times\frac{1}{\omega+(\xi(\mathbf{p}_-)-\xi(\mathbf{p}_+))-\Sigma^R+\Sigma^A} = \end{aligned}$$

$$= -\frac{\Delta G_{\mathbf{p}}}{\omega + (\xi(\mathbf{p}_-) - \xi(\mathbf{p}_+)) - \Sigma^R + \Sigma^A} \equiv -\frac{G^R - G^A}{(G^R)^{-1} - (G^A)^{-1}} \qquad (4.149)$$

где $\Delta G_{\mathbf{p}} = G^R(E\mathbf{p}_-) - G^A(E+\omega\mathbf{p}_+)$. Тогда, с учетом (4.149) и $\xi(\mathbf{p}_-) - \xi(\mathbf{p}_+) \approx -\frac{1}{m}\mathbf{pq}$, переписываем (4.148) в виде:

$$\left\{\omega - \frac{1}{m}\mathbf{pq} - \Sigma^R(E+\omega\mathbf{p}_+) + \Sigma^A(E\mathbf{p}_-)\right\}\Phi^{RA}_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega) =$$
$$= \Delta G_{\mathbf{p}}\left\{\frac{1}{2\pi i}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') - \sum_{\mathbf{p}''} U_{\mathbf{pp}''}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega)\right\} \qquad (4.150)$$

Иногда (4.150) называют обобщенным кинетическим уравнением.

Приведем без доказательства также точное тождество Уорда, которое связывает собственно – энергетические части и неприводимую вершинную часть в рассматриваемой нами примесной системе (D.Vollhardt, P.Wölfle, 1980):

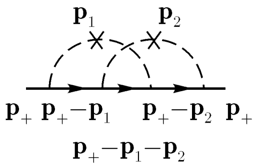
$$\Sigma^R(E+\omega\mathbf{p}_+) - \Sigma^A(E\mathbf{p}_-) = \sum_{\mathbf{p}'} U_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)\Delta G_{\mathbf{p}'} \qquad (4.151)$$

Это тождество играет важную роль при проверке самосогласованности используемых диаграммных приближений. Полезно оно и при выводе общих уравнений, используемых ниже при построении самосогласованной теории локализации.

Приведем только основную идею доказательства тождества Уорда (4.151). Фактически, это тождество отражает тот факт, что все диаграммы для неприводимой вершины $U_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ могут быть получены из “скелетных” графиков для собственно – энергетической части путем “разрезания” электронной линии всеми возможными способами. Рассмотрим в качестве примера график второго порядка для собственно – энергетической части $\Sigma^{(2)}_{\mathbf{p}}$, показанный на Рис. 4.20 (a). Тогда, прямыми вычислениями, можно получить:

$$\Delta\Sigma^{(2)}_{\mathbf{p}} = \Sigma^{R(2)}_{\mathbf{p}_+} - \Sigma^{A(2)}_{\mathbf{p}_-} =$$
$$= \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2} U(\mathbf{p}_1)U(\mathbf{p}_2)\left\{G^R_{\mathbf{p}_+-\mathbf{p}_1}G^R_{\mathbf{p}_+-\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2}G^R_{\mathbf{p}_+-\mathbf{p}_2} - G^A_{\mathbf{p}_--\mathbf{p}_1}G^A_{\mathbf{p}_--\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2}G^A_{\mathbf{p}_--\mathbf{p}_2}\right\} =$$
$$= \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2} U(\mathbf{p}_1)U(\mathbf{p}_2)\left\{G^R_{\mathbf{p}_+-\mathbf{p}_1}G^R_{\mathbf{p}_+-\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2}\Delta G_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_2} + G^R_{\mathbf{p}_+-\mathbf{p}_1}\Delta G^R_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2}G^A_{\mathbf{p}_--\mathbf{p}_2} + \right.$$
$$\left. + \Delta G_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_1}G^A_{\mathbf{p}_--\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2}G^A_{\mathbf{p}_--\mathbf{p}_2}\right\} =$$
$$= \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2}\left\{U(\mathbf{p}_1)U(\mathbf{p}-\mathbf{p}')G^R_{\mathbf{p}_+-\mathbf{p}_1}G^R_{\mathbf{p}'_+-\mathbf{p}_1} - U(\mathbf{p}_1)U(\mathbf{p}-\mathbf{p}'-\mathbf{p}_1)G^R_{\mathbf{p}_+-\mathbf{p}_1}G^A_{\mathbf{p}'_-+\mathbf{p}_1} + \right.$$
$$\left. + U(\mathbf{p}-\mathbf{p}')U(\mathbf{p}_2)G^A_{\mathbf{p}'_--\mathbf{p}_2}G^A_{\mathbf{p}_--\mathbf{p}_2}\right\}\Delta G_{\mathbf{p}'} = \sum_{\mathbf{p}'} U^{(2)}_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)\Delta G_{\mathbf{p}'} \qquad (4.152)$$

Теперь можно непосредственно убедиться, что полученное здесь выражение для $U^{(2)}_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ (определяемое выражением в фигурных скобках в предпоследнем выражении) дается диаграммами, показанными на Рис. 4.20 (b), которые получаются всеми возможными “разрезаниями” внутренних электронных линий в $\Sigma^{(2)}(\mathbf{p})$ (и обращением направления одной из остающихся неразрезанными). Обобщение таких рассуждений на произвольный порядок теории возмущений и дает доказательство тождества Уорда (4.151).



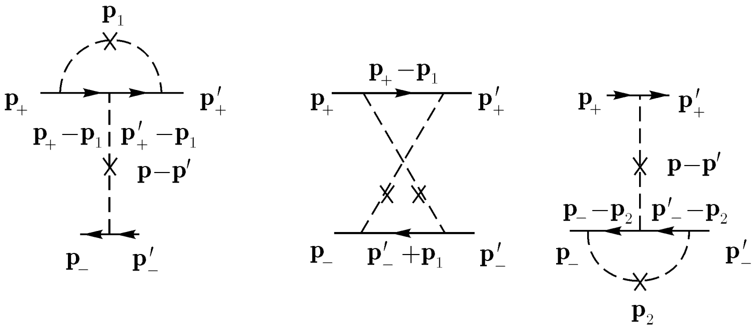




Рис. 4.20: Типичный график второго порядка для собственно – энергетической части (a) и соответствующие ему графики для неприводимой вершины $U_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ в тождестве Уорда (b).

## 4.6 Квантовые поправки, самосогласованная теория и переход Андерсона.

### 4.6.1 Квантовые поправки к проводимости.

Информация, содержащаяся в двухчастичной функции Грина (4.124), является, в некотором смысле, излишней. Мы видели, что для расчета проводимости системы нам достаточно знать (4.123), т.е. двухчастичную функцию Грина, просуммированную по импульсам $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$. Для нее из (4.150) можно получить (приближенно!) замкнутую систему уравнений. Для этого просуммируем по $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ обе части уравнения (4.150), воспользовавшись при этом тождеством Уорда (4.151). Тогда сразу же получаем:

$$\omega\Phi^{RA}(\omega\mathbf{q}) - v_F q\Phi_1^{RA}(\omega\mathbf{q}) = -N(E) \tag{4.153}$$

где ввели

$$\Phi_1^{RA}(\omega\mathbf{q}) = 2\sum_{\mathbf{pp}'}(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{q}})\Phi_{\mathbf{pp}'}^{RA}(\omega\mathbf{q}) \tag{4.154}$$

Здесь $\hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\mathbf{q}}$ – единичные вектора в направлениях $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$, $|\mathbf{p}| \approx |\mathbf{p}'| \approx p_F$, $v_F = \frac{p_F}{m} = \sqrt{\frac{2E}{m}}$, а $N(E)$ – плотность состояний на уровне Ферми для обеих проекций электронного спина:

$$N(E) = 2\nu(E) = -\frac{2}{\pi}\sum_{\mathbf{p}} ImG^R(E\mathbf{p}) = -\lim_{\omega\to 0, q\to 0}\frac{2}{2\pi i}\sum_{\mathbf{p}}\Delta G_{\mathbf{p}} \tag{4.155}$$

где появление спиновой “двойки” связано с ее наличием в определениях (4.88), (4.154). Мы можем ограничиться в правой части (4.153) пределом, указанным в (4.155), поскольку $N(E)$ практически постоянна на интервале энергий $\omega \ll E$, $v_F q \ll E$.

Но теперь у нас появилась новая функция $\Phi_1^{RA}(\omega\mathbf{q})$, определенная в (4.154). Для нее тоже нужно написать уравнение, которое может быть выведено из (4.150). Для этого умножим (4.150) на $(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{q}})$ и опять просуммируем обе части уравнения по $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ с использованием тождества Уорда (4.151), а также следующего приближенного представления[27]:

$$\sum_{\mathbf{p}'}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(\omega\mathbf{q}) \approx -\frac{\Delta G_{\mathbf{p}}}{2\pi i\nu(E)}\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''}\left\{1+d(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{q}})(\hat{\mathbf{p}}''\hat{\mathbf{q}})\right\}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}(\omega\mathbf{q}) \tag{4.161}$$

получаем уравнение:

$$[\omega+M(\mathbf{q}\omega)]\,\Phi_1^{RA}(\omega\mathbf{q})-\frac{1}{d}v_F q\Phi^{RA}(\omega\mathbf{q})=0 \tag{4.162}$$

где ввели так называемое *релаксационное ядро*:

$$M(\mathbf{q}\omega)=2i\gamma+\frac{id}{2\pi\nu(E)}\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{q}})\Delta G_{\mathbf{p}}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega)\Delta G_{\mathbf{p}'}(\hat{\mathbf{p}}'\hat{\mathbf{q}}) \tag{4.163}$$

где $\gamma=\pi\rho v^2\nu(E)$ – определенная выше борновская частота рассеяния на примесях. Уравнения (4.153) и (4.162) образуют замкнутую систему, позволяющую выразить интересующую нас двухчастичную функцию $\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega)$ через $M(\mathbf{q}\omega)$, которая, в свою очередь, определяется согласно (4.163) через неприводимую вершину $U_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega)$.

### Технические детали вывода:

Перейдем теперь к подробному выводу (4.162) и (4.163). Умножение обеих частей (4.150) на $\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}$ и последующее суммирование по $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ дает:

$$\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\left[\omega-\frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{m}-\underbrace{\Sigma^R(E+\omega,\mathbf{p}_+)+\Sigma^A(E\mathbf{p}_-)}_{-\sum_{\mathbf{p}''}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}(\mathbf{q}\omega)\Delta G_{\mathbf{p}''}}\right]\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega)=$$

$$=\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\Delta G_{\mathbf{p}}\frac{1}{2\pi i}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')-\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\Delta G_{\mathbf{p}}\sum_{\mathbf{p}''}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega) \tag{4.164}$$

[27] Заметим, что представление (4.161), фактически представляет собой учет первых двух членов следующего разложения в ряд по полиномам Лежандра:

$$\sum_{\mathbf{p}'}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}=\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta_{\mathbf{p}\mathbf{q}})\Phi^l_p\approx\Phi^0_{\mathbf{p}}+\cos\theta_{\mathbf{p}\mathbf{q}}\Phi^1_{\mathbf{p}}+\cdot \tag{4.156}$$

где $\theta_{\mathbf{p}\mathbf{q}}$ – угол между векторами $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$. Полагая $\Phi^0_{\mathbf{p}}\sim\Phi^1_{\mathbf{p}}\sim\Delta G_{\mathbf{p}}$, можем написать:

$$\Phi^0_{\mathbf{p}}=-[2\pi i\nu(E)]^{-1}\Delta G_{\mathbf{p}}\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}(\omega\mathbf{q}) \tag{4.157}$$

$$\Phi^1_{\mathbf{p}}=-[2\pi i\nu(E)]^{-1}\Delta G_{\mathbf{p}}\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''}\frac{(\mathbf{p}''\hat{\mathbf{q}})}{p_F}\Phi_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}(\omega\mathbf{q}) \tag{4.158}$$

что и было сделано в (4.161). При $\omega\to 0,\ q\to 0$, с учетом (4.155) и $|\mathbf{p}|\approx|\mathbf{p}'|\approx p_F$, имеем:

$$\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}=-\frac{1}{2\pi i\nu(E)}\sum_{\mathbf{p}}\Delta G_{\mathbf{p}}\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}=\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'} \tag{4.159}$$

$$\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}=-\frac{d}{2\pi i\nu(E)}\sum_{\mathbf{p}}\Delta G_{\mathbf{p}}\frac{(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})^2}{p_F^2}\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''}(\mathbf{p}''\hat{\mathbf{q}})\Phi^{RA}_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}=\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''}(\mathbf{p}''\hat{\mathbf{q}})\Phi^{RA}_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'} \tag{4.160}$$

где $d$ – размерность пространства.

где разность собственно – энергетических частей в левой части переписана с помощью тождества Уорда (4.151). Тогда имеем:

$$\omega\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega)-\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\underbrace{\frac{(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})^2}{m^2}}_{\frac{1}{d}\frac{p^2}{m^2}=\frac{2E}{dm}}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega)-\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})}{m}\sum_{\mathbf{p}''}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\Delta G_{\mathbf{p}''}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega)=$$

$$=\underbrace{\sum_{\mathbf{p}}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\frac{\Delta G_{\mathbf{p}}}{2\pi i}}_{\text{Зануляется при интегрировании по углу!}}-\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\Delta G_{\mathbf{p}}\sum_{\mathbf{p}''}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega) \tag{4.165}$$

что дает:

$$\omega\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega)+\underbrace{\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\Delta G_{\mathbf{p}}\sum_{\mathbf{p}''}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega)}_{(I)}=$$

$$=\underbrace{\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\sum_{\mathbf{p}''}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\Delta G_{\mathbf{p}''}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega)}_{(II)}+q\frac{2E}{dm}\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega) \tag{4.166}$$

Рассмотрим по отдельности вклады $(I)$ и $(II)$. С использованием (4.161) имеем:

$$(I)=\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\Delta G_{\mathbf{p}}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\sum_{\mathbf{p}'}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}=$$

$$=-\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\Delta G_{\mathbf{p}}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\frac{\Delta G_{\mathbf{p}''}}{2\pi i\nu(E)}\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}'''}\left[1+d(\mathbf{p}''\hat{\mathbf{q}})(\mathbf{p}'''\hat{\mathbf{q}})/p_F^2\right]\Phi^{RA}_{\mathbf{p}'''\mathbf{p}'}=$$

$$=\underbrace{\frac{i}{2\pi\nu(E)}\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\Delta G_{\mathbf{p}}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\Delta G_{\mathbf{p}''}\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}'''}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}'''\mathbf{p}}}_{(III)}+$$

$$+\frac{id}{2\pi\nu(E)p_F^2}\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})\Delta G_{\mathbf{p}}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\Delta G_{\mathbf{p}''}(\mathbf{p}''\hat{\mathbf{q}})\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}'''}\frac{\mathbf{p}'''\hat{\mathbf{q}}}{m}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}'''\mathbf{p}'} \tag{4.167}$$

Аналогичным образом:

$$(II)=\sum_{\mathbf{p}}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\sum_{\mathbf{p}''}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\Delta G_{\mathbf{p}''}\sum_{\mathbf{p}'}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}=$$

$$=-\sum_{\mathbf{p}}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\sum_{\mathbf{p}''}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\Delta G_{\mathbf{p}''}\frac{\Delta G_{\mathbf{p}}}{2\pi i\nu(E)}\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}'''}\left\{1+d(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})(\mathbf{p}'''\hat{\mathbf{q}})/p_F^2\right\}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}'''\mathbf{p}'}=$$

$$=(III)+\frac{id}{2\pi\nu(E)}\sum_{\mathbf{p}}\underbrace{\frac{(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})^2}{p_F^2}}_{1/d}\Delta G_{\mathbf{p}}\sum_{\mathbf{p}''}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\Delta G_{\mathbf{p}''}\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}'''}\frac{\mathbf{p}'''\hat{\mathbf{q}}}{m}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}'''\mathbf{p}'}=$$

$$=(III)+\sum_{\mathbf{p}''}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\Delta G_{\mathbf{p}''}\sum_{\mathbf{p}'\mathbf{p}'''}\frac{\mathbf{p}'''\hat{\mathbf{q}}}{m}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}'''\mathbf{p}'}=(III)-2i\gamma\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{m}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \tag{4.168}$$

где при переходе к последнему равенству снова использовали тождество Уорда (4.151) и переписали разность собственно – энергетических частей, воспользовавшись простейшим приближением (4.25) как $\Sigma^A-\Sigma^R=2iIm\Sigma^A=2i\gamma$. Тогда из (4.167) и (4.168) получаем:

$$(I)-(II)=2i\gamma\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}+\frac{id}{2\pi\nu(E)p_F^2}\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})\Delta G_{\mathbf{p}}U_{\mathbf{p}\mathbf{p}''}\Delta G_{\mathbf{p}''}(\mathbf{p}''\hat{\mathbf{q}})\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}=$$

$$=M(\mathbf{q}\omega)\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\frac{\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}}}{m}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \tag{4.169}$$

где $M(\mathbf{q}\omega)$ определено в (4.163). В результате (4.166) сводится к (4.162), что и требовалось!

В принципе, все эти манипуляции "почти точные". Наиболее серьезное упрощение, которое было сделано, связано с использованием простейшего приближения для собственно – энергетической части (4.25) при преобразовании (4.168). Если им не пользоваться, возникнет просто более общее (по сравнению с (4.163)) выражение для релаксационного ядра:

$$M(\mathbf{q}\omega) = \frac{1}{2\pi i\nu(E)}\sum_{\mathbf{p}}\Delta G_{\mathbf{p}}\left[\Sigma^R(E+\omega\mathbf{p}_+) - \Sigma^A(E\mathbf{p}_-)\right] + \frac{id}{2\pi\nu(E)p_F^2}\sum_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})\Delta G_{\mathbf{p}}U_{\mathbf{pp}'}\Delta G_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}'\hat{\mathbf{q}}) \tag{4.170}$$

Дальше все зависит от того, какое приближение мы будем использовать для неприводимой вершины $U_{\mathbf{pp}'}$, но конкретные результаты можно получить только используя полученные выше приближенные выражения, которые, строго говоря, оправданы лишь в пределе достаточно слабого беспорядка: $\gamma \ll E$. Тем не менее, мы увидим, что введение некоторой процедуры самосогласования позволит выйти за пределы этих простейших приближений.

Решая теперь систему уравнений (4.153) и (4.162), находим:

$$\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega) = -N(E)\frac{\omega + M(\mathbf{q}\omega)}{\omega^2 + \omega M(\mathbf{q}\omega) - \frac{1}{d}v_F^2 q^2} \tag{4.171}$$

Используя выражение (4.102), немедленно получаем функцию отклика плотность – плотность в следующем виде:

$$\chi(\mathbf{q}\omega) = \omega\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega) + N(E_F) = v_F q\Phi_1^{RA}(\mathbf{q}\omega) = -N(E)\frac{\frac{1}{d}v_F^2 q^2}{\omega^2 + \omega M(\mathbf{q}\omega) - \frac{1}{d}v_F^2 q^2} \tag{4.172}$$

При малых $\omega$, пренебрегая $\omega^2$ в знаменателе (4.171) или (4.172), можем написать:

$$\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega) = -N(E)\frac{1}{\omega + iD_E(\mathbf{q}\omega)q^2} \tag{4.173}$$

$$\chi(\mathbf{q}\omega) = N(E)\frac{iD_E(\mathbf{q}\omega)q^2}{\omega + iD_E(\mathbf{q}\omega)q^2} \tag{4.174}$$

где ввели, по определению, *обобщенный коэффициент диффузии*:

$$D_E(\mathbf{q}\omega) = i\frac{2E}{dm}\frac{1}{M(\mathbf{q}\omega)} = \frac{v_F^2}{d}\frac{i}{M(\mathbf{q}\omega)} \tag{4.175}$$

непосредственно выражающийся через релаксационное ядро.

Используя общее выражение (4.106) для проводимости, получаем:

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{i}{\omega + M(0\omega)} \to e^2 D_E(00)N(E) \qquad \text{при} \qquad \omega \to 0 \tag{4.176}$$

где учли, что $\frac{n}{N(E)} = \frac{2E}{d}$ ($n$ – плотность электронов).

Таким образом, все интересные характеристики рассматриваемой системы выражаются через релаксационное ядро (4.163). Весь вопрос в том, в каком приближении его можно посчитать! Если для $U_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ в (4.163) взять простейшее приближение (4.127), то из (4.163), в пределе слабого беспорядка (когда это приближение как раз и справедливо!) имеем[28]:

$$M(00) = \frac{i}{\tau_{tr}} = 2\pi i\rho\sum_{\mathbf{p}'}\delta\left(E - \frac{\mathbf{p}'^2}{2m}\right)|v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2(1 - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{p}}') \tag{4.177}$$

[28] В $\Delta G_p$ тут просто взят предел $\gamma \to 0$.

– обычное выражение для *транспортного* времени релаксации $\tau_{tr}$ за счет рассеяния на примесях в металле, определяющее величину остаточного сопротивления (напомним, что у нас $E = E_F$ и $\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{p}}' = \cos\theta_{\mathbf{pp}'}$), а (4.176) сводится к стандартной формуле Друде:

$$\sigma = \frac{ne^2}{m}\tau_{tr} \tag{4.178}$$

при $\omega = 0$, или

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{\tau_{tr}}{1 - i\omega\tau_{tr}} \tag{4.179}$$

для конечной частоты внешнего поля.

Возьмем теперь в качестве $U_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ куперон (4.147). Тогда понятно, что наличие диффузионного полюса может, вообще говоря, привести к *расходимости* релаксационного ядра $M(0\omega)$ при $\omega \to 0$, поскольку при $\omega \to 0$:

$$\int dk \frac{k^{d-1}}{\omega + iD_0k^2} \sim \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\omega}} & d = 1 \\ \ln\omega & d = 2 \end{cases} \tag{4.180}$$

Эта ("инфракрасная") расходимость возникает при $d \leq 2$[29]. Поэтому, наряду с обычным друдевским (конечным при $\omega \to 0$) вкладом, может возникнуть сингулярный (в "инфракрасном" пределе $\omega \to 0$) вклад в $M(0\omega)$, который приводит к серьезным последствиям (локализация Андерсона). Наша дальнейшая задача состоит в аккуратном выделении такого вклада.

Подставляя (4.147) в (4.163) имеем ($q \to 0,\ \omega \to 0$):

$$\begin{aligned} M(0\omega) &= 2i\gamma - \frac{2id}{\pi\nu(E)p_F^2}\sum_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})ImG^R(E\mathbf{p})U_{\mathbf{pp}'}(0\omega)ImG^R(E\mathbf{p}')(\mathbf{p}'\hat{\mathbf{q}}) = \\ &= 2i\gamma + \frac{4dU_0\gamma}{\pi\nu(E)p_F^2}\sum_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})ImG^R(E\mathbf{p})\frac{1}{\omega + iD_0(\mathbf{p}+\mathbf{p}')^2}ImG^R(E\mathbf{p}')(\mathbf{p}'\hat{\mathbf{q}}) \end{aligned} \tag{4.181}$$

Сделаем здесь замену переменной: $\mathbf{k} = \mathbf{p} + \mathbf{p}';\ \mathbf{p}' = \mathbf{k} - \mathbf{p}$. Тогда (4.181) перепишется как:

$$\begin{aligned} M(0\omega) = 2i\gamma &+ \frac{4dU_0\gamma}{\pi\nu(E)p_F^2}\sum_{\mathbf{pk}}(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})ImG^R(E\mathbf{p})\frac{1}{\omega + iD_0\mathbf{k}^2}ImG^R(E\mathbf{p}-\mathbf{k})(\mathbf{k}\hat{\mathbf{q}}) - \\ &- \frac{4dU_0\gamma}{\pi\nu(E)p_F^2}\sum_{\mathbf{pk}}\underbrace{(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})^2}_{\frac{1}{d}p_F^2}ImG^R(E\mathbf{p})\frac{1}{\omega + iD_0\mathbf{k}^2}ImG^R(E\mathbf{p}-\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{4.182}$$

Заметим теперь, что второе слагаемое здесь конечно при $\omega \to 0$ (можно сказать, что оно просто "перенормирует" член $2i\gamma$), а в третьем сингулярный при $\omega \to 0$ вклад возникает из члена разложения подинтегрального выражения нулевого порядка по $k \to 0$ (тогда появляется интеграл типа (4.180)). В итоге запишем:

$$M(0\omega) \approx 2i\gamma - 4U_0^2\sum_{\mathbf{p}}(ImG^R(E\mathbf{p}))^2\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{\omega + iD_0\mathbf{k}^2} \tag{4.183}$$

---

[29] Для $d \geq 2$ в (4.180) нужно еще ввести обрезание на верхнем пределе при $k \sim l^{-1} \sim v_F^{-1}\gamma$ (что связано с критерием применимости диффузионного приближения (см. сноску в связи с (4.131)).

Теперь учтем, что в используемых нами приближениях:

$$\sum_{\mathbf{p}}(ImG^R(E\mathbf{p}))^2 \approx \nu(E)\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\frac{\gamma^2}{[(E-\xi)^2+\gamma^2]^2} = \frac{\pi}{2\gamma}\nu(E) \tag{4.184}$$

так что:

$$2U_0\sum_{\mathbf{p}}(ImG^R(E\mathbf{p}))^2 = \pi U_0\nu(E)\gamma^{-1} = 1 \tag{4.185}$$

Соответственно, (4.183) сводится к:

$$M(0\omega) = 2i\gamma - 2U_0\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{\omega + iD_0\mathbf{k}^2} \tag{4.186}$$

Рассмотрим теперь подробно случай двумерной системы ($d = 2$).
Нам нужно посчитать интеграл:

$$I = \sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{\omega+iD_0\mathbf{k}^2} = \frac{\Omega_2}{(2\pi)^2}\int_0^{\Lambda}dkk\frac{1}{\omega+iD_0k^2} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{\Lambda}dkk\frac{1}{\omega+iD_0k^2} =$$
$$= \frac{1}{4\pi}\int_0^{\Lambda^2}dx\frac{1}{\omega+iD_0x} = \frac{1}{4\pi iD_0}\int_0^{\Lambda^2}\frac{1}{x+\frac{\omega}{iD_0}} = \frac{1}{4\pi iD_0}\int_0^{\Lambda^2}dx\frac{x+i\frac{\omega}{D_0}}{x^2+\frac{\omega^2}{D_0^2}} \tag{4.187}$$

Видим, что:

$$ReI = \frac{1}{4\pi D_0}\frac{\omega}{D_0}\int_0^{\Lambda^2}dx\frac{1}{x^2+\frac{\omega^2}{D_0^2}} \to 0 \qquad \text{при} \qquad \omega \to 0 \tag{4.188}$$

в силу сходимости интеграла. С другой стороны:

$$ImI = -\frac{1}{4\pi D_0}\int_0^{\Lambda^2}dx\frac{x}{x^2+\frac{\omega^2}{D_0^2}} \tag{4.189}$$

– логарифмически расходится при $\omega \to 0$:

$$ImI = -\frac{1}{8\pi D_0}\int_0^{\Lambda^4}dz\frac{1}{z+\frac{\omega^2}{D_0^2}} = -\frac{1}{8\pi D_0}\ln\left(1+\frac{D_0^2\Lambda^4}{\omega^2}\right) \tag{4.190}$$

Соответственно, при $\omega \to 0$ имеем:

$$ImI \approx -\frac{1}{8\pi D_0}\ln\frac{D_0^2\Lambda^4}{\omega^2} = -\frac{1}{4\pi D_0}\ln\frac{D_0\Lambda^2}{\omega} =$$
$$= -\frac{1}{4\pi D_0}\ln\frac{1}{\omega\tau} = -\frac{m}{2}\frac{1}{2\pi E\tau}\ln\frac{1}{\omega\tau} \tag{4.191}$$

где мы выбрали параметр обрезания $\Lambda$ из условия[30]:

$$D_0\Lambda^2 \sim \frac{1}{\tau} = 2\gamma \tag{4.192}$$

что дает:

$$\Lambda \sim \sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{1}{\tau} = 2\sqrt{\frac{2m}{E}}\gamma \sim l^{-1} \tag{4.193}$$

где $l = v_F\tau$ – длина свободного пробега, или

$$v_F\Lambda \sim \frac{1}{\tau} = 2\gamma \tag{4.194}$$

с учетом $v_F = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ и $D_0 = \frac{E\tau}{m}$ для $d = 2$. Соответственно, получаем

$$-2U_0I \approx imU_0\frac{1}{2\pi E\tau}\ln\frac{1}{\omega\tau} \tag{4.195}$$

[30]Ниже мы еще обсудим этот выбор подробнее!

Учтем еще, что для $d=2$ $\nu(E)=\frac{m}{2\pi}$, так что $mU_0=\frac{m}{2\pi\nu(E)\tau}=\frac{1}{\tau}$.
В итоге, (4.186) сводится к:

$$M(0\omega)=\frac{i}{\tau}+\frac{i}{\tau}\frac{1}{2\pi E\tau}\ln\frac{1}{\omega\tau} \tag{4.196}$$

Используя это выражение в (4.175), находим обобщенный коэффициент диффузии двумерной системы в виде:

$$D(\omega)=D_0\frac{i}{\tau}\frac{1}{M(\omega)}=\frac{D_0}{1+\frac{1}{2\pi E\tau}\ln\frac{1}{\omega\tau}}\approx$$
$$\approx D_0\left\{1-\frac{1}{2\pi E\tau}\ln\frac{1}{\omega\tau}\right\} \tag{4.197}$$

где в последнем равенстве учли, что все наши процедуры являются обоснованными лишь в условиях слабого беспорядка, когда выполняется неравенство $2\pi E\tau\gg 1$. Второе слагаемое в (4.197) описывает квантовые поправки к процессу диффузии (проводимости) в двумерной системе электронов с примесями (Л.П.Горьков, А.И.Ларкин, Д.Е.Хмельницкий, 1979). Поскольку знак этих поправок (в данном простейшем случае потенциального рассеяния) отрицательный (они уменьшают коэффициент диффузии по сравнению с его классическим "друдевским" значением $D_0$), то часто говорят также о явлении "слабой локализации"[31].

Все рассмотрение проводилось пока для $T=0$. При конечных температурах существенны процессы неупругого рассеяния электронов, приводящие к процессам "сбоя фазы" (декогеренции) волновых функций, с характерным временем $\tau_\phi=AT^{-p}$ (степень $p$ зависит от типа неупругого процесса). Поэтому, выражение (4.197) заменяется на:

$$D(\omega)=D_0\left\{1-\frac{1}{2\pi E\tau}\ln\frac{1}{Max\left[\omega,\frac{1}{\tau_\phi}\right]\tau}\right\} \tag{4.198}$$

В частности, для $\omega=0$, получаем статическую проводимость в виде:

$$\sigma=\sigma_0\left\{1-\frac{1}{2\pi E\tau}\ln\frac{\tau_\phi}{\tau}\right\}=\sigma_0\left\{1-\frac{p}{2\pi E\tau}\ln\frac{T_0}{T}\right\} \tag{4.199}$$

где $T_0$ – некоторый масштаб температуры (энергии). Используя $\frac{n}{N(E)}=2\pi\frac{n}{m}=E$ (что справедливо для $d=2$), получаем $\sigma_0=\frac{ne^2}{m}\tau=\frac{e^2}{2\pi}E\tau$, так что (4.199) переписывается также как:

$$\sigma=\frac{e^2}{2\pi}E\tau\left\{1-\frac{1}{2\pi E\tau}\ln\frac{\tau_\phi}{\tau}\right\} \tag{4.200}$$

Заметим, что $\frac{e^2}{2\pi}=\frac{e^2}{2\pi\hbar}=\frac{e^2}{h}$ определяет квантовый масштаб проводимости: $\frac{e^2}{\hbar}=2.5\cdot10^{-4}$ом$^{-1}$.

Логарифмическая температурная зависимость проводимости типа (4.199), (4.200) действительно наблюдается экспериментально при достаточно низких температурах практически для любых двумерных металлических систем (тонкие пленки, двумерный электронный газ в МОП – структурах и т.п.) [18, 19].

[31] Если формально устремить в (4.197) $\omega\to 0$, то, в силу логарифмической расходимости, квантовая поправка сравнивается и превосходит классический вклад, указывая на возможность обращения статической проводимости системы при $T=0$ в нуль (переход металл – диэлектрик или переход Андерсона). Разумеется, при этом мы выходим за область применимости рассматриваемых выражений и тут требуется специальное рассмотрение, которое будет проведено ниже.

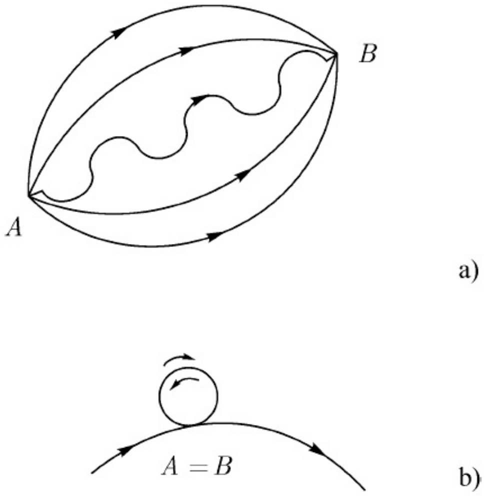



Рис. 4.21: Фейнмановские траектории частицы, распространяющейся из точки $A$ в точку $B$ (a) и пример траектории с самопересечением (b).

### Наглядная интерпретация квантовых поправок.

Рассмотрим физический смысл найденных нами квантовых поправок к проводимости (А.И.Ларкин, Д.Е.Хмельницкий, 1980). Мы (пока!) рассматриваем случай слабого беспорядка, длина свободного пробега $l \gg \frac{\hbar}{p_F}$ или (в системе $\hbar = 1$) $p_F l \gg 1$, $E\tau \gg 1$. Стартуя с обычного "металлического" режима проводимости, ищем поправки от "слабой локализации":

$$\sigma = \sigma_0 + \delta\sigma; \qquad |\delta\sigma| \ll \sigma_0 \tag{4.201}$$

Обычная друдевская проводимость (результат стандартной кинетической теории), как мы только что видели, $\sigma_0 \sim \frac{e^2}{\hbar^2}E\tau$. В этой теории, последующие акты рассеяния рассматриваются как независимые (некоррелированные). При этом электроны совершают обычную (классическую) диффузию, так что для частицы, находящейся в момент времени $t = 0$ в точке $\mathbf{r}_0$, вероятность оказаться в момент $t > 0$ в точке $\mathbf{r}$ дается решением уравнения диффузии и в $d$ – мерном пространстве равна:

$$P(\mathbf{r}t) = \frac{e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2}{4D_0 t}}}{(4\pi D_0 t)^{d/2}} \tag{4.202}$$

где классический коэффициент диффузии $D_0 = v_F^2\tau/d$. Эта вероятность существенно отлична от нуля в пределах объема $V_{diff}$, определяемого условием $|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2 \ll 4D_0 t$, где:

$$P(\mathbf{r}t) \sim \frac{1}{V_{diff}} = \frac{1}{(D_0 t)^{d/2}} \tag{4.203}$$

Все это чисто классическая картина. Рассмотрим теперь *квантовую* картину на языке фейнмановских траекторий частицы [20], распространяющейся из точки $A$ в точку $B$, как это показано на Рис. 4.21 (a). Каждую траекторию можно рассматривать как "трубку" с конечной толщиной порядка (соотношение неопределенностей!):

$$\lambda_F = \frac{\hbar}{mv_F} \tag{4.204}$$

При этом поперечное сечение "трубки" порядка $\lambda_F^{d-1}$. В классическом пределе $\hbar \to 0$ и $\lambda_F = 0$. При слабом беспорядке $\lambda_F/l = \frac{\hbar}{p_F l} \ll 1$, т.е. "трубки" достаточно тонкие. Пусть температура тоже достаточно мала, так что неупругие процессы, характеризуемые временем $\tau_\phi$, достаточно редки: $\tau_\phi \gg \tau$.

Вероятность перехода $A \to B$ по Фейнману есть:

$$W = \left| \sum_i A_i \right|^2 = \sum_i |A_i|^2 + \sum_{i \neq j} A_i A_j^* \tag{4.205}$$

где $A_i$ – амплитуда вероятности перехода $A \to B$ по $i$-й траектории. В больцмановской кинетичекой теории, естественно, пренебрегается интерференционным (квантовым!) вкладом в (4.205). В большинстве случаев это оправдано — пути (траектории) имеют разные длины и амплитуды $A_i$ имеют разные (случайные!) фазы. Однако есть одно исключение, а именно, случай когда $A$ и $B$ совпадают, т.е. пути с самопересечением, типа показанного на Рис. 4.21 (b)[32]. Такой замкнутый путь может проходиться в двух противоположных направлениях 1 и 2, но поскольку пути 1 и 2 совпадают, фазы амплитуд $A_1$ и $A_2$ когерентны и второе слагаемое в (4.205) дает конечный вклад! Соответствующая классическая вероятность перехода в случае $A_1 = A_2 = A$ есть $W_{cl} = 2|A|^2$ (первый член в (4.205)), но в квантовом случае возникает еще и ненулевой интерференционный вклад (второй член в (4.205)), так что:

$$W_{qm} = 2|A|^2 + A_1^* A_2 + A_1 A_2^* = 4|A|^2 \tag{4.206}$$

так что

$$W_{qm} = 2W_{cl} \tag{4.207}$$

Таким образом, вероятность *возврата* квантовой частицы в два раза больше, чем у классической — квантовая диффузия “медленнее” классической[33]. Это и приводит к *снижению* проводимости $\sigma$ – тенденции к локализации!.

Оценим теперь величину $\delta\sigma/\sigma_0$. Из наших рассуждений следует, что знак $\delta\sigma/\sigma_0$ отрицательный, а само изменение проводимости пропорционально вероятности возникновения (в ходе диффузии!) пути с самопересечением. Рассмотрим путь (“трубку” с сечением $\lambda_F^{d-1}$) в $d$ – мерном пространстве. За интервал времени $dt$ электрон проходит расстояние $dl = v_F dt$, соответствующий объемчик “трубки” есть $dV = v_F dt \lambda_F^{d-1}$. С другой стороны, максимально доступный объем для диффундирующей частицы есть, как мы видели, $V_{diff}$ (4.203). Тогда вероятность электрону оказаться в замкнутой трубке можно грубо оценить, как интеграл от отношения этих двух объемов:

$$W = \int_\tau^{\tau_{in}} \frac{dV}{V_{diff}} = v_F \lambda_F^{d-1} \int_\tau^{\tau_\phi} \frac{dt}{(D_0 t)^{d/2}} \tag{4.208}$$

Нижний предел интегрирования определяется здесь критерием применимости диффузионного приближения, а верхний – пределом применимости квантовой картины когерентного распространения частицы. Вспоминая, что $\sigma_0 \sim \frac{e^2}{\hbar^2} E\tau$, получаем простую оценку:

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma_0} \sim \frac{\hbar}{E\tau} \begin{cases} \left(\frac{\tau_\phi}{\tau}\right)^{1/2} & d=1 \\ \ln\left(\frac{\tau_\phi}{\tau}\right) & d=2 \\ \left(\frac{\tau_\phi}{\tau}\right)^{-1/2} & d=3 \end{cases} \tag{4.209}$$

Если $\frac{1}{\tau_\phi} \sim T^p$, то (4.209) дает:

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma_0} \sim \frac{\hbar}{E\tau} \begin{cases} T^{-p/2} & d=1 \\ p\ln\frac{T_0}{T} & d=2 \\ T^{p/2} & d=3 \end{cases} \tag{4.210}$$

Использованное выше условие $A_1 = A_2$ предполагает эквивалентность состояний электрона с импульсами $\mathbf{p}$ и $-\mathbf{p}$, т.е. наличие симметрии относительно обращения времени $t \to -t$. Это верно в отсутствие внешнего магнитного поля и магнитных примесей[34]. В присутствии поля $\mathbf{H}$ эти две амплитуды перехода приобретают фазы противоположного знака:

$$A_1 \to A_1 e^{i\varphi} \qquad A_2 \to A_2 e^{-i\varphi} \tag{4.211}$$

где

$$\varphi = \frac{e}{\hbar c} \oint dl\mathbf{A} = \frac{2\pi\phi}{hc/e} \tag{4.212}$$

[32] Речь, таким образом, идет о процессах рассеяния с возвратом (backscattering).

[33] Это есть следствие *волновой* природы частиц в квантовой механике. Все наши рассуждения справедливы также и для классических *волн*. Пример — усиление эха в лесу!

[34] Очень ясное обсуждение проблем, связанных с описанием инвариантности относительно обращения времени и ее отсутствия в системах, находящихся во внешнем магнитном поле или содержащих магнитные примеси, можно найти в Гл. VIII книги [21].

где $\phi = \mathbf{HS}$ – поток магнитного поля через сечение $\mathbf{S}$ замкнутого пути (траектории). Поскольку электрон совершает диффузионное движение, имеем $S \sim D_0 t$, так что $\phi \sim HD_0 t$. В результате, вместо (4.206), для вероятности возврата мы имеем:

$$W_H = 2|A|^2 \left\{1 + \cos\left(2\pi\frac{\phi}{\phi_0}\right)\right\} \tag{4.213}$$

где $\phi_0 = \frac{ch}{2e}$ – квант потока теории сверхпроводимости [11], соответствующий заряду $2e$! Удвоенный заряд возникает здесь потому, что у нас интерферируют вклады *двух* электронов с $\mathbf{p}$ и $-\mathbf{p}$ (аналогично тому, как в теории сверхпроводимости спариваются два электрона с противоположными импульсами). При $H = 0$ снова имеем $W_{H=0} = 4|A|^2$. Соответственно, при наличии внешнего магнитного поля возникает *отрицательное* магнитосопротивление, величина которого определяется разностью квантовых поправок:

$$\Delta\sigma(H) = \delta\sigma(H) - \delta\sigma(0) \sim W_H - W_{H=0} \sim$$
$$\sim v_F \lambda_F^{d-1} \int_\tau^{\tau_\phi} \frac{dt}{(D_0 t)^{d/2}} \left\{1 - \cos\left(2\pi\frac{\phi}{\phi_0}\right)\right\} > 0 \tag{4.214}$$

и связана с подавлением квантовых (локализационных) поправок внешним магнитным полем. Ясно, что $\Delta\sigma(H)$ является функцией $\frac{HD_o\tau_\phi}{\phi_0}$. "Критическое" поле, приводящее к практически полному подавлению локализационных поправок, определяется условием $\frac{H_c D_0 \tau_\phi}{\phi_0} \sim 1$, что для типичных $D_0$ и $\tau_\phi$ дает $H_c \sim 100 \div 500$гс. Эффект отрицательного магнитосопротивления в слабых полях в неупорядоченных металлах действительно наблюдается и дает метод изучения квантовых поправок к проводимости и характерных времен типа $\tau_\phi$ [18, 19][35].

### 4.6.2 Самосогласованная теория локализации.

Вернемся к общей дискуссии. Оказывается возможным предложить некоторую схему самосогласования, позволяющую рассмотреть и область достаточно сильного беспорядка. Для этого вернемся к выражению (4.186). Основная идея *самосогласованной теории локализации* (W.Götze, 1979, D.Vollhardt, P.Wölfle, 1980) состоит в замене классического коэффициента диффузии $D_0$ в *знаменателе* (4.186) на обобщенный коэффициент диффузии (4.175), который сам выражается через релаксационное ядро, определяемое (4.186). В результате получаем следующее *уравнение самосогласования* для определения ядра $M(0\omega)$[36]:

$$M(\omega) = 2i\gamma \left\{1 + \frac{1}{\pi\nu(E)} \sum_{|\mathbf{k}|<k_0} \frac{i}{\omega - \frac{2E}{dm}\frac{k^2}{M(\omega)}}\right\} \tag{4.215}$$

или эквивалентное (в силу (4.175)) уравнение для обобщенного коэффициента диффузии:

$$\frac{D_0}{D_E(\omega)} = 1 + \frac{1}{\pi\nu(E)} \sum_{|\mathbf{k}|<k_0} \frac{1}{-i\omega + D_E(\omega)k^2} \tag{4.216}$$

Выбор величины импульса обрезания $k_0$ будет обсуждаться ниже[37].

---

[35] Нужно четко отличать рассмотренный эффект от классического магнетосопротивления $\frac{\Delta\sigma(H)}{\sigma_0} \sim -(\omega_H\tau)^2$, где $\omega_H = \frac{eH}{mc}$. Величина классического магнетосопротивления, в соответствующих полях, на много порядков меньше (4.214) и имеет другой знак!

[36] Заметим, что при этом мы пренебрегаем возможной пространственной дисперсией: $M(\mathbf{q}\omega) \to M(0\omega)$, $D_E(\mathbf{q}\omega) \to D_E(0\omega)$.

[37] Разумеется, предложенная схема самосогласования вносит в теорию элемент "неконтролируемости", что характерно и для ряда других "самосогласованных" теорий. Вообще говоря, можно провести и более строгий вывод уравнений (4.215), (4.216) (D.Vollhardt, P.Wölfle, 1982), основанный на общем диаграммном анализе с отбрасыванием менее сингулярных (при $\omega \to 0$) вкладов, но мы не будем на этом останавливаться. Оправданием плодотворности такого подхода являются, в конечном счете, получаемые в его рамках физические результаты.

Прежде чем заниматься детальным анализом решений (4.215) и (4.216), посмотрим, что можно сказать “из общих соображений”. Для этого вернемся к выражению (4.173) для $\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega)$. Мы ожидаем, что $M(\omega)$ может оказаться сингулярным при $\omega \to 0$. В условиях существования предела:

$$R^2_{loc}(E) = -\frac{2E}{dm}\lim_{\omega\to 0}\frac{1}{\omega M(\omega)} \tag{4.217}$$

определяющего характерную длину $R_{loc}$, из (4.173) выделяется сингулярный вклад вида[38] (для простоты подразумевается также предел $q \to 0$):

$$\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega) = -\frac{N(E)}{\omega}\frac{1}{1+R^2_{loc}q^2} \tag{4.218}$$

В этих же условиях удобно ввести характерную частоту $\omega_0(E)$:

$$\omega_0^2(E) = -\lim_{\omega\to 0}\omega M(\omega) = \frac{2E}{dm}\frac{1}{R^2_{loc}(E)} > 0 \tag{4.219}$$

так что

$$R_{loc}(E) = \sqrt{\frac{2E}{dm}}\frac{1}{\omega_0(E)} \tag{4.220}$$

Длина $R_{loc}$ имеет смысл *радиуса локализации* электронных состояний в поле случайного потенциала примесей [16]. В условиях существования указанных пределов электронные состояния на уровне Ферми $E$ оказываются локализованными и система оказывается в состоянии *андерсоновского диэлектрика*. Переход Андерсона или явление локализации электронов в неупорядоченных системах относится к числу основных понятий современной теории неупорядоченных систем [22]. Ниже мы увидим, что рассматриваемая теория достаточно успешно описывает этот переход.

Наличие локализации (возникновение диэлектрика Андерсона) связывается в данном подходе с существованием предела (4.217), т.е. с конечностью характерной частоты $\omega_0(E)$, определяемой (4.219). Иными словами, это соответствует возникновению расходимости релаксационного ядра: $ReM(0\omega) = -\frac{\omega_0^2(E)}{\omega}$ при $\omega \to 0$. Это означает, что релаксационное ядро при $q \to 0$ и $\omega \to 0$ представляется в следующем виде:

$$M(0\omega) = \begin{cases} \frac{i}{\tau_E} & \text{(металл)} \\ \frac{i}{\tau_E} - \frac{\omega_0^2(E)}{\omega} & \text{(диэлектрик Андерсона)} \end{cases} \tag{4.221}$$

Вопрос только в том, можно – ли найти такие решения уравнения (4.215)?

При обсуждении выбора параметра обрезания в (4.215) и (4.216) заметим, что из выражения (4.163) и простейшей оценки (для случая слабого беспорядка!) $\Delta G_{\mathbf{p}} \sim ImG^R(E\mathbf{p}) \sim \delta\left(E - \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right)$ ясно, что суммарный импульс $\mathbf{k} = \mathbf{p} + \mathbf{p}'$ в $U_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ может меняться (по модулю) от 0 до $2p_F$. С другой стороны, само выражение для $U_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{q}\omega)$ (4.147) (“куперон”), используемое нами, справедливо лишь для $|\mathbf{p}+\mathbf{p}'| \le l^{-1}$ (критерий применимости диффузионного приближения). Отсюда ясно, что импульс обрезания в (4.215) и (4.216), по порядку величины, можно оценить как:

$$k_0 \sim Min\{p_F,\ l^{-1}\} \tag{4.222}$$

[38] Наличие такого вклада в $\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega)$ соответствует общему критерию локализации электронов в поле случайного потенциала примесей, т.е. переходу системы в диэлектрическое состояние [16].

Фактически, переход Андерсона происходит при $p_F l \sim 1$ (так называемый критерий Иоффе – Регеля) [22], так что для его исследования достаточно положить:

$$k_0 = x_0 p_F = x_0\sqrt{2mE} \tag{4.223}$$

где $x_0 = const \sim 1 \div 2$.

Перейдем теперь к решению уравнения самосогласования (4.215) (А.В.Мясников, М.В.Садовский, 1982). Введем безразмерную переменную интегрирования $y = \frac{k}{x_0\sqrt{2mE}}$ и перепишем (4.215) в виде:

$$M(\omega) = 2i\gamma + d\lambda x_0^{d-2} M(\omega)\int_0^1 dy d^{d-1}\frac{1}{y^2 - \frac{d\omega}{4x_0^2E^2}M(\omega)} \tag{4.224}$$

где $\lambda$ — параметр нашей теории возмущений (по беспорядку):

$$\lambda = \frac{1}{2\pi E\tau} = \frac{\gamma}{\pi E} = \left(\frac{m}{2\pi}\right)^{d/2}\frac{E^{\frac{d}{2}-2}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\rho v^2 \tag{4.225}$$

где учли, что $\gamma = \pi\rho v^2\nu(E)$ и вид плотности состояний свободных электронов в пространстве размерности $d$:

$$\nu(E) = \left(\frac{m}{2\pi}\right)^{d/2}\frac{E^{\frac{d}{2}-1}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \tag{4.226}$$

**Металлическая фаза.**

Полагая в (4.224) $\omega = 0$ и рассматривая металлический режим из (4.221), когда $ReM(\omega = 0) = 0$ и $ImM(\omega = 0) = 1/\tau_E$, сразу получаем из (4.224):

$$\tau_E = \frac{1}{2\gamma}\left\{1 - \frac{d}{d-2}\lambda x_0^{d-2}\right\} \tag{4.227}$$

Тогда из (4.176) немедленно получаем статическую проводимость системы в виде:

$$\sigma = \frac{ne^2}{m}\frac{1}{2\gamma}\left\{1 - \left(\frac{E_c}{E}\right)^{\frac{4-d}{2}}\right\}; \qquad 2 < d < 4 \tag{4.228}$$

где

$$E_c = \left\{\frac{d}{d-2}\frac{x_0^{d-2}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}(2\pi)^{-\frac{d}{2}}\right\}^{\frac{2}{4-d}} E_{sc} \tag{4.229}$$

где введена характерная энергия:

$$E_{sc} = m^{\frac{d}{4-d}}(\rho v^2)^{\frac{2}{4-d}} \tag{4.230}$$

уже встречавшаяся нам в (4.74) и определяющая область “сильной связи” (сильного рассеяния) на оси энергий для электрона в случайном поле примесей, и возникающая из простейшей оценки $\gamma \sim \rho v^2\nu(E) \sim E$ (с учетом (4.226)), соответствующей критерию Иоффе – Регеля (и пределу применимости используемой нами теории возмущений!)[39]. Легко видеть, что энергия $E_c \sim E_{sc}$ (4.229) играет роль ***порога подвижности*** [22]. Действительно, при $E > E_c$ из (4.228) получаем:

$$\sigma \approx \frac{ne^2}{m}\frac{1}{2\gamma(E_c)}\left(\frac{4-d}{2}\right)\left(\frac{E-E_c}{E_c}\right) \sim \frac{E-E_c}{E_c} \tag{4.231}$$

так что статическая проводимость системы при $T = 0$ обращается в нуль, когда энергия Ферми $E \to E_c$. Это и означает, что в системе происходит андерсоновский переход металл – диэлектрик (локализация Андерсона).

Приведем явные выражения для $d = 3$. Принимая, для определенности, $x_0 = 1$, имеем:

$$E_c = \frac{9}{2\pi^4}m^3(\rho v^2)^2 \tag{4.232}$$

Нетрудно видеть, что в терминах безразмерного параметра теории возмущений $\lambda$ из (4.225) это соответствует критическому значению $\lambda_c = \frac{d-2}{d}x_0^{2-d} = 1/3$ или

$$\left.\frac{E}{\gamma(E)}\right|_{E=E_c} = \frac{3}{\pi} \qquad \text{или} \qquad p_F l = \frac{3}{\pi} \tag{4.233}$$

где $l = \frac{v_F}{2\gamma}$ – “борновская” длина свободного пробега, которую можно рассматривать в качестве меры беспорядка в системе. Тогда (4.233) полностью соответствует обычной формулировке критерия Иоффе – Регеля: длина свободного пробега в металле не может быть меньше характерной величины порядка межатомного расстояния [22], с дальнейшим ростом беспорядка система переходит в состояние андерсоновского диэлектрика. “Критической” длине свободного пробега из (4.233) соответствовала – бы “друдевская” проводимость:

$$\sigma_c = \frac{ne^2}{m}\frac{1}{2\gamma(E_c)} = \frac{e^2 p_F}{3\pi^2\hbar^2}\left.\left(\frac{p_F l}{\hbar}\right)\right|_{E=E_c} = \frac{e^2 p_F}{\pi^3\hbar^2} \tag{4.234}$$

где учли, что $n = \frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3}$ и везде “восстановили” $\hbar$. Ввиду $p_F \sim \frac{\hbar}{a}$, где $a$ – межатомное расстояние, величина $\sigma_c$ (4.234) по порядку совпадает с моттовской оценкой “минимальной металлической проводимости”:

$$\sigma_{mm} \approx \frac{1}{\pi^3}\frac{e^2}{\hbar a} \tag{4.235}$$

что при $a \sim 3\mathring{A}$ дает $\sigma_{mm} \sim 2 \cdot 10^2 \text{ом}^{-1}\text{см}^{-1}$.

Записывая (4.227) как

$$\tau_E = \frac{1}{2\gamma}\left\{1 - \frac{3}{\pi E}\gamma\right\} = \frac{1}{2\gamma}\left\{1 - \frac{\gamma(E)}{\gamma(E_c)}\right\} \tag{4.236}$$

можно переписать (4.228) в виде:

$$\sigma = \sigma_0\left\{1 - \frac{\sigma_c}{\sigma_0}\right\} = \sigma_0 - \sigma_c \tag{4.237}$$

где “друдевская” проводимость $\sigma_0 = \frac{ne^2}{m}\frac{1}{2\gamma}$ выступает в качестве меры беспорядка. При слабом беспорядке (большой длине свободного пробега) $\sigma_0 \gg \sigma_c$ и из (4.237)

[39] Уже из этих простых формул видна выделенная роль размерностей пространства $d = 2$ и $d = 4$, играющих роль нижней и верхней критической размерности для перехода Андерсона.

следует обычный результат $\sigma \approx \sigma_0$. При росте беспорядка (уменьшении длины пробега) $\sigma \to 0$ при $\sigma_0 \to \sigma_c \approx \sigma_{mm}$. Отсюда видно, что $\sigma_{mm}$ определяет характерный масштаб проводимости, на котором происходит *непрерывный* (вопреки ранним идеям Мотта [22]) переход металл – диэлектрик, индуцированный беспорядком. Удивительно, что эти простые формулы подтверждаются *экспериментально* для многих реальных систем [16].

Из наших оценок видно, что для $d = 3$ порог подвижности $E_c$ попадает в область "сильной связи" $E_{sc} = m^3(\rho v^2)^2$ (М.В.Садовский, 1977), где безразмерный параметр теории возмущений $\lambda \sim 1$ и, строго говоря, нужен учет *всех* диаграмм теории возмущений. С другой стороны, при $d \to 2$ из (4.229) видно, что $E_c \to \infty$, в соответствии с картиной полной локализации при сколь – угодно слабом беспорядке для $d = 2$ (P.W.Anderson, E.Abrahams, D.C.Licciardello, D.J.Thouless, 1979).

То обстоятельство, что порог подвижности попадает в область "сильной связи" является одной из основных причин незавершенности теории локализации и требует развития новых, существенно непертурбативных, методов рассмотрения[40].

**Диэлектрик Андерсона.**

Перейдем к рассмотрению области локализованных состояний $E < E_c$ (диэлектрика Андерсона). Ищем решение (4.215) в виде второго выражения в (4.221). Выделяя действительную часть (4.215), при $\omega \to 0$, находим уравнение, определяющее $\omega_0^2(E)$:

$$1 = d\lambda x_0^{d-2} \int_0^1 dy y^{d-1} \frac{1}{y^2 + \frac{d\omega_0^2(E)}{4x_0^2 E^2}} \tag{4.238}$$

Аналогичным образом, из мнимой части (4.215), при $\omega \to 0$, находим уравнение для $\tau_E$ в области локализации:

$$1 - 2\gamma\tau_E = d\lambda x_0^{d-2} \int_0^1 dy y^{d+1} \frac{1}{\left[y^2 + \frac{d\omega_0^2(E)}{4x_0^2 E^2}\right]^2} \tag{4.239}$$

Используя (при $\omega_0^2 \to 0$) простейшую оценку интеграла[41] в (4.238), имеем:

$$1 \approx d\lambda x_0^{d-2} \int\limits_{\left(\frac{d\omega_0^2(E)}{4x_0^2E^2}\right)^{1/2}}^{1} dy y^{d-3} =$$

$$= \begin{cases} d\lambda x_0^{d-2} \frac{1}{d-2} \left\{1 - \left(\frac{d\omega_0^2(E)}{4x_0^2E^2}\right)^{\frac{d-2}{2}}\right\} & (2 < d < 4) \\ \lambda \ln \frac{2x_0^2E^2}{\omega_0^2(E)} & (d = 2) \end{cases} \tag{4.240}$$

откуда, используя определение (4.229), получаем:

$$\omega_0^2(E) = \begin{cases} \frac{4}{d} x_0^2 E^2 \left\{1 - \left(\frac{E}{E_c}\right)^{\frac{4-d}{2}}\right\}^{\frac{2}{d-2}} & (2 < d < 4) \\ 2x_0^2E^2 \exp\left(-\frac{1}{\lambda}\right) & (d = 2) \end{cases} \tag{4.241}$$

[40] Более подробно с этими вопросами можно познакомиться по обзорам: М.В.Садовский. УФН **133**, 223 (1981), И.М.Суслов. УФН **168**, 503 (1998).

[41] Интеграл здесь можно вычислить и точно, это приведет лишь к несущественному изменению некоторых констант в окончательных ответах.

Положение порога подвижности на оси энергий, естественно, определяется условием $\omega_0^2(E_c)=0$. Для $d=2$ величина $\omega_0^2(E)>0$ для любых $E$, что соответствует картине полной локализации в двумерных системах, даже при сколь угодно слабом беспорядке (P.W.Anderson, E.Abrahams, D.C.Licciardello, D.J.Thouless, 1979). Заметим, однако, что при слабом беспорядке ($\lambda \ll 1$) $\omega_0^2(E)$, в этом случае, экспоненциально мала, что действительно соответствует *слабой* локализации.

Используя "представление единицы" в виде (4.238) в (4.239), получаем связь $\tau_E$ с $\omega_0^2(E)$ в виде:

$$2\gamma\tau_E = d\lambda x_0^{d-2}\frac{d\omega_0^2(E)}{4x_0^2E^2}\int_0^1 dy\frac{y^{d-1}}{\left[y^2+\frac{d\omega_0^2(E)}{4x_0^2E^2}\right]^2}\approx$$

$$\approx d\lambda x_0^{d-2}\frac{1}{d-4}\left\{\frac{d\omega_0^2(E)}{4x_0^2E^2}-\left(\frac{d\omega_0^2(E)}{4x_0^2E^2}\right)^{\frac{d-2}{2}}\right\} \qquad (d<4) \tag{4.242}$$

так что при $\omega_0^2(E)\to 0$ (вблизи порога подвижности) имеем:

$$2\gamma\tau_E = \begin{cases} \frac{d}{4-d}\lambda x_0^{d-2}\left(\frac{d\omega_0^2(E)}{4x_0^2E^2}\right)^{\frac{d-2}{2}} & (2<d<4) \\ \lambda\left[1-\frac{\omega_0^2(E)}{2x_0^2E^2}\right] & (d=2) \end{cases} \tag{4.243}$$

Из (4.220) и (4.241) находим радиус локализации[42]:

$$R_{loc}(E)=\frac{1}{x_0\sqrt{2mE}}\left\{1-\left(\frac{E}{E_c}\right)^{\frac{4-d}{2}}\right\}^{-\frac{1}{d-2}} \sim \frac{1}{p_F}\left|\frac{E-E_c}{E_c}\right|^{-\nu}; \qquad E\le E_c \tag{4.245}$$

где ***критический индекс*** $\nu$:

$$\nu=\frac{1}{d-2} \tag{4.246}$$

Введем теперь характерную *локализационную корреляционную длину* (совпадающую с $R_{loc}$ при $E\le E_c$, т.е. в диэлектрической фазе) с помощью соотношения:

$$\xi_{loc}(E)=\frac{1}{x_0\sqrt{2mE}}=\begin{cases}\left[1-\left(\frac{E}{E_c}\right)^{\frac{4-d}{2}}\right]^{-\frac{1}{d-2}}; & E\le E_c\\ \left[1-\left(\frac{E_c}{E}\right)^{\frac{4-d}{2}}\right]^{-\frac{1}{d-2}}; & E>E_c\end{cases} \quad \text{так что} \tag{4.247}$$

$$\xi_{loc}(E)\sim\frac{1}{p_F}\left|\frac{E-E_c}{E_c}\right|^{-\nu}; \qquad E\sim E_c \tag{4.248}$$

Эта величина определена также и при $E>E_c$, т.е. и в металлической фазе. Тогда можно переписать выражение (4.228) для проводимости в металлической фазе в виде:

$$\sigma=\frac{ne^2}{m}\frac{1}{2\gamma}(x_0p_F\xi_{loc})^{2-d}=\frac{\sigma_0}{(x_0p_F\xi_{loc})^{d-2}}\sim(E-E_c)^{(d-2)\nu} \tag{4.249}$$

[42] Для $d=2$ аналогично получаем

$$R_{loc}(E)=\frac{1}{x_0\sqrt{2mE}}\exp\left\{\frac{\pi E}{m\rho v^2}\right\} \tag{4.244}$$

так что в этом случае радиус локализации экспоненциально велик в случае слабого рассеяния.

– так называемый закон Вегнера (F.Wegner, 1976) с критическим индексом проводимости:

$$s = (d-2)\nu \tag{4.250}$$

В частности, для $d = 3$ (полагая $x_0 = 1$) имеем:

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{p_F \xi_{loc}(E)} \sim (E - E_c); \qquad E > E_c \tag{4.251}$$

и критический индекс проводимости $s = 1$. Именно такое поведение проводимости экспериментально наблюдается в окрестности перехода металл – диэлектрик, вызванного разупорядочением, для целого ряда систем [16]. Однако, в целом ряде случаев наблюдается поведение проводимости, соответствующее критическому индексу $s \approx 1/2$. Обычно это несоответствие приписывается роли межэлектронного взаимодействия, которое не учитывалось в проведенном выше анализе. Однако полная ясность в этом вопросе в настоящее время отсутствует[43].

Отметим, что все эти соотношения записаны исходя из аналогий со скэйлинговым описанием критических явлений при фазовых переходах II рода [11] и соответствуют картине *скэйлинга на пороге подвижности* (P.W.Anderson, E.Abrahams, D.C.Licciardello, D.J.Thouless, 1979). В тоже время заметим, во избежание недоразумений, что переход Андерсона не является фазовым переходом II рода в обычном термодинамическом смысле, его описание заведомо является более сложным. В частности, для него до сих пор отсутствует общепринятое определение параметра порядка. Трудности в построении последовательной теории перехода Андерсона (даже в одночастичном приближении), в значительной мере, связаны с тем, что порог подвижности попадает в не раз уже упоминавшуюся область "сильной связи" на оси энергий (являющуюся прямым аналогом гинзбурговской критической области теории критических явлений (М.В.Садовский, 1977)), где необходимо учитывать *все* диаграммы фейнмановского ряда теории возмущений или использовать существенно непертурбативные методы[44]. Отличие от обычной теории критических явлений здесь в том, что в ней взаимодействие флуктуаций в критической области становится как раз слабым, по крайней мере в пространстве с $d = 4 - \varepsilon$.

В качестве еще одного примера поведения физических величин при переходе Андерсона рассмотрим диэлектрическую проницаемость (в фазе андерсоновского диэлектрика). Из общего определения (2.109) имеем:

$$\epsilon(\mathbf{q}\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2}\chi(\mathbf{q}\omega) \tag{4.252}$$

где $\chi(\mathbf{q}\omega)$ – запаздывающая функция отклика плотность – плотность. Тогда используя (4.173), (4.174) и (4.221), (4.245), немедленно получаем:

$$\epsilon(0\omega \to 0) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2(E)} = 1 + \kappa_D^2 R_{loc}^2(E) \sim \left|\frac{E - E_c}{E_c}\right|^{-2\nu} \tag{4.253}$$

где $\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$ – квадрат плазменной частоты, $\kappa_D^2 = 4\pi e^2 N(E)$ – обратный квадрат радиуса дебаевского экранирования в металле. Из выражения (4.253) видно, что статическая диэлектрическая проницаемость расходится на пороге подвижности, когда система приближается к переходу в металлическое состояние (из диэлектрика Андерсона). В принципе, это тоже наблюдаемый эффект, позволяющий найти критический индекс $\nu$ радиуса локализации.

[43] Проблема усугубляется тем обстоятельством, что довольно многочисленные работы по численному моделированию перехода Андерсона в системе невзаимодействующих электронов, проведенные в последние годы, дают величину индекса проводимости $s \sim 1.5$.

[44] В связи с этим, вряд-ли имеет смысл серьезно относиться к полученным здесь теоретическим выражениям для критических индексов перехода Андерсона. В тоже время, непрерывный характер этого перехода для $d = 3$ можно считать твердо установленным (вопреки изначальной точке зрения Мотта [22]).

### Частотная дисперсия обобщенного коэффициента диффузии.

Полученные выше результаты справедливы в пределе $\omega \to 0$. Можно провести и полное исследование частотной зависимости обобщенного коэффициента диффузии (D.Vollhardt, P.Wölfle, 1982). Мы приведем только сводку соответствующих результатов. Уравнение (4.216) для обобщенного коэффициента диффузии может быть переписано в виде, аналогичном (4.224):

$$\frac{D_E(\omega)}{D_0} = 1 - \frac{d\lambda}{d-2}x_0^{d-2} + d\lambda x_0^{d-2}\left[-\frac{i\omega D_0}{2\gamma D_E(\omega)}\right]\int_0^1 dy \frac{y^{d-3}}{y^3 - \frac{i\omega D_0}{2\gamma D_E(\omega)}} \tag{4.254}$$

При выполнении условия $\left|\frac{\omega}{2\gamma}\frac{D_0}{D_E(\omega)}\right| \ll 1$, верхний предел интегрирования в (4.254) можно устремить к бесконечности и получить алгебраическое уравнение для $D_E(\omega)$:

$$\frac{D_E(\omega)}{D_0} = 1 - \frac{\lambda}{\lambda_c} + p_d\frac{\lambda}{\lambda_c}\left\{-\frac{i\omega}{2\gamma}\frac{D_0}{D_E(\omega)}\right\}^{\frac{d-2}{2}} \tag{4.255}$$

где $\lambda_c = \frac{d-2}{d}x_0^{2-d}$ – "критическое" значение безразмерного параметра $\lambda$ в точке перехода, $p_d = \Gamma\left(\frac{d}{2}\right)\Gamma\left(2-\frac{d}{2}\right)$. Из (4.255) следует, что $D_E(\omega)$ (и проводимость $\sigma(\omega)$) удовлетворяют скэйлинговому соотношению вида:

$$\frac{D_E(\omega)}{D_0} = \frac{\sigma(\omega)}{\sigma_0} = \left(-\frac{i\omega}{2\gamma}\right)^{\frac{d-2}{d}} F_d\left(\frac{\omega}{\omega_c}\right) \tag{4.256}$$

где при $\omega \ll \omega_c$ имеем:

$$F_d\left(\frac{\omega}{\omega_c}\right) \sim \left(-\frac{i\omega}{\omega_c}\right)^{\frac{2}{d}}; \qquad \lambda > \lambda_c \qquad \text{(диэлектрик)} \tag{4.257}$$

$$F_d\left(\frac{\omega}{\omega_c}\right) \sim \left(-\frac{i\omega}{\omega_c}\right)^{\frac{2-d}{d}}; \qquad \lambda < \lambda_c \qquad \text{(металл)} \tag{4.258}$$

а при $\omega \gg \omega_c$:

$$F_d\left(\frac{\omega}{\omega_c}\right) \sim const \tag{4.259}$$

При этом характерная частота $\omega_c$ определяется как:

$$\omega_c \approx 2\gamma\left|1 - \frac{\lambda}{\lambda_c}\right|^{\frac{d}{d-2}} \sim 2\gamma[p_F\xi_{loc}(E)]^{-d} \tag{4.260}$$

Неравенство, использованное при сведении (4.254) к виду (4.255) выполнено при $\omega_c \ll 2\gamma$, что заведомо верно вблизи порога подвижности.

Для $d = 3$ уравнение (4.255) принимает вид:

$$\frac{D_E(\omega)}{D_0} = 1 - \frac{\lambda}{\lambda_c} + \frac{\pi}{2}\frac{\lambda}{\lambda_c}\left\{-\frac{i\omega}{2\gamma}\frac{D_0}{D_E(\omega)}\right\}^{1/2}; \qquad \lambda_c = \frac{1}{3x_0} \tag{4.261}$$

и может быть решено в явном виде. С достаточной для многих применений точностью, обобщенный коэффициент диффузии записывается в виде [16][45]:

$$D_E(\omega) = \begin{cases} D_E; \quad (\omega \ll \omega_c,\ E \geq E_c) \quad \text{(металл)} \\ D_0\left(-\frac{i\omega}{2\gamma}\right)^{1/3}; \quad (\omega \gg \omega_c) \quad \text{(металл и диэлектрик)} \\ D_E\frac{-i\omega}{-i\omega + \frac{3D_E}{v_F^2}\omega_0^2(E)}; \quad (\omega \ll \omega_c,\ E < E_c) \quad \text{(диэлектрик)} \end{cases} \tag{4.262}$$

где $D_E = \frac{D_0}{p_F\xi_{loc}(E)}$. На самом пороге подвижности имеем $\xi_{loc}(E = E_c) = \infty$, так что $\omega_c = 0$, и мы получаем так называемый закон $\omega^{1/3}$ (W.Götze, 1981):

$$D_E(\omega) = D_0\left(-\frac{i\omega}{2\gamma}\right)^{1/3} \tag{4.263}$$

Частота $\omega_c$, фактически, определяется условием $D_E(\omega_c) \sim D_E \sim D_0\left(\frac{\omega_c}{2\gamma}\right)^{1/3}$. Неоднократно использовавшееся выше условие $\omega \to 0$ нужно понимать в смысле $\omega \ll \omega_c$. Отметим, наконец, что при $\omega \gg 2\gamma$ из уравнений самосогласованной теории локализации нетрудно получить переход к обычному "друдевскому" поведению: $D_E(\omega) \approx D_0\left[1 - \frac{i\omega}{2\gamma}\right]^{-1}$.

---

[45]Для $d = 2$ и предельно малых частот $\omega \ll \lambda^{-1}e^{-\frac{1}{\lambda}}\gamma$ $(\lambda \ll 1)$, самосогласованная теория локализации дает $\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{\gamma}{\lambda}e^{\frac{2}{\lambda}}\frac{\omega^2}{2(x_0E)^4} \to 0$, при $\omega \to 0$. При $\lambda^{-2}e^{-\frac{1}{\lambda}}\gamma \ll \omega \ll \lambda^2\gamma$ для $D(\omega)$ воспроизводится зависимость типа (4.197).

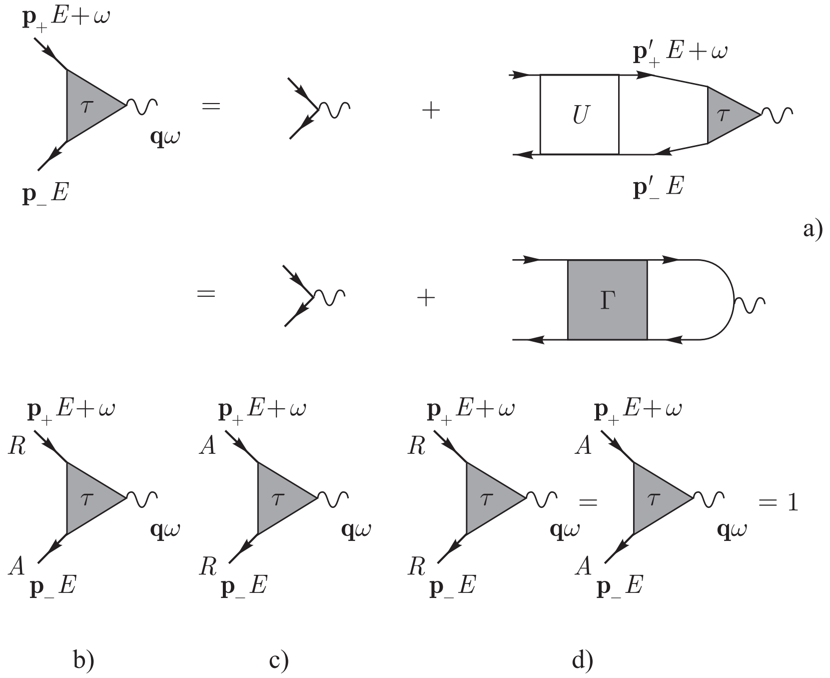



Рис. 4.22: Интегральное уравнение для “треугольной” вершины (a) и различные варианты расстановки типов (R или A) электронных линий (b), (c), (d).

## 4.7 “Треугольная” вершина.

Существование диффузионного полюса (4.140) в “четыреххвостке” $\Gamma_{\mathbf{pp'}}(\mathbf{q}\omega)$ и вообще в двухчастичных функциях Грина (например типа (4.173)) приводит к появлению аналогичных вкладов в других “блоках”нашей теории возмущений[46]. В частности, полезно рассмотреть уже встречавшуюся нам “треугольную” вершину, определяемую графиками, показанными на Рис. 4.12 (c). В общем случае, она определяется интегральным уравнением, показанным графически на Рис. 4.22 (a). Хотя в дальнейшем мы будем рассматривать только случай слабого беспорядка, когда достаточно ограничиться $U_0(\mathbf{p}-\mathbf{p'}) = \rho v^2$ (“лестница”), для начала проведем достаточно общее рассмотрение, допускающее подход в духе самосогласованной теории локализации. Вспоминая общее определение двухчастичной функции Грина, приведенное в графическом виде на Рис. 4.14 (a), или аналитически в (4.125), сразу же пишем для “треугольной” вершины $\mathcal{T}^{RA}_{\mathbf{p}_+\mathbf{p}_-}(\mathbf{q}\omega)$ следующее выражение через $\Phi^{RA}_{\mathbf{pp'}}(\mathbf{q}\omega)$[47]:

$$\mathcal{T}^{RA}_{\mathbf{p}_+\mathbf{p}_-}(\mathbf{q}\omega)G^R(E+\omega\mathbf{p}_+)G^A(E\mathbf{p}_-) = -2\pi i\int\frac{d^dp'}{(2\pi)^d}\Phi^{RA}_{\mathbf{pp'}}(\mathbf{q}\omega) \tag{4.264}$$

или же

$$\mathcal{T}^{RA}_{\mathbf{p}_+\mathbf{p}_-}(\mathbf{q}\omega) = -\frac{2\pi i}{G^R(E+\omega\mathbf{p}_+)G^A(E\mathbf{p}_-)}\int\frac{d^dp'}{(2\pi)^d}\Phi^{RA}_{\mathbf{pp'}}(\mathbf{q}\omega) \tag{4.265}$$

[46]Это же утверждение справедливо и для возникновения вкладов “куперонного” типа от (4.147).
[47]Для определенности считаем верхнюю электронную линию на Рис. 4.22 (a) запаздывающей.

Воспользуемся теперь представлением (4.161), тогда (4.265) перепишется в виде:

$$\mathcal{T}^{RA}_{\mathbf{p}_+\mathbf{p}_-}(\mathbf{q}\omega) =$$
$$= \frac{1}{\nu(E)}\frac{\Delta G_{\mathbf{p}}}{G^R(E+\omega\mathbf{p}_+)G^A(E\mathbf{p}_-)}\int\frac{d^dp'}{(2\pi)^d}\int\frac{d^dp''}{(2\pi)^d}\left\{1+\frac{d}{p_F^2}(\mathbf{p}\hat{\mathbf{q}})(\mathbf{p}''\hat{\mathbf{q}})\right\}\Phi^{RA}_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}(\mathbf{q}\omega) =$$
$$= \frac{1}{\nu(E)}\frac{\Delta G_{\mathbf{p}}}{G^R(E+\omega\mathbf{p}_+)G^A(E\mathbf{p}_-)}\left\{\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega)+d(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{q}})\Phi^{RA}_1(\mathbf{q}\omega)\right\} \tag{4.266}$$

где использовали также определения (4.88) и (4.154). Пользуясь системой уравнений (4.153) и (4.162) для $\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega)$ и $\Phi^{RA}_1(\mathbf{q}\omega)$ мы получили (4.171) и (4.172), откуда, в частности, видно что:

$$\Phi^{RA}_1(\mathbf{q}\omega) = \frac{1}{v_Fq}\chi(\mathbf{q}\omega) \tag{4.267}$$

Тогда:

$$d(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{q}})\Phi^{RA}_1(\mathbf{q}\omega) = (\mathbf{p}\mathbf{q})\frac{d}{p_Fv_Fq^2}\chi(\mathbf{q}\omega) \tag{4.268}$$

а с использованием (4.149):

$$\frac{\Delta G_{\mathbf{p}}}{G^R(E+\omega\mathbf{p}_+)G^A(E\mathbf{p}_-)} = -\left\{\omega-\frac{1}{m}(\mathbf{p}\mathbf{q})-\Sigma^R(\mathbf{p}_+E+\omega)+\Sigma^A(\mathbf{p}_-E)\right\} \tag{4.269}$$

и (4.266) переписывается как:

$$\mathcal{T}^{RA}_{\mathbf{p}_+\mathbf{p}_-}(\mathbf{q}\omega) = \frac{1}{\nu(E)}\left\{-\omega+\frac{1}{m}(\mathbf{p}\mathbf{q})+\Sigma^R(\mathbf{p}_+E+\omega)-\Sigma^A(\mathbf{p}_-E)\right\}\times$$
$$\times\left\{\Phi^{RA}(\mathbf{q}\omega)+\frac{1}{m}(\mathbf{p}\mathbf{q})\frac{d}{v_F^2q^2}\chi(\mathbf{q}\omega)\right\} =$$
$$= -\left\{-\omega+\frac{1}{m}(\mathbf{p}\mathbf{q})+\Sigma^R(\mathbf{p}_+E+\omega)-\Sigma^A(\mathbf{p}_-E)\right\}\frac{\omega+M(\mathbf{q}\omega)+\frac{1}{m}(\mathbf{p}\mathbf{q})}{\omega^2+\omega M(\mathbf{q}\omega)-\frac{1}{d}v_F^2q^2} =$$
$$= \left\{\omega-\frac{1}{m}(\mathbf{p}\mathbf{q})+2i\gamma\right\}\frac{\omega+M(\mathbf{q}\omega)+\frac{1}{m}(\mathbf{p}\mathbf{q})}{\omega^2+\omega M(\mathbf{q}\omega)-\frac{1}{d}v_F^2q^2} \tag{4.270}$$

где мы еще использовали (4.171) и (4.172), а также, в самом конце, и простейшее приближение для собственно – энергетических частей. В результате, в пределе $\omega\to 0$ и $q\to 0$, вводя опять обобщенный коэффициент диффузии (4.175), получаем следующий простой вид "треугольной" вершины в $RA$ – канале, показанной на Рис. 4.22 (b):

$$\mathcal{T}^{RA}(\mathbf{q}\omega) \approx \frac{2\gamma}{-i\omega+D_E(\mathbf{q}\omega)q^2} \tag{4.271}$$

Разумеется, в "лестничном" приближении (слабый беспорядок!), когда используется (4.127), выражение типа (4.271) с заменой $D_E(\mathbf{q}\omega)\to D_0$ получается сразу же из уравнения Рис. 4.22 (a) путем элементарных вычислений. Проделанный нами более громоздкий вывод допускает, однако, обобщение на случай сильного беспорядка $p_Fl\sim 1$, когда для $D_E(\mathbf{q}\omega)$ используются выражения, полученные выше в рамках самосогласованной теории локализации.

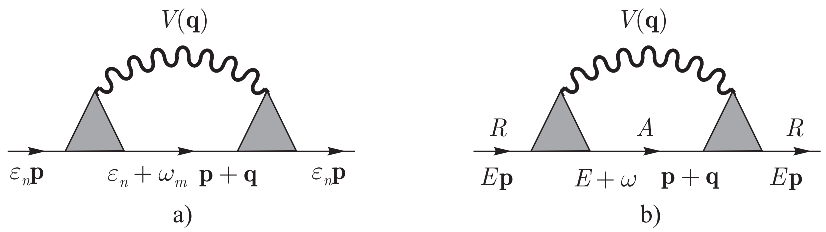



Рис. 4.23: Простейшая поправка к одноэлектронной функции Грина от взаимодействия в неупорядоченном металле.

Аналогичным образом, можно показать, что для "треугольной" вершины в $AR$ – канале, показанной на Рис. 4.22 (c):

$$\mathcal{T}^{AR}(\mathbf{q}\omega) \approx \frac{2\gamma}{i\omega + D_E(\mathbf{q}\omega)q^2} \tag{4.272}$$

а для вершин в $RR$ и $AA$ каналах, показанных на Рис. 4.22 (d):

$$\mathcal{T}^{RR}(\mathbf{q}\omega) = \mathcal{T}^{AA}(\mathbf{q}\omega) = 1 \tag{4.273}$$

и в них диффузионный полюс не возникает.

В мацубаровской технике общий вид "треугольной" теперь также вполне очевиден[48]:

$$\mathcal{T}(\mathbf{q}\omega_m\varepsilon_n) = \theta(\varepsilon_n)\theta(\varepsilon_n+\omega_m) + \theta(-\varepsilon_n)\theta(-\varepsilon_n-\omega_m) + \\ +2\gamma\left\{\frac{\theta(\varepsilon_n)\theta(-\varepsilon_n-\omega_m)}{-\omega_m+D_0q^2} + \frac{\theta(-\varepsilon_n)\theta(\varepsilon_n+\omega_m)}{\omega_m+D_0q^2}\right\} \tag{4.274}$$

где мы сразу написали выражения с $D_0 = \frac{1}{d}v_F\tau = \frac{v_F^2}{2d\gamma}$, поскольку в оставшейся части этой главы мы будем интересоваться только пределом слабого беспорядка $p_F l \gg 1$.

## 4.8 Роль электрон – электронного взаимодействия.

В реальном неупорядоченном металла электроны, конечно же, взаимодействуют между собой за счет кулоновского взаимодействия. Совместный учет эффектов взаимодействия и примесного рассеяния представляет собой весьма сложную задачу [17, 19]. Ниже мы ограничимся лишь рассмотрением простейшего примера влияния этих эффектов на плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми.

Рассмотрим простейшую поправку к одноэлектронной функции Грина по взаимодействию, изображаемую (в мацубаровской технике) диаграммой Рис. 4.23 (a). Здесь волнистая линия соответствует межэлектронному взаимодействию, а "треугольные" вершины описывают перенормировку этого взаимодействия за счет многократного рассеяния электронов примесями.

[48]Мы учли, $G(\varepsilon_n > 0\mathbf{p})$ продолжается на $G^R(E\mathbf{p})$, а $G(\varepsilon_n < 0\mathbf{p})$ на $G^A(E\mathbf{p})$, $i\omega_m \to \omega \pm i\delta$ для $m > 0$ и $m < 0$ и т. д.

Сначала, однако, мы проведем расчет в технике $T = 0$. Соответствующее аналитическое выражение для поправки к функции Грина имеет вид[49]:

$$\delta G(E\mathbf{p}) = iG^2(E\mathbf{p}) \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} V(\mathbf{q}) \mathcal{T}^2(\mathbf{q}\omega) G(E+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q}) \tag{4.275}$$

где $V(\mathbf{q})$ – фурье - образ потенциала взаимодействия. Соответствующая поправка к плотности состояний определяется тогда как:

$$\delta N(E) = -\frac{N(E_F)}{\pi} Im \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} \int \frac{d\omega}{2\pi} V(\mathbf{q}) \mathcal{T}^2(\mathbf{q}\omega) \times$$
$$\times \frac{i}{E-\omega-\xi(\mathbf{p}+\mathbf{q})+i\gamma sign(E-\omega)} \left( \frac{1}{E-\xi+i\gamma signE} \right)^2 \tag{4.276}$$

При $E > 0$ интеграл по $\xi$ отличен от нуля, если $sign(E-\omega) < 0$, т.е. при $\omega > E$. Соответственно имеем:

$$\frac{\delta N(E)}{N(E_F)} \approx -\frac{1}{\pi} Im\, i \int_{-\infty}^{\infty} d\xi(p) \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} \int_E^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} V(\mathbf{q}) [\mathcal{T}^{RA}(\mathbf{q}\omega)]^2 G^A(E-\omega\mathbf{p}+\mathbf{q}) [G^R(E\mathbf{p})]^2 \tag{4.277}$$

что соответствует графику Рис. 4.23 (b). Фактически здесь уже можно прямо воспользоваться выражением для вершины из (4.271). Подставляя в (4.277) явные выражения для $G^A(E\mathbf{p})$ и $G^R(E\mathbf{p})$ (несущественной зависимостью $G^A$ от $\omega$ и $q$ в пределе $\omega \ll \gamma$ и $v_Fq \ll \gamma$ можно просто пренебречь), получаем:

$$\frac{\delta N(E)}{N(E_F)} = -\frac{1}{\pi} Im\, i \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} \int_E^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} V(\mathbf{q}) [\mathcal{T}^{RA}(\mathbf{q}\omega)]^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{E-\xi-i\gamma} \frac{1}{(E-\xi+i\gamma)^2} =$$
$$= -\frac{1}{2\gamma^2} Im \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} \int_E^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} [\mathcal{T}^{RA}(\mathbf{q}\omega)]^2 V(\mathbf{q}) \tag{4.278}$$

что после подстановки (4.271) дает окончательно для $T = 0$:

$$\frac{\delta N(E)}{N(E_F)} = -\frac{1}{\pi} Im \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} \int_E^{\infty} d\omega \frac{1}{(-i\omega+D_0q^2)^2} V(\mathbf{q}) \tag{4.279}$$

Строго говоря тут надо было - бы еще ввести обрезание интеграла по $\omega$ на $\omega \sim 1/\tau$, чтобы удовлетворить критерий применимости диффузионного приближения, но это не обязательно, можно оставить и бесконечный предел, интеграл все равно сходится.

Разумеется, точно такой же результат можно получить и из мацубаровской техники в пределе $T \to 0$. Посмотрим, как это делается. Имея в виду, что нам, в конце концов, нужна поправка к плотности состояний, определим:

$$\delta N(\varepsilon_n) = -\frac{2}{\pi} \int \frac{d^dp}{(2\pi)^d} \delta G(\varepsilon_n\mathbf{p}) \tag{4.280}$$

что, в соответствии с Рис. 4.23 (a), сводится к:

$$\delta N(\varepsilon_n) = \frac{2}{\pi} \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} T \sum_n V(\mathbf{q}) \mathcal{T}^2(\mathbf{q}\omega_m) \int \frac{d^dp}{(2\pi)^d} G^2(\varepsilon_n\mathbf{p}) G(\varepsilon_n+\omega_m\mathbf{p}+\mathbf{q}) \tag{4.281}$$

[49]Заметим, что здесь и далее в этой главе аргумент $E$ обозначает уже не энергию Ферми, а энергию *отсчитанную* от энергии Ферми. Энергия Ферми обозначается далее как $E_F$.

Вычислим сначала интеграл по $\mathbf{p}$, в котором при $v_F q \ll \gamma$ можно вообще пренебречь зависимостью от $q$:

$$\int \frac{d^dp}{(2\pi)^d} G^2(\varepsilon_n \mathbf{p}) G(\varepsilon_n + \omega_m \mathbf{p} + \mathbf{q}) \approx \int \frac{d^dp}{(2\pi)^d} G^2(\varepsilon_n p) G(\varepsilon_n + \omega_m p) \approx$$
$$\approx \nu(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{(i\varepsilon_n - \xi + i\gamma sign \varepsilon_n)^2} \frac{1}{i\varepsilon_n + i\omega_m - \xi + i\gamma sign(\varepsilon_n + \omega_m)} =$$
$$= 2\pi i \nu(E_F) \left\{ \frac{\theta(\varepsilon_n)\theta(-\varepsilon_n - \omega_m)}{(2i\gamma - i\omega_m)^2} - \frac{\theta(\varepsilon_n + \omega_m)\theta(-\varepsilon_n)}{(2i\gamma + i\omega_m)^2} \right\} \approx$$
$$\approx -i\nu(E_F) 2\pi\tau^2 \{\theta(\varepsilon_n)\theta(-\varepsilon_n - \omega_m) - \theta(\varepsilon_n + \omega_m)\theta(-\varepsilon_n)\} \quad (4.282)$$

где интеграл по $\xi$ вычисляется обычным контурным интегрированием (он отличен от нуля только при противоположных знаках $\varepsilon_n$ и $\varepsilon_n+\omega_m$), а при переходе к последнему равенству использовали $|\omega_m\tau| \ll 1$.

Пусть теперь, для определенности, $\varepsilon_n > 0$. Тогда "работает" первая пара $\theta$ – функций в (4.282): $\varepsilon_n > 0$, $\varepsilon_n + \omega_m < 0$, что дает $\omega_m < -\varepsilon_n$. В результате (4.281) сводится к:

$$\delta N(\varepsilon_n) = -2iTN(E_F)\tau^2 \sum_{\omega_m=-\infty}^{-\varepsilon_n} \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} V(q) \mathcal{T}^2(q\omega_m) =$$
$$= -2iTN(E_F) \sum_{\omega_m=-\infty}^{-\varepsilon_n} \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} \frac{V(q)}{(-\omega_m + D_0q^2)^2} \quad (4.283)$$

При $T \to 0$ здесь $i\omega_m \to \omega + i\delta$, т.е. $\omega_m \to -i(\omega + i\delta)$, $i\varepsilon_n \to E + i\delta$ и, соответственно, $iT\sum_m \cdots \to \int \frac{d\omega}{2\pi} \cdots$, так что в этом пределе получаем:

$$\frac{\delta N(E)}{N(E_F)} = -2Im \int_{-\infty}^{-E} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} V(q) \frac{1}{(i\omega + D_0q^2)^2} =$$
$$= -2Im \int_E^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} V(q) \frac{1}{(-i\omega + D_0q^2)^2} \quad (4.284)$$

что, естественно, совпадает с (4.279), полученным в технике $T = 0$.

Дальнейшие расчеты вполне элементарны. Имеем:

$$\frac{\delta N(E)}{N(E_F)} = -2Im \int_E^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} V(q) \frac{(i\omega + D_0q^2)^2}{[\omega^2 + (D_0q^2)^2]^2} =$$
$$= -2 \int_E^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} V(q) \frac{2D_0q^2\omega}{[\omega^2 + (D_0q^2)^2]^2} =$$
$$= 2 \int_E^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} V(q) \frac{d}{d\omega} \frac{D_oq^2}{\omega^2 + (D_0q^2)^2} \quad (4.285)$$

так что окончательно получаем:

$$\frac{\delta N(E)}{N(E_F)} = -\frac{1}{\pi} \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d} V(q) \frac{D_0q^2}{E^2 + (D_0q^2)^2} \quad (4.286)$$

Оценим эту поправку к плотности состояний для случая точечного межэлектронного взаимодействия $V(q) = V_0$. Тогда имеем:

$$\frac{\delta N(E)}{N(E_F)} = -\frac{V_0}{\pi} S_d \int_0^{p_0} dq q^{d-1} \frac{D_0q^2}{E^2 + (D_0q^2)^2} =$$

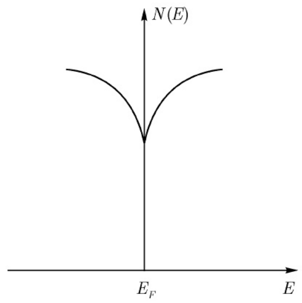



Рис. 4.24: Характерный вид поправки от взаимодействия к плотности состояний вблизи уровня Ферми в неупорядоченном металле.

$$= -\frac{V_0}{\pi}S_d\frac{1}{D_0^{d/2}}\int_0^{\tilde{E}^{1/2}}dx\frac{x^{d+1}}{E^2+x^4} \approx -\frac{V_0}{\pi}S_d\frac{1}{D_0^{d/2}}\int_{E^{1/2}}^{\tilde{E}^{1/2}}dxx^{d-3} \tag{4.287}$$

где ввели обрезание на верхнем пределе $p_0 \sim l^{-1}$, что соответствует $\tilde{E} = D_0 p_0^2$, и $S_d = \Omega_d/(2\pi)^d = 2^{-(d-1)}\pi^{-\frac{d}{2}}/\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)$. Последнее равенство дает простейшую оценку стоящего здесь интеграла. Разумеется его можно посчитать и точно, но эта оценка дает правильный ответ, с точностью до несущественных констант порядка единицы. В результате мы получаем следующую поправку к плотности состояний вблизи уровня Ферми (А.Г.Аронов, Б.Л.Альтшулер, 1979):

$$\frac{\delta N(E)}{N(E_F)} = \frac{V_0}{\pi}\begin{cases} \frac{1}{D_0^{d/2}}S_d\frac{1}{d-2}\left\{|E|^{\frac{d-2}{2}} - \tilde{E}^{\frac{d-2}{2}}\right\} & (d>2) \\ \frac{1}{D_0}S_2\ln\frac{|E|}{\tilde{E}} & (d=2) \\ \frac{1}{D_0^{1/2}}\left\{\frac{1}{\tilde{E}^{1/2}} - \frac{1}{|E|^{1/2}}\right\} & (d=1) \end{cases} \tag{4.288}$$

В частности, для $d = 3$ отсюда возникает знаменитая “птичка” Аронова – Альтшулера в энергетической зависимости плотности состояний вблизи уровня Ферми:

$$\frac{\delta N(E)}{N(E_F)} \sim \frac{\sqrt{|E|}}{D_0^{3/2}} \tag{4.289}$$

показанная на Рис. 4.24. Замечательно, что именно такая особенность наблюдается в туннельных экспериментах во многих неупорядоченных металлах [17]. С ростом беспорядка происходит уменьшение коэффициента диффузии $D_0$, так что аномалия в плотности состояний увеличивается. Что происходит вблизи перехода металл – диэлектрик (при $p_F l \sim 1$), в настоящее время, не вполне ясно, последовательная теория этого перехода с учетом межэлектронного взаимодействия не завершена [17, 19]. По мнению большинства исследователей особенность Аронова – Альтшулера плавно переходит в этой области в так называемую “кулоновскую” щель Эфроса – Шкловского в плотности состояний, которая возникает в области локализованных состояний [23]. В принципе, поведение такого типа получается при простых обобщениях рассматриваемой теории в духе самосогласованной теории локализации [16], но мы не будем останавливаться на обсуждении этих сложных (нерешенных) проблем.

Вместо этого, посмотрим как можно провести наше рассмотрение для более реалистического случая кулоновского (дальнодействующего) взаимодействия между электронами, когда нужно учитывать эффекты динамического экранирования. Заодно учтем и эффекты конечной температуры, проведя расчеты в мацубаровской технике. Теперь волнистая линия на графике Рис. 4.23 (а) обозначает именно это взаимодействие. Возвращаясь к (4.281), перепишем это выражение применительно к рассматриваемой задаче аналогично (4.283):

$$\delta N(\varepsilon_n) =$$

$$= -2iN(E_F)\tau^2 T\sum_m \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d}\mathcal{V}(q\omega_m)\mathcal{T}^2(q\omega_m)\{\theta(\varepsilon_n)\theta(-\varepsilon_n-\omega_m)-\theta(-\varepsilon_n)\theta(\varepsilon_n+\omega_m)\} =$$

$$= -2iN(E_F)T\sum_m \int \frac{d^dq}{(2\pi)^d}\mathcal{V}(q\omega_m)\left\{\frac{\theta(\varepsilon_n)\theta(-\varepsilon_n-\omega_m)}{[-\omega_m+D_0q^2]^2}-\frac{\theta(-\varepsilon_n)\theta(\varepsilon_n+\omega_m)}{[\omega_m+D_0q^2]^2}\right\} \tag{4.290}$$

что для $\varepsilon_n > 0$ сводится к выражению, аналогичному (4.283):

$$\delta N(\varepsilon_n) = -2iTN(E_F)\sum_{\omega_m=-\infty}^{-\varepsilon_n}\int\frac{d^dq}{(2\pi)^d}\frac{\mathcal{V}(q\omega_m)}{(-\omega_m+D_0q^2)^2} \tag{4.291}$$

Здесь (ср. (2.7), (2.8)):

$$\mathcal{V}(q\omega_m) = \frac{4\pi e^2}{q^2\epsilon(q\omega_m)} \tag{4.292}$$

$$\epsilon(q\omega_m) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2}\Pi(q\omega_m) \tag{4.293}$$

где поляризационный оператор, учитывающий рассеяние на примесях, определяется графиками Рис. 4.12 (а) и выражением (4.89):

$$\Pi(\mathbf{q}\omega_m) = 2T\sum_n\int\frac{d^dp}{(2\pi)^d}G(\mathbf{p}\varepsilon_n)G(\mathbf{p}+\mathbf{q}\varepsilon_n+\omega_m)\mathcal{T}(\mathbf{q}\omega_m) \tag{4.294}$$

Пользуясь опять (4.282) и (4.274) и полагая, для примера, $\omega_m < 0$, получаем:

$$\Pi^{RA}(q\omega_m) = T\sum_{0<\varepsilon_n<-\omega_m}\frac{2\pi N(E_F)}{-\omega_m+D_0q^2} = N(E_F)\frac{-\omega_m}{-\omega_m+D_0q^2} \tag{4.295}$$

Случай $\omega_m > 0$ считается аналогично, и мы имеем:

$$\Pi^{RA}(q\omega_m) = N(E_F)\left\{\frac{\omega_m\theta(\omega_m)}{\omega_m+D_0q^2}+\frac{-\omega_m\theta(-\omega_m)}{-\omega_m+D_0q^2}\right\} \tag{4.296}$$

Теперь нужно найти еще вклад от $RR$ и $AA$ – каналов, когда, согласно (4.274):

$$\mathcal{T}(\mathbf{q}\omega_m\varepsilon_n) = \theta(\varepsilon_n)\theta(\varepsilon_n+\omega_m)+\theta(-\varepsilon_n)\theta(-\varepsilon_n-\omega_m) \tag{4.297}$$

Ввиду отсутствия здесь сингулярности (диффузионного полюса) можем просто положить $\omega_m = 0,\ q = 0$ и написать:

$$\Pi^{RR}(00)+\Pi^{AA}(00) = 2T\sum_n\sum_{\mathbf{p}}G^2(\varepsilon_n) = -N(E_F) \tag{4.298}$$

Чуть подробнее:

$$\Pi^{RR}(00)+\Pi^{AA}(00)=2T\sum_n\int\frac{d^dp}{(2\pi)^d}\frac{1}{(i\varepsilon_n-\xi(p)+i\gamma sign\varepsilon_n)^2}=$$
$$=T\sum_n N(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\frac{1}{i\varepsilon_n-\xi+i\gamma sign\varepsilon_n}\approx$$
$$\approx N(E_F)\sum_n\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\frac{1}{i\varepsilon_n-\xi}=N(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\left(-\frac{\partial n(\xi)}{\partial\xi}\right)=-N(E_F) \tag{4.299}$$

где $n(\xi)$ – функция распределения Ферми.

В результате, к (4.296) нужно еще добавить $-N(E_F)\{\theta(\omega_m)+\theta(-\omega_m)\}$ и мы получаем окончательно поляризационный оператор металла с примесями в виде:

$$\Pi(q\omega_m)=-N(E_F)D_0q^2\left\{\frac{\theta(\omega_m)}{\omega_m+D_0q^2}+\frac{\theta(-\omega_m)}{-\omega_m+D_0q^2}\right\} \tag{4.300}$$

Отсюда, используя (4.293), сразу же получаем:

$$\epsilon(q\omega_m)=1+\frac{D_0\kappa_D^2}{\omega_m+D_0q^2}\theta(\omega_m)+\frac{D_0\kappa_D^2}{-\omega_m+D_0q^2}\theta(-\omega_m) \tag{4.301}$$

где $\kappa_D^2=4\pi e^2N(E_F)$ – обратный квадрат радиуса дебаевского экранирования. При $\omega_m=0$ из (4.301) получаем обычный результат[50]:

$$\epsilon(q0)=1+\frac{\kappa_D^2}{q^2} \tag{4.302}$$

– статическое экранирование кулоновского взаимодействия. В общем случае, выражение (4.301) определяет диэлектрическую проницаемость металла с примесями в переделе $|\omega_m\tau|\ll 1$ и $ql\ll 1$.

В результате, при малых (в указанном смысле!) $\omega_m$ и $q$ получаем эффективное межэлектронное взаимодействие (4.292) в виде:

$$\mathcal{V}(q\omega_m)=\frac{4\pi e^2}{q^2-4\pi e^2\Pi(q\omega_m)}\approx$$
$$\approx\frac{4\pi e^2(-\omega_m+D_0q^2)}{4\pi e^2N(E_F)D_0q^2}=\frac{-\omega_m+D_0q^2}{N(E_F)D_0q^2} \tag{4.303}$$

где, для определенности, выписан случай $\omega_m<0$. Интересно заметить, что в этом приближении зависимость от электрического заряда $e^2$ вообще сокращается!

В результате, для динамически экранированного кулоновского взаимодействия (4.291) сводится к:

$$\delta N(\varepsilon_n>0)\approx-2iT\sum_{\omega_m=-\infty}^{-\varepsilon_n}\frac{1}{D_0}\int\frac{d^dq}{(2\pi)^d}\frac{q^{-2}}{-\omega_m+D_0q^2} \tag{4.304}$$

Для точечного взаимодействия аналогичное выражение, следующее из (4.283), имеет вид:

$$\delta N(\varepsilon_n>0)\approx-2iN(E_F)T\sum_{\omega_m=-\infty}^{-\varepsilon_n}\int\frac{d^dq}{(2\pi)^d}\frac{V_0}{[-\omega_m+D_0q^2]^2} \tag{4.305}$$

[50] С учетом доопределения: $\theta(\omega_m)=\begin{cases}1 & m\geq 0\\ 0 & m<0\end{cases}$.

Конкретные расчеты проведем для $d = 3$. Имеем:

$$\delta N(\varepsilon_n > 0) = -\frac{iT}{\pi^2}\sum_{\omega_m=-\infty}^{-\varepsilon_n}\frac{1}{D_0}\int_0^{p_0}\frac{dq}{D_0q^2-\omega_m} \qquad \text{(Кулон)} \tag{4.306}$$

$$\delta N(\varepsilon_n > 0) = -\frac{iT}{\pi^2}g\sum_{\omega_m=-\infty}^{-\varepsilon_n}\int_0^{p_0}\frac{dqq^2}{[D_0q^2-\omega_m]^2} \qquad \text{(короткодействие)} \tag{4.307}$$

где $g = N(E_F)V_0$ – безразмерная константа взаимодействия для случая точечного потенциала. После замены переменной $x^2 = D_0q^2$, эти выражения переписываются в виде:

$$\delta N(\varepsilon_n > 0) = -\frac{iT}{\pi^2 D_0^{3/2}}\sum_{\omega_m=-\infty}^{-\varepsilon_n}\Phi(\omega_m) \tag{4.308}$$

где

$$\Phi(\omega_m) = \begin{cases} \int_0^{x_0}\frac{dx}{x^2-\omega_m} & \text{(Кулон)} \\ g\int_0^{x_0}\frac{x^2dx}{(x^2-\omega_m)^2} & \text{(короткодействие)} \end{cases} \tag{4.309}$$

Теперь нам надо научиться считать входящую сюда сумму по бозевским мацубаровским частотам $\sum_{\omega_m=-\infty}^{-\varepsilon_n}\Phi(\omega_m) = \sum_{m=-\infty}^{-n}\Phi(\omega_m)$. Пользуясь $\omega_m = 2\pi mT$ и $\varepsilon_n = (2n+1)\pi T$, запишем ее в виде следующего интеграла по контуру, показанному на Рис. 4.25:

$$T\sum_{m=-\infty}^{-n}\Phi(i\omega_m) = \oint\frac{dz}{2\pi i}n_B(z)\Phi(z) = \int_{-i\varepsilon_n+\infty}^{-i\varepsilon_n-\infty}\frac{dz}{2\pi i}n_B(z)\Phi(z) =$$
$$= -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dz}{2\pi i}n_B(z-i\varepsilon_n)\Phi(z-i\varepsilon_n) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dz}{2\pi i}n(z)\Phi(z-i\varepsilon_n) \tag{4.310}$$

где $n_B(z) = \frac{1}{e^{\frac{z}{T}}-1}$ – бозевская, а $n(z) = \frac{1}{e^{\frac{z}{T}}+1}$ – фермиевская функция распределения, Все это "работает", если $\Phi(z)$ не имеет особенностей при $Im\ z < -\varepsilon_n$ и достаточно быстро спадает при $|z| \to \infty$. Тогда, для кулоновского случая запишем:

$$\Phi(z) = \int_0^{\infty}\frac{dx}{x^2+iz} \tag{4.311}$$

а для случая короткодействия:

$$\Phi(z) = g\int_0^{\infty}\frac{dxx^2}{(x^2+iz)^2} \tag{4.312}$$

Убывание при $|z| \to \infty$ здесь недостаточно быстрое, но это дает, как будет видно ниже, несущественную для наших целей бесконечную константу (в отличие от (4.309) здесь написаны интегралы без обрезания на верхнем пределе!). Делая в (4.310) замену $i\varepsilon_n \to E + i\delta$ (при $\varepsilon_n > 0$) и вычисляя мнимую часть с учетом $Im\Phi(z) = -Im\Phi(-z)$, получаем:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dzn(z)Im\Phi(z) = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}dz[n(z+E)-n(-z+E)]Im\Phi(z) =$$
$$= \int_0^{\infty}dz[n(z+E)-n(-z+E)]Im\Phi(z) \tag{4.313}$$

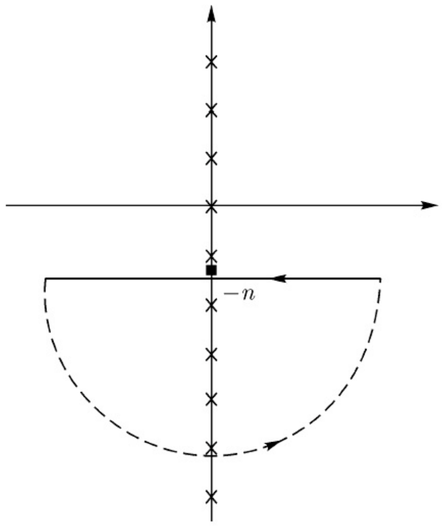



Рис. 4.25: Контур интегрирования, используемый при вычислении суммы по мацубаровским частотам.

Тогда поправка к плотности состояний представляется в виде:

$$\delta N(E) = -\frac{1}{2\pi^3 D_0^{3/2}} \int_0^\infty dz[n(z+E) + n(z-E) - 1] Im\Phi(z) \tag{4.314}$$

где учли, что $-n(-z) = 1 + n(z)$, что позволило выделить последний член в квадратных скобках, который и дает (подлежащий обрезанию!) расходящийся вклад, независящий от $E$, и потому далее не рассматриваемый.

Для кулоновского случая имеем:

$$Im\Phi(z) = -Im\int_0^\infty dx \frac{x^2 - iz}{(x^2+iz)(x^2-iz)} = z\int_0^\infty \frac{dx}{x^4+z^2} = \\ = \frac{1}{\sqrt{z}}\int_0^\infty \frac{dx}{x^4+1} = \frac{\pi}{2\sqrt{2z}} \tag{4.315}$$

Тогда, используя (4.315) в (4.314) (опуская несущественный сейчас для нас вклад последнего слагаемого, зависящий от параметра обрезания), получаем:

$$\delta N(E) = -\frac{1}{2^{5/2}\pi^2 D_0^{3/2}} \int_0^\infty d\omega \frac{1}{\sqrt{\omega}}[n(\omega+E) + n(\omega-E)] \tag{4.316}$$

или интегрируя по частям:

$$\delta N(E) = \frac{T^{1/2}}{2^{3/2}\pi^2 D_0^{3/2}} \varphi\left(\frac{E}{2T}\right) \tag{4.317}$$

где

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\int_0^\infty dy y^{1/2}\left\{\frac{1}{ch^2(x-y)} + \frac{1}{ch^2(x+y)}\right\} \tag{4.318}$$

Эти выражения описывают поведение "птички" в плотности состояний при конечных температурах. Отметим асимптотики:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \sqrt{\pi}(1-\sqrt{2})\zeta(1/2) \approx 1.07 & \text{при} \quad x \to 0 \\ \sqrt{2x} & \text{при} \quad x \gg 1 \end{cases} \tag{4.319}$$

Таким образом, и для кулоновского случая (при $T \to 0$) получаем:

$$\delta N(E) \sim \frac{\sqrt{|E|}}{D_0^{3/2}} \tag{4.320}$$

что вполне аналогично полученному выше результату (4.289) для случая короткодействия.

Найденные выше поправки к плотности состояний можно наглядно интерпретировать из следующих эвристических соображений. Рассмотрим взаимодействие электрона, находящегося в некотором квантовом состоянии $n$ с энергией $E$ с другим электроном, находящимся на поверхности Ферми. Относительная поправка к его волновой функции в первом порядке теории возмущений:

$$\frac{\delta\varphi_n}{\varphi_n} \sim \int_0^{\infty} dt H_{int}(t) \tag{4.321}$$

где $t=0$ – момент включения взаимодействия, а $H_{int}(t)$ – гамильтониан взаимодействия (взятый в представлении взаимодействия). За время $t$ электрон в неупорядоченном металле диффундирует в пределах объема $\sim (D_0t)^{d/2}$. Тогда величину матричного элемента взаимодействия при наличии короткодействующего отталкивания можно оценить как $V_0(D_0t)^{-d/2}$. Соответственно имеем:

$$\frac{\delta\varphi_n}{\varphi_n} \sim V_0 \int_{t_{min}}^{t_{max}} dt (D_0 t)^{-d/2} \sim \frac{V_0}{D_0^{d/2}} \left\{ t_{min}^{1-\frac{d}{2}} - t_{max}^{1-\frac{d}{2}} \right\} \tag{4.322}$$

Здесь $t_{min}$ естественно определить из условий применимости диффузионного приближения: $(D_0t_{min})^{1/2} \sim l$, что и дает $t_{min} \sim (D_0 l^{-2})^{-1} \sim \tilde{E}^{-1}$. Время $t_{max}$ определяется тем, что на временах $t > |E|^{-1}$ из-за (временных) осцилляций волновых функций матричный элемент взаимодействия эффективно зануляется. Тогда, полагая $\frac{\delta N(E)}{N(E_F)} \sim \frac{\delta\varphi_n}{\varphi_n}$ из (4.322) получаем (4.288).

Все это не конец, а лишь начало неоконченной истории о роли межэлектронного взаимодействия в неупорядоченных системах. Выше мы ограничились рассмотрением лишь одного (так называемого "фоковского") графика Рис. 4.23, учитывающего поправку низшего порядка. Существуют и многие другие графики, роль которых должна быть проанализирована даже в пределе слабого беспорядка $p_F l \gg 1$. Важные поправки (аналогичные по форме рассмотренным выше квантовым поправкам) возникают не только в плотности состояний, но и в проводимости. Заинтересованный читатель может найти подробное обсуждение всех этих проблем в оригинальных обзорах [17, 18, 19].

# Глава 5

# СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ

## 5.1 Феномен Купера.

Рассмотрим простейший процесс рассеяния двух электронов друг на друге за счет обмена фононом, показанный диаграммой на Рис. 5.1. Пунктирной линии на этом графике, по общим правилам, соответствует выражение:

$$g^2 D(\varepsilon_3-\varepsilon_1;\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_1)=g^2\frac{\omega^2_{\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_1}}{(\varepsilon_3-\varepsilon_1)^2-\omega^2_{\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_1}} \tag{5.1}$$

Если взаимодействуют электроны с малым *суммарным* импульсом, так что $\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_1\sim 0$ (почти противоположные импульсы!), то передаваемый импульс $\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_1$ не мал и (по модулю) $\sim 2p_F$. В тоже время для электронов, находящихся вблизи поверхности Ферми, имеем $\varepsilon_3\sim\varepsilon_1\sim 0$. Поэтому, фактически, выражение (5.1) сводится к:

$$g^2 D(\varepsilon_3-\varepsilon_1;\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_1)=-g^2<0 \tag{5.2}$$

что означает наличие эффективного притяжения таких электронов друг к другу. Таким образом возникает идея притяжения электронов с противоположными импульсами (и, в силу принципа Паули, противоположными спинами), лежащая в основе теории БКШ [1, 21]. В простейшем варианте модельного гамильтониана БКШ [1, 11] реальное взаимодействие за счет обмена фононами заменяется эффективным точечным притяжением, которое отлично от нуля в слое шириной $\sim 2\omega_D$ вблизи поверхности Ферми.

Куперовскую неустойчивость, возникающую за счет такого притяжения, можно рассчитать рассматривая "лестничные" диаграммы, описывающие взаимодействие двух квазичастиц вблизи поверхности Ферми, показанные на Рис. 5.2 (a), где волнистая линия сопоставляется этому притягивающему взаимодействию[1]. Сумма этого ряда (без внешних "хвостов") дается вершиной $\Gamma$, которая определяется интегральным уравнением, показанным на Рис. 5.2 (b), имеющим следующий аналитический вид:

$$\Gamma(p_3p_4;p_1p_2)=<p_3p_4|\Gamma|p_1p_2>=<p'+q,-p'|\Gamma|p+q,-p>=$$
$$=V(p-p')+i\int\frac{d^4p''}{(2\pi)^4}V(p'-p'')G_0(p''+q)G_0(-p'')<p''+q,-p''|\Gamma|p+q,-p> \tag{5.3}$$

[1] Подразумевается следующий выбор внешних 4-импульсов: $p_1=p+q$; $p_2=-p$; $p_3=p'+q$; $p_4=-p'$, так что $q$ есть малый суммарный 4-импульс.

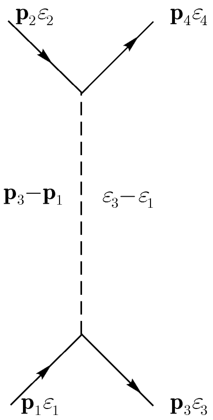



Рис. 5.1: Элементарный процесс взаимодействия двух электронов посредством обмена фононом.

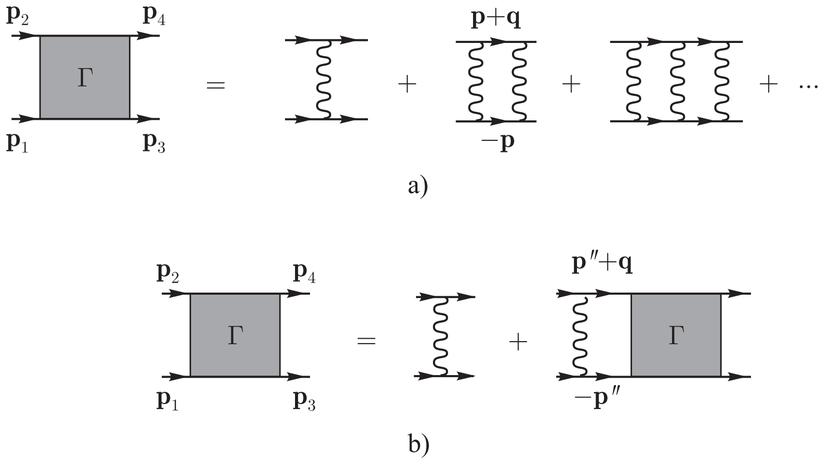



Рис. 5.2: "Лестница" в куперовском канале (a) и интегральное уравнение для соответствующей вершины (b).

В справедливости уравнения (5.3) легко убедиться итерациями — возникает, как раз, "лестничный" ряд. В модели БКШ взаимодействие $V(p-p')$ моделируется следующим образом:

$$V(p-p') \to V(p,p') = \lambda w_{\mathbf{p}} w_{\mathbf{p}'} \tag{5.4}$$

где

$$w_{\mathbf{p}} = \begin{cases} 1 & |\xi_{\mathbf{p}}| < \omega_D \\ 0 & |\xi_{\mathbf{p}}| > \omega_D \end{cases} \tag{5.5}$$

В рассмотренной выше простейшей модели электрон – фононного обмена $\lambda = -g^2$. Теперь уравнение (5.3) легко решается:

$$\Gamma(p_3p_4;p_1p_2) =< p'+q,-p'|\Gamma|p+q,-p >= \frac{\lambda w_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}} w_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}{1 - i\lambda \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} w^2_{p+q} G_0(p+q) G_0(-p)} \tag{5.6}$$

что проверяется непосредственной подстановкой в (5.3). Рассмотрим входящий сюда интеграл:

$$i\lambda \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} w^2_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} G_0(p+q)G_0(-p) = i\lambda \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} w^2_{\mathbf{p}} G_0(p)G_0(q-p) =$$
$$= i\lambda \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} w^2_{\mathbf{p}} \frac{1}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) + i\delta sign\xi(\mathbf{p})} \frac{1}{\omega_0 - \varepsilon - \xi(\mathbf{q}-\mathbf{p}) + i\delta sign \xi(\mathbf{q}-\mathbf{p})} \tag{5.7}$$

где $q = [\omega_0, \mathbf{q}] = [\varepsilon_1 + \varepsilon_2; \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2]$. Выполняя элементарное контурное интегрирование, получаем:

$$\int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{1}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) + i\delta sign\xi(\mathbf{p})} \frac{1}{\omega_0 - \varepsilon - \xi(\mathbf{q}-\mathbf{p}) + i\delta sign\xi(\mathbf{q}-\mathbf{p})} =$$
$$= \begin{cases} -i\frac{1}{\omega_0 - \xi(\mathbf{p}) - \xi(\mathbf{q}-\mathbf{p}) + i\delta} & \text{при} \quad \xi(\mathbf{p}) > 0;\ \xi(\mathbf{q}-\mathbf{p}) > 0 \\ i\frac{1}{\omega_0 - \xi(\mathbf{p}) - \xi(\mathbf{q}-\mathbf{p}) - i\delta} & \text{при} \quad \xi(\mathbf{p}) < 0;\ \xi(\mathbf{q}-\mathbf{p}) < 0 \end{cases} \tag{5.8}$$

Подставляя этот результат в (5.7) и переходя к интегрированию по энергетической переменной $\xi = \xi(p)$, с учетом того, что фактор $w_p^2$ обрезает это интегрирование на дебаевской частоте $\omega_D$, получаем:

$$i\lambda \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} w^2_{\mathbf{p}} G_0(p)G_0(q-p) \approx$$
$$\approx -\lambda \frac{mp_F}{2\pi^2} \int_0^{\omega_D} d\xi \int_0^1 dx \left\{ \frac{1}{\omega_0 + 2\xi + v_F qx - i\delta} + \frac{1}{2\xi + v_F qx - \omega_0 - i\delta} \right\} \tag{5.9}$$

где воспользовались $\xi(\mathbf{q}-\mathbf{p}) \approx \xi(\mathbf{p}) - v_F q \cos\theta$ и ввели переменную $x = \cos\theta$. Дальнейшие интегрирования элементарны, и мы получаем:

$$i\lambda \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} w^2_{\mathbf{p}} G_0(p)G_0(q-p) \approx$$
$$\approx -\lambda \frac{mp_F}{2\pi^2} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \ln \frac{2\omega_D - i\delta}{\omega_0 + v_F q - i\delta} + \frac{1}{2} \ln \frac{2\omega_D - i\delta}{-\omega_0 + v_F q - i\delta} + \right.$$
$$\left. + \frac{\omega_0}{2v_F q} \left( \ln \frac{\omega_0 - i\delta}{\omega_0 + v_F q - i\delta} + \ln \frac{v_F q - \omega_0 - i\delta}{-\omega_0 - i\delta} \right) \right\} \tag{5.10}$$

Главный (доминирующий) вклад в это выражение при малых (по сравнению с $\omega_D$) $\omega_0$ и $v_Fq$ имеет вид:

$$-\lambda\frac{mp_F}{2\pi^2}\ln\frac{\omega_D}{Max[2\omega_0;\ v_Fq]} \tag{5.11}$$

где возникает большой логарифм (в пределе — логарифмическая расходимость). В результате, для интересующей нас вершины (5.6) получаем:

$$\Gamma(p_3p_4;p_1p_2) = < p'+q,-p'|\Gamma|p+q,-p > \equiv \Gamma(q)w_{\mathbf{p'+q}}w_{\mathbf{p+q}} \tag{5.12}$$

где (при $\omega_0 > v_Fq$)[2]

$$\Gamma(q) = \lambda\left\{1+\lambda\frac{mp_F}{2\pi^2}\left[\ln e\left|\frac{2\omega_D}{\omega_0}\right| + \frac{i\pi}{2} + \frac{1}{2}\ln\left|\frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - v_Fq^2}\right| + \frac{\omega_0}{2v_Fq}\ln\left|\frac{\omega_0 - v_Fq}{\omega_0+v_Fq}\right|\right]\right\}^{-1} \tag{5.15}$$

Проанализируем теперь свойства вершинной части (5.15). Для простоты рассмотрим сначала случай $q=0$. При вещественных и положительных $\omega_0$ имеем:

$$\Gamma(\omega_0) = \frac{\lambda}{1+\lambda\frac{mp_F}{2\pi^2}\left[\ln\left|\frac{2\omega_D}{\omega_0}\right| + \frac{i\pi}{2}\right]} \tag{5.16}$$

Будем рассматривать теперь $\Gamma(\omega_0)$ как функцию комплексной переменной $\omega_0$, определяя ее как аналитическое продолжение (5.16) в верхнюю полуплоскость $Im\omega_0 > 0$. Тогда, полагая в (5.16) $\omega_0 = |\omega_0|e^{i\varphi}$, получаем:

$$\Gamma(\omega_0) = \frac{\lambda}{1+\lambda\frac{mp_F}{2\pi^2}\left[\ln\left|\frac{2\omega_D}{\omega_0}\right| + \frac{i\pi}{2} - i\varphi\right]} \tag{5.17}$$

Если взаимодействие электронов носит характер притяжения, то $\lambda < 0$ и (5.17) имеет полюс, определяемый уравнением[3]:

$$1+\lambda\frac{mp_F}{2\pi^2}\left[\ln\left|\frac{2\omega_D}{\omega_0}\right| - i\left(\frac{\pi}{2}-\varphi\right)\right] = 0 \tag{5.18}$$

т.е. при $\varphi = \frac{\pi}{2}$ и $1+\lambda\frac{mp_F}{2\pi^2}\left[\ln\left|\frac{2\omega_D}{\omega_0}\right|\right] = 0$. Иначе говоря, полюс имеется на *мнимой* частоте, $\omega_0 = i\tilde{\omega}$, где:

$$\tilde{\omega} = 2\omega_D\exp\left(-\frac{2\pi^2}{mp_F|\lambda|}\right) \tag{5.19}$$

В окрестности этого полюса $\Gamma(\omega_0)$ имеет вид:

$$\Gamma(\omega_0) \approx -\frac{2\pi^2}{mp_F}\frac{i\tilde{\omega}}{\omega_0 - i\tilde{\omega}} \tag{5.20}$$

---

[2]Здесь надо воспользоваться известным соотношением:

$$\ln z = \ln|z| + i\ arg\ z \tag{5.13}$$

где

$$arg\ z = arg(x+iy) = \begin{cases} arctg\frac{y}{x} & \text{при} \quad x>0 \\ \pi + arctg\frac{y}{x} & \text{при} \quad x<0;\ y>0 \\ -\pi + arctg\frac{y}{x} & \text{при} \quad x<0;\ y<0 \end{cases} \tag{5.14}$$

[3]В случае отталкивания ($\lambda > 0$) ничего особенного не происходит. Выражение (5.17) дает при этом сумму всех “лестничных” поправок к “затравочной” $\lambda$. Большой логарифм ведет тогда просто к эффективному уменьшению взаимодействия. Никакой “патологии” в этом случае не возникает.

Это означает возникновение *куперовской неустойчивости* — полюс вершинной части в верхней полуплоскости частоты означает возникновение в системе неустойчивой коллективной моды с экспоненциально растущей (со временем) амплитудой: $e^{-i\omega_0 t} \sim e^{-ii\tilde{\omega}t} \sim e^{\tilde{\omega}t}$! Это ведет к неустойчивости системы и необходимости перестройки ее основного состояния и спектра возбуждений.

При отличных от нуля $v_F q$ выражение (5.15) можно переписать в следующем виде (для $\omega_0 > v_F q$):

$$\Gamma(\mathbf{q}, \omega_0) = \lambda \left\{ 1 + \lambda \frac{mp_F}{2\pi^2} \left[ \ln e \left| \frac{2\omega_D}{\omega_0} \right| + \frac{i\pi}{2} - i\varphi - \frac{1}{2} \ln \left( 1 - \frac{v_F^2 q^2}{\omega_0^2} \right) + \frac{\omega_0}{2v_F q} \ln \left( \frac{\omega_0 - v_F q}{\omega_0 + v_F q} \right) \right] \right\}^{-1} \tag{5.21}$$

так что после продолжения в полуплоскость $Im\omega_0 > 0$ и использования определения $\tilde{\omega}$ из (5.19), находим:

$$\Gamma(\mathbf{q}, \omega_0) = -\frac{2\pi^2}{mp_F} \left\{ \ln \frac{\omega_0}{i\tilde{\omega}} - 1 + \frac{1}{2} \ln \left( 1 - \frac{v_F^2 q^2}{\omega_0^2} \right) - \frac{\omega_0}{2v_F q} \ln \left( \frac{\omega_0 - v_F q}{\omega_0 + v_F q} \right) \right\}^{-1} \tag{5.22}$$

При малых $v_F q \ll \tilde{\omega}$ имеем:

$$\Gamma(\mathbf{q}, \omega_0) \approx -\frac{2\pi^2}{mp_F} \frac{i\tilde{\omega}}{\omega_0 - i\tilde{\omega} + i\frac{v_F^2 q^2}{6\tilde{\omega}}} \tag{5.23}$$

Отсюда находим положение полюса как функцию $q$:

$$\omega_0 = i\tilde{\omega} \left( 1 - \frac{v_F^2 q^2}{6\tilde{\omega}^2} \right) \tag{5.24}$$

так что абсолютная величина $\omega_0$ уменьшается с ростом $q$. При некотором $v_F q_{max}$ точка полюса $\omega_0$ становится равной нулю, после чего, при больших $v_F q$ полюс в $\Gamma$ отсутствует. Поскольку величина $\mathbf{q}$ представляет собой импульс системы двух электронов как целого, этот результат означает, что тенденцию к образованию пар проявляют электроны, движущиеся почти навстречу друг другу.

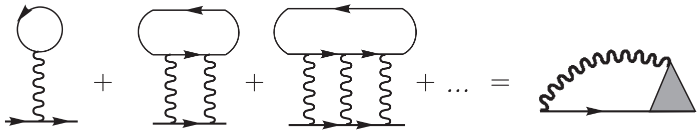
Куперовская "лестница" дает вклад в собственно – энергетическую часть электрона, показанный графически на Рис. 5.3 (a). Естественно, что существование полюсной особенности в "лестнице" приводит и к соответствующей сингулярности в $\Sigma(p)$ и в определяющей ее вершине, показанной на Рис. 5.3 (b).

Подчеркнем еще раз, что изложенные соображения свидетельствуют о неустойчивости обычного основного состояния ферми – газа с притяжением при $T = 0$. Эта неустойчивость состоит в способности частиц, центр инерции которых почти покоится, образовывать связанные пары, т.е. своего рода бозе – частицы, которые могут "конденсироваться" на основной уровень. Температура, при которой впервые возникает такая неустойчивость и является температурой перехода в сверхпроводящее состояние. Посмотрим, поэтому, ту же задачу в температурной (мацубаровской) технике.

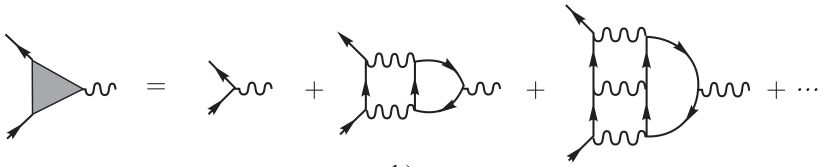
В приближении, в котором мы пренебрегаем рассеянием связанных пар друг на друге, они образуют идеальный бозе – газ, и температурная функция Грина для него имеет вид:

$$G(\mathbf{q}, \omega_m) = \frac{1}{i\omega_m - \frac{q^2}{2m^*} + \mu} \tag{5.25}$$

где $\omega_m = 2\pi mT$, $\mathbf{q}$ – импульс связанной пары, а $m^*$ – ее масса, равная удвоенной массе электрона. При $\omega_m = 0$ (5.25) сводится к $[\mu - q^2/2m^*]^{-1}$. При некоторой температуре $T = T_0$, называемой температурой бозе – конденсации, эта величина впервые



а)



b)

Рис. 5.3: Поправки к собственно – энергетической части электрона за счет рассеяния в куперовском канале (a) и графики для соответствующей вершины (b).

обращается в бесконечность при $q = 0$. Эта температура, очевидно, соответствует $\mu = 0$, в согласии со стандартным рассмотрением бозе – конденсации [11].

При учете внутренней структуры куперовской пары, аналогом (5.25) является двухчастичная фермионная функция Грина. В точке перехода она должна обладать аналогичными свойствами в смысле своей зависимости от переменных $\omega_{0m} = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)_n$ и $\mathbf{q} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$, соответствующих центру инерции пары. Фермионные функции Грина особенностями по этим переменным не обладают — нужно рассмотреть соответствующую вершинную часть $\Gamma(\mathbf{q}\omega_0)$, которая дается теми же лестничными диаграммами, что и выше, но в мацубаровской технике. Вся разница в том, что вместо (5.7) нужно теперь рассмотреть:

$$I = -\lambda T \sum_n \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} {w_{\mathbf{p}}}^2 \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p})} \frac{1}{i\omega_{0m} - i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{q}-\mathbf{p})} \tag{5.26}$$

где $\omega_{0m} = 2\pi m_0 T$ ($m_0$ – целое число). Мы не будем вычислять (5.26) при произвольных значениях $\omega_{0m}$ и $\mathbf{q}$, т.к. из общих соображений ясно, что как и в бозе – газе, полюс в $\Gamma(\mathbf{q}\omega_0)$ впервые появляется для значений $\omega_0 = q = 0$. Поэтому нам достаточно рассмотреть только этот случай. Тогда нам надо посчитать только:

$$I = \frac{\lambda}{(2\pi)^3} T \sum_n \int d^3p w_p^2 \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(p)} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi(p)} \approx$$
$$\approx -\lambda \frac{mp_F}{2\pi^2} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi T * \sum_n \frac{1}{\varepsilon_n^2 + \xi^2} = -\lambda \frac{mp_F}{2\pi^2} \int_0^{\omega_D} \frac{d\xi}{\xi} th \frac{\xi}{2T} \tag{5.27}$$

где сумма по частотам вычислялась с помощью (2.99). Интегрируя здесь по частям, получаем:

$$I = -\lambda \frac{mp_F}{2\pi^2} \left( \ln \frac{\omega_D}{2T} - \int_0^{\infty} dx \frac{\ln x}{ch^2 x} \right) \tag{5.28}$$

где в оставшемся интеграле заменили верхний предел $x = \frac{\omega_D}{2T}$ на бесконечность, с учетом его быстрой сходимости и интересующих нас $T \ll \omega_D$. Этот интеграл равен $\ln \frac{\pi}{4\gamma}$, где $\ln \gamma = C = 0.577...$ (постоянная Эйлера), так что $\gamma \approx 1.78$, а $\frac{2\gamma}{\pi} \approx 1.14$. В итоге получаем:

$$\Gamma(0,0)=\frac{\lambda}{1+\lambda\frac{mp_F}{2\pi^2}\ln\frac{2\gamma\omega_D}{\pi T}} \tag{5.29}$$

При $\lambda<0$ здесь опять возникает полюс, вблизи которого:

$$\Gamma(0,0)=-\frac{2\pi^2}{mp_F}\frac{T_c}{T-T_c} \tag{5.30}$$

где *температура сверхпроводящего перехода* $T_c$ определяется формулой БКШ (J.Bardeen, L.Cooper, J.Schrieffer, 1957):

$$T_c=\frac{2\gamma}{\pi}\omega_D\exp\left(-\frac{2\pi^2}{|\lambda|mp_F}\right)=\frac{2\gamma}{\pi}\omega_D\exp\left(-\frac{1}{|\lambda|\nu_F}\right) \tag{5.31}$$

Обратите внимание, что здесь входит плотность состояний на уровне Ферми $\nu_F$ в расчете на *одну* проекцию спина. Величина $|\lambda|\nu_F$ играет роль безразмерной константы спаривательного взаимодействия. Важно подчеркнуть, что зависимость от этой константы в (5.31) *неаналитическая* — это выражение нельзя разложить в ряд по степеням $\lambda$ при $\lambda\to 0$!

Введенная выше в (5.19) частота $\tilde{\omega}$, характеризующая неустойчивость системы при $T=0$, равна

$$\tilde{\omega}=\frac{\pi}{\gamma}T_c \tag{5.32}$$

## 5.2 Уравнения Горькова.

Из предыдущего ясно, что в области температур $T<T_c$ требуется специальное рассмотрение [1, 2]. Исходим из упрощенной модели ферми – газа с точечным притяжением, гамильтониан которой имеет вид:

$$H=H_0+H_{int}=$$

$$=\sum_\alpha\int d\mathbf{r}\psi^+_\alpha(\mathbf{r})\left[-\frac{1}{2m}\nabla^2-\mu\right]\psi_\alpha(\mathbf{r})+\frac{\lambda}{2}\sum_{\alpha\beta}\int d\mathbf{r}\psi^+_\alpha(\mathbf{r})\psi^+_\beta(\mathbf{r})\psi_\beta(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r}) \tag{5.33}$$

Формально это соответствует потенциалу взаимодействия $V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\lambda\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$, но в дальнейшем при вычислении интегралов и сумм мы будем подразумевать ограничение типа (5.4), (5.5), чтобы учесть реальную природу притяжения в сверхпроводниках.

В гейзенберговском представлении можно выписать стандартные уравнения движения для электронных операторов:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_\alpha(x)=[\psi_\alpha,H] \tag{5.34}$$

Коммутатор в правой части вычисляется непосредственно, с использованием основных коммутационных соотношений для операторов $\psi_\alpha(x)$:

$$\psi_\alpha(\mathbf{r},t)\psi^+_\beta(\mathbf{r}',t)+\psi^+_\beta(\mathbf{r}',t)\psi_\alpha(\mathbf{r},t)=\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{5.35}$$

$$\begin{aligned}\psi_\alpha(\mathbf{r},t)\psi_\beta(\mathbf{r}',t)+\psi_\beta(\mathbf{r}',t)\psi_\alpha(\mathbf{r},t)=0\\ \psi^+_\alpha(\mathbf{r},t)\psi^+_\beta(\mathbf{r}',t)+\psi^+_\beta(\mathbf{r}',t)\psi^+_\alpha(\mathbf{r},t)=0\end{aligned} \tag{5.36}$$

Прямые вычисления, связанные с последовательной коммутацией операторов с отдельными слагаемыми в гамильтониане (5.33), дают:

$$[\psi_\alpha(x), H_0] = -\left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\psi_\alpha(x) \tag{5.37}$$

$$[\psi_\alpha(x), H_{int}] = -\lambda\sum_\beta \psi^+_\beta(x)\psi_\beta(x)\psi_\alpha(x) \tag{5.38}$$

$$[\psi^+_\alpha(x), H_0] = \left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\psi^+_\alpha(x) \tag{5.39}$$

$$[\psi^+_\alpha(x), H_{int}] = \lambda\sum_\beta \psi^+_\alpha(x)\psi^+_\beta(x)\psi_\beta(x) \tag{5.40}$$

так что в явном виде уравнения движения выглядят следующим образом:

$$i\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t} = -\left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\psi_\alpha - \lambda\psi^+_\gamma\psi_\gamma\psi_\alpha \tag{5.41}$$

$$i\frac{\partial\psi^+_\alpha}{\partial t} = \left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\psi^+_\alpha + \lambda\psi^+_\alpha\psi^+_\gamma\psi_\gamma \tag{5.42}$$

где по повторяющимся греческим (спиновым) индексам подразумевается суммирование.

Согласно предполагаемой нами качественной картине основного состояния сверхпроводника, при $T = 0$ в системе имеется *конденсат* куперовских пар, содержащий огромное (макроскопическое) число частиц. Очевидно, что состояние такой системы, фактически, не меняется при изменении на единицу числа пар в конденсате[4]. Математически это выражается наличием отличных от нуля (в пределе числа частиц $N \to \infty$) значений матричных элементов:

$$\lim_{N\to\infty} < m, N|\psi_\beta(x_2)\psi_\alpha(x_1)|m, N+2 >= \lim_{N\to\infty} < m, N+2|\psi^+_\alpha(x_1)\psi^+_\beta(x_2)|m, N >^* \neq 0 \tag{5.43}$$

Здесь $\psi_\beta(x_2)\psi_\alpha(x_1)$ представляет собой оператор уничтожения двух электронов, а $\psi^+_\alpha(x_1)\psi^+_\beta(x_2)$ – аналогичный оператор рождения пары. В дальнейшем мы будем, для краткости, опускать знак взятия предела, а также опустим и диагональный матричный индекс, нумерующий "одинаковые" состояния систем с различным числом частиц.

Таким образом, при переходе системы в сверхпроводящее состояние происходит *спонтанное нарушение калибровочной симметрии*[5], соответствующей закону сохранения числа частиц — электроны могут попарно "уходить" в конденсат или, наоборот, "возникать" из конденсата. Макросостояние системы при этом не изменяется (при $N \to \infty$!).

Поэтому, наряду с обычной (нормальной) функцией Грина:

$$iG_{\alpha\beta}(x_1, x_2) =< N|T\psi_\alpha(x_1)\psi^+_\beta(x_2)|N > \tag{5.44}$$

[4] Отметим очевидную аналогию этого предположения с аналогичной гипотезой, принимаемой в теории бозе – газа со слабым взаимодействием по Боголюбову [11].

[5] Концепция спонтанного нарушения симметрии играет центральную роль в современной теории фазовых переходов II рода [24]. Основное состояние "конденсированной" фазы, возникающей при температурах ниже точки перехода $T_c$, всегда имеет симметрию *ниже* симметрии гамильтониана, описывающего данный фазовый переход [11]

необходимо ввести также и так называемые *аномальные* функции Грина[6]:

$$iF_{\alpha\beta}(x_1, x_2) =< N|T\psi_\alpha(x_1)\psi_\beta(x_2)|N+2> \tag{5.45}$$

$$iF^+_{\alpha\beta}(x_1, x_2) =< N+2|T\psi^+_\alpha(x_1)\psi^+_\beta(x_2)|N> \tag{5.46}$$

Аномальные функции Грина $F_{\alpha\beta}$ и $F^+_{\alpha\beta}$ удовлетворяют следующим общим свойствам симметрии, следующим из коммутационных свойств входящих в них операторов:

$$F_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = -F_{\beta\alpha}(x_2, x_1) \qquad F^+_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = -F^+_{\beta\alpha}(x_2, x_1) \tag{5.47}$$

В дальнейшем мы всюду рассматриваем только синглетное (по спину) куперовское спаривание, реализующееся в подавляющем большинстве металлических сверхпроводников[7]. Отделим спиновую зависимость записав:

$$F_{\alpha\beta} = A_{\alpha\beta}F \qquad F^+_{\alpha\beta} = B_{\alpha\beta}F^+ \tag{5.48}$$

Но, в соответствии с принципом Паули, имеем $<\psi_\alpha(x)\psi_\alpha(x)>= 0$, так что $F_{\alpha\alpha} = F^+_{\alpha\alpha} = 0$. Соответственно $A_{\alpha\alpha} = B_{\alpha\alpha} = 0$, и матрицы $A$ и $B$ могут быть представлены в виде:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & a_1 \\ a_2 & 0 \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} 0 & b_1 \\ b_2 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.49}$$

Для синглетного спаривания $F(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = F(\mathbf{r}'-\mathbf{r})$, тогда из (5.47) следует $A_{\alpha\beta} = -A_{\beta\alpha}$ и $B_{\alpha\beta} = -B_{\beta\alpha}$, так что[8]:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & a \\ -a & 0 \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} 0 & b \\ -b & 0 \end{pmatrix} \tag{5.50}$$

и из $(F^+_{\alpha\beta})^* = -F_{\alpha\beta}$ получаем $B^* = -A$, так что и $b^* = -a$. Соответственно:

$$A = a\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \qquad B = -a^*\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.51}$$

Тогда спиновая зависимость аномальных функций Грина сводится к единичному антисимметричному спинору 2 – ранга:

$$g_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = i\sigma^y_{\alpha\beta} \qquad (\hat{g}^2)_{\alpha\beta} = -\delta_{\alpha\beta} \tag{5.52}$$

где $\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$. Поэтому мы можем записать аномальные функции в виде:

$$F_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = g_{\alpha\beta}F(x_1, x_2) \qquad F^+_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = g_{\alpha\beta}F^+(x_1, x_2) \tag{5.53}$$

где справа стоят функции симметричные по $x_1$ и $x_2$. Спиновая зависимость нормальной функции Грина $G_{\alpha\beta}$ (для немагнитной системы) сводится к $G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}G$. Кроме того, в однородной системе гриновские функции $G$, $F$, $F^+$ зависят только от разностей координат точек и разности моментов времени.

Введем аномальные функции в совпадающих точках:

$$\Xi(x) = iF(x, x) \qquad \Xi^*(x) = -iF^+(x, x) \tag{5.54}$$

которые иногда называют волновыми функциями куперовских пар, находящихся в конденсате. В стационарной макроскопически однородной системе $\Xi(x)$ сводится к

[6] Отметим тесную связь появления в теории аномальных функций Грина с идеологией квазисредних Боголюбова [11, 24, 25]

[7] Триплетное спаривание имеет место в сверхтекучих фазах $He^3$ и в некоторых металлических соединениях, например в $Sr_2RuO_4$.

[8] Для триплетного спаривания координатная часть аномальной функции Грина антисимметрична, а спиновая, наоборот, симметрична.

постоянной, причем надлежащим выбором фаз $\psi$ – операторов можно сделать эту постоянную действительной.

Займемся теперь задачей вычисления рассматриваемых функций Грина в модели ферми – газа с притяжением, определяемой гамильтонианом (5.33). Уравнения движения для операторов $\psi$ и $\psi^+$ выписаны выше в (5.41) и (5.42). Имеем[9]:

$$\frac{\partial}{\partial t_1}G_{\alpha\beta} = -i\left\langle T\frac{\partial\psi_\alpha(x_1)}{\partial t_1}\psi^+_\beta(x_2)\right\rangle - i\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\delta(t_1-t_2) \tag{5.56}$$

так что подставляя сюда (5.41), получаем уравнение движения для нормальной функции Грина в виде:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla^2}{2m}+\mu\right)G_{\alpha\beta}(x-x') - i\lambda < N|T\psi^+_\gamma(x)\psi_\gamma(x)\psi_\alpha(x)\psi^+_\beta(x')|N >= \delta_{\alpha\beta}\delta(x-x') \tag{5.57}$$

Фигурирующий здесь диагональный матричный элемент произведения четырех $\psi$ – операторов можно расписать (“по Вику”), выписав все возможные спаривания (суммы произведений матричных элементов пар операторов):

$$\begin{aligned} < N|T\psi^+_\gamma(x)\psi_\gamma(x)\psi_\alpha(x)\psi^+_\beta(x')|N >\approx G_{\gamma\gamma}(0)G_{\alpha\beta}(x-x') - G_{\alpha\gamma}(0)G_{\gamma\beta}(x-x') +\\ + < N|T\psi_\gamma(x)\psi_\alpha(x)|N+2 >< N+2|T\psi^+_\gamma(x)\psi^+_\beta(x')|N > \end{aligned} \tag{5.58}$$

Члены типа $GG$ для нас сейчас несущественны, поскольку они приведут только к некоторой перенормировке энергии возбуждений в нормальном состоянии. Поэтому в дальнейшем мы сохраним только вклад последней строки в (5.58), где содержатся матричные элементы для переходов с изменением числа частиц $N \leftrightarrow N+2$, так что[10]:

$$\begin{aligned} < N|T\psi^+_\gamma(x)\psi_\gamma(x)\psi_\alpha(x)\psi^+_\beta(x')|N >\to\\ \to< N|T\psi_\gamma(x)\psi_\alpha(x)|N+2 >< N+2|T\psi^+_\gamma(x)\psi^+_\beta(x')|N >=\\ = -F_{\gamma\alpha}(x,x)F^+_{\gamma\beta}(x,x') = -\delta_{\alpha\beta}F(0)F^+(x-x') \end{aligned} \tag{5.59}$$

где учли (5.45), (5.46) и (5.52), (5.53). С учетом (5.59) уравнение (5.57) сводится к:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla^2}{2m}+\mu\right)G(x) + \lambda\Xi F^+(x) = \delta(x) \tag{5.60}$$

где заменили аргумент $x-x'$ на $x$, а постоянную $iF(0)$ обозначили как $\Xi$.

Но мы должны теперь написать еще и уравнение движения для аномальной функции Грина $F^+(x)$! Для этого вычислим производную:

$$i\frac{\partial}{\partial t_1}F^+_{\alpha\beta}(x-x') = \left\langle N+2\left|T\frac{\partial\psi^+_\alpha(x)}{\partial t_1}\psi^+_\beta(x')\right|N\right\rangle \tag{5.61}$$

---

[9]Для получения второго слагаемого в (5.56) нужно вспомнить про разрывность $G_{\alpha\beta}$ при $t_1=t_2$:

$$G_{\alpha\beta}|_{t_1=t_2+0} - G_{\alpha\beta}|_{t_1=t_2-0} = -i < \psi_\alpha(t_1,\mathbf{r}_1)\psi^+(t_1,\mathbf{r}_2) + \psi^+_\beta(t_1,\mathbf{r}_2)\psi_\alpha(t_1,\mathbf{r}_1) >= -i\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) \tag{5.55}$$

[10]В нормальной ферми – системе (без конденсата) они, естественно, равны нулю. Но здесь эти аномальные вклады ведут к качественно новым выводам.

Заметим, что член с $\delta$ – функцией, типа второго слагаемого в (5.56), здесь не возникает, поскольку $F_{\alpha\beta}(x-x')$ (в отличие от $G_{\alpha\beta}(x-x')$) непрерывна при $t=t'$ (в силу антикоммутативности $\psi^+_\alpha(t,\mathbf{r})$ и $\psi^+_\beta(t,\mathbf{r}'))$. Подставляя (5.41) в (5.61) и снова проводя выделение конденсатного вклада, аналогично тому, как это делалось в (5.59), получаем уравнение:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\nabla^2}{2m}-\mu\right)F^+(x)+\lambda\Xi^*G(x)=0 \tag{5.62}$$

Таким образом мы получаем замкнутую систему уравнений (5.60) и (5.62), определяющую функции Грина сверхпроводника (Л.П.Горьков, 1958).

Переходя к импульсному представлению, уравнения Горькова можно записать в виде $\left(p=(\varepsilon,\mathbf{p}),\ \xi(\mathbf{p})=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}-\mu\right)$:

$$(\varepsilon-\xi(\mathbf{p}))G(p)+\lambda\Xi F^+(p)=1 \tag{5.63}$$

$$(\varepsilon+\xi(\mathbf{p}))F^+(p)+\lambda\Xi^*G(p)=0 \tag{5.64}$$

Исключая из этой системы $F^+$ этой системы уравнений сразу же находим:

$$(\varepsilon^2-\xi^2(\mathbf{p})-|\Delta|^2)G(p)=\varepsilon+\xi(\mathbf{p}) \tag{5.65}$$

где ввели обозначение:

$$\Delta=\lambda\Xi \tag{5.66}$$

Эта величина, как мы увидим ниже, будет играть роль *энергетической щели* в спектре возбуждений сверхпроводника и, одновременно, *параметра порядка* сверхпроводящего перехода.

Формальное решение (5.65) имеет вид:

$$G(p)=\frac{\varepsilon+\xi(\mathbf{p})}{\varepsilon^2-\varepsilon^2(\mathbf{p})}=\frac{u_p^2}{\varepsilon-\varepsilon(\mathbf{p})}+\frac{v_p^2}{\varepsilon+\varepsilon(\mathbf{p})} \tag{5.67}$$

где

$$\varepsilon(\mathbf{p})=\sqrt{\xi^2(\mathbf{p})+|\Delta|^2} \tag{5.68}$$

спектр элементарных возбуждений теории БКШ (с щелью $2|\Delta|$), а $u_p$ и $v_p$ есть известные коэффициенты Боголюбова [11]:

$$\left.\begin{matrix}u_p^2\\ v_p^2\end{matrix}\right\}=\frac{1}{2}\left(1\pm\frac{\xi(\mathbf{p})}{\sqrt{\xi^2(\mathbf{p})+|\Delta|^2}}\right) \tag{5.69}$$

Выражение (5.67) еще недоопределено — нужно еще задать способ обхода полюсов, иначе остается неопределенной мнимая часть функции $G$. Дело в том, что она, очевидно, содержит $\delta(\varepsilon\pm\varepsilon(\mathbf{p}))$ и потому выпадает при умножении на $(\varepsilon^2-\varepsilon^2(\mathbf{p}))$ в (5.65). По общим аналитическим свойствам [1] знак мнимой части функции Грина противоположен знаку переменной $\varepsilon$, поэтому в членах с положительными и отрицательными полюсами эту переменную нужно заменить на $\varepsilon\pm i\delta$, тогда

$$G(\varepsilon\mathbf{p})=\frac{u_p^2}{\varepsilon-\varepsilon(\mathbf{p})+i\delta}+\frac{v_p^2}{\varepsilon+\varepsilon(\mathbf{p})-i\delta}=\frac{\varepsilon+\xi(\mathbf{p})}{(\varepsilon-\varepsilon(\mathbf{p})+i\delta)(\varepsilon+\varepsilon(\mathbf{p})-i\delta)} \tag{5.70}$$

Теперь находим и $F^+$ из уравнения (5.64):

$$F^+(\varepsilon\mathbf{p}) = -\frac{\lambda\Xi^*}{(\varepsilon-\varepsilon(\mathbf{p})+i\delta)(\varepsilon+\varepsilon(\mathbf{p})-i\delta)} = -\frac{\Delta^*}{(\varepsilon-\varepsilon(\mathbf{p})+i\delta)(\varepsilon+\varepsilon(\mathbf{p})-i\delta)} \quad (5.71)$$

В тоже время имеем, по определению:

$$i\Xi^* = F^+(x=0) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}F^+(\varepsilon\mathbf{p}) \quad (5.72)$$

Подставляя сюда (5.71), выполняем интегрирование по $\varepsilon$ путем замыкания контура в верхней полуплоскости, так что интеграл выражается через вычет в полюсе $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$. В результате, после сокращения на $\Xi^*$ получаем:

$$1 = -\frac{\lambda}{2(2\pi)^3}\int d^3p\frac{1}{\sqrt{\xi^2(\mathbf{p})+\Delta^2}} \quad (5.73)$$

— уравнение для щели теории БКШ. Напомним, что у нас $\lambda < 0$, кроме того мы пишем $\Delta$ уже без знака модуля, поскольку, как отмечено выше, в данном случае мы можем считать щель вещественной. Расходимость интеграла в (5.73), как известно, обрезается исходя из условия, что в модели БКШ взаимодействуют (притягиваются) только электроны с энергиями, лежащими в слое толщиной $2\omega_D$ около поверхности Ферми (ср. (5.4), (5.5)). Тогда имеем:

$$\frac{|\lambda|}{2(2\pi)^3}\int dp\frac{4\pi p^2}{\sqrt{\xi^2(\mathbf{p})+\Delta^2}} \to \frac{|\lambda|p_F^2}{4\pi^2 v_F}\int_{-\omega_D}^{\omega_D}\frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}} = \frac{|\lambda|mp_F}{2\pi^2}\ln\frac{2\omega_D}{\Delta} \quad (5.74)$$

так что (5.73) сводится к:

$$1 = |\lambda|\frac{mp_F}{2\pi^2}\ln\frac{2\omega_D}{\Delta} \quad (5.75)$$

что дает стандартный результат БКШ:

$$\Delta_0 = 2\omega_D e^{-\frac{2\pi^2}{|\lambda|mp_F}} = 2\omega_D e^{-\frac{1}{|\lambda|\nu_F}} \quad (5.76)$$

Сравнивая с (5.31), имеем:

$$\Delta_0 = \frac{\pi}{\gamma}T_c \quad (5.77)$$

Полезно рассчитать плотность состояний электронов в модели БКШ. Исходя из общего определения (4.99) и (5.67), (5.70), имеем:

$$N(\varepsilon) = -\frac{2}{\pi}\nu_F\int_{-\infty}^{\infty}d\xi ImG^R(\varepsilon,\xi) =$$

$$= -\frac{2}{\pi}\nu_F sign\varepsilon Im\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\frac{\varepsilon+\xi}{\varepsilon^2-\xi^2-\Delta^2} = \frac{2}{\pi}|\varepsilon|Im\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\frac{1}{\xi^2+\Delta^2-\varepsilon^2} =$$

$$= 2\nu_F|\varepsilon|Im\frac{1}{\sqrt{\Delta^2-\varepsilon^2}} \quad (5.78)$$

где учли, что при $T=0$ выполняется соотношение $ImG^R(\varepsilon\mathbf{p}) = sign\varepsilon ImG(\varepsilon\mathbf{p})$ [1]. Тогда, вводя плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми для обеих проекций спина $N(E_F) = 2\nu_F$, имеем:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N(E_F)} = \begin{cases} \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2-\Delta^2}} & \text{при} \quad |\varepsilon| > \Delta \\ 0 & \text{при} \quad |\varepsilon| < \Delta \end{cases} \quad (5.79)$$

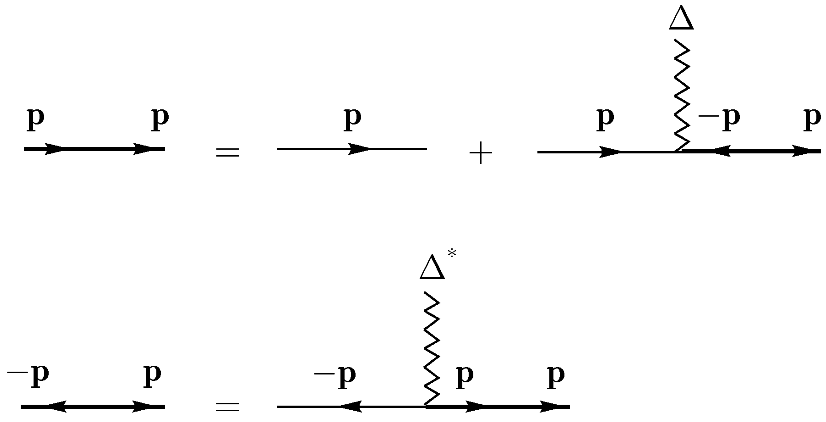



Рис. 5.4: Диаграммное представление уравнений Горькова.

Это – знаменитый результат теории БКШ. Плотность состояний равна нулю внутри щели, т.е. в области энергий шириной $2\Delta$ вокруг уровня Ферми. При $\varepsilon = \pm\Delta$ в ней имеются корневые особенности, а при $|\varepsilon| \to \infty$, значение плотности состояний выходит на асимптотику модели свободных электронов $N(E_F)$.

Уравнения Горькова можно представить в диаграммном виде, как это показано на Рис. 5.4, где зигзагообразная линия обозначает "когерентное" (конденсат!) поле параметра порядка $\Delta$, а для аномальной функции Грина используется стандартное обозначение с противоположно направленными стрелками[11]. В аналитическом виде этим графикам соответствует система уравнений[12]:

$$G(p) = \frac{1}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p})} - \frac{1}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p})}\Delta F^+(p) \tag{5.80}$$

$$F^+(p) = -\frac{1}{\varepsilon + \xi(\mathbf{p})}\Delta^* G(p) \tag{5.81}$$

эквивалентная (5.63), (5.64).

Используя (5.66) и уравнение, сопряженное (5.72), напишем:

$$\Delta = \lambda\Xi = i\lambda\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}F(\varepsilon\mathbf{p}) \tag{5.82}$$

что можно изобразить диаграммой Рис. 5.5 (a), после чего из графиков Рис. 5.4 возникает графическая запись уравнений Горькова, показанная на Рис. 5.5 (b)[13].

Часто используется матричная запись уравнений Горькова, предложенная впервые Намбу. При этом, наряду с $G$, $F^+$ и $F$ (т.е. (5.44), (5.45) и сопряженной к (5.45)) вводят еще:

$$i\tilde{G}_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = < N|T\psi^+_\alpha(x_1)\psi_\beta(x_2)|N > \tag{5.83}$$

которая входит в систему уравнений типа (5.80), (5.81):

$$\tilde{G}(p) = \frac{1}{\varepsilon + \xi(\mathbf{p})} - \frac{1}{\varepsilon + \xi(\mathbf{p})}\Delta^* F(p) \tag{5.84}$$

---

[11] Изображенные на этих графиках процессы взаимодействия с $\Delta$ можно интерпретировать как "уход" электронов в конденсат пар или их "возникновение" из конденсата.

[12] Для краткости мы опускаем здесь бесконечно малые мнимости в функциях Грина свободных частиц.

[13] Заметим, что здесь, как и выше, мы просто пренебрегаем вкладом спаривательного взаимодействия в собственно – энергетическую часть нормальной функции Грина.

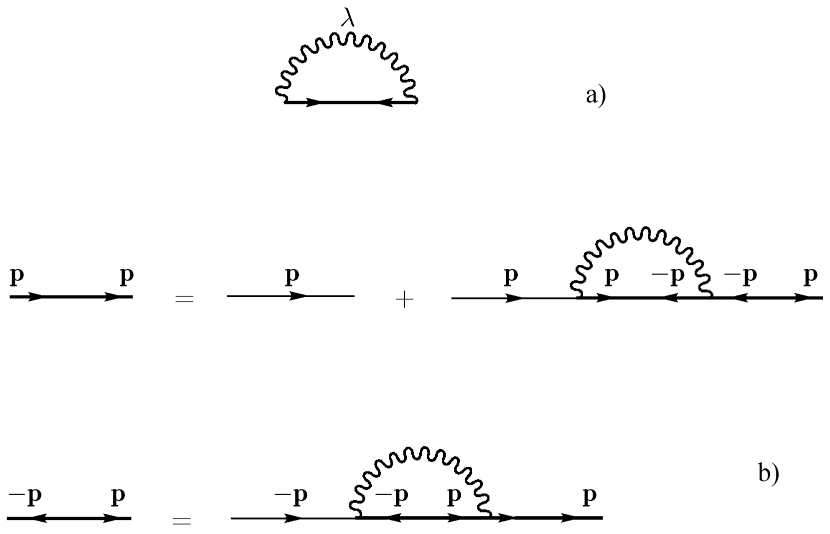



Рис. 5.5: Собственно – энергетическая часть от спаривательного взаимодействия на аномальной функции Грина (a) и еще одна форма графического представления уравнений Горькова (b).

$$F(p) = -\frac{1}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p})}\Delta\tilde{G}(p) \tag{5.85}$$

Тогда можно ввести матричную функцию Грина вида:

$$\hat{G}(p) = \begin{pmatrix} G(p) & F(p) \\ F^+(p) & \tilde{G}(p) \end{pmatrix} \tag{5.86}$$

и записать обе пары уравнений Горькова ((5.80), (5.81) и (5.84), (5.85)) единым образом как:

$$\left\{\varepsilon\hat{1} - \hat{\sigma}_z\xi(\mathbf{p}) + \frac{1}{2}\left(\Delta\hat{\sigma}^+ + \Delta^*\hat{\sigma}^-\right)\right\}\hat{G}(p) = \hat{1} \tag{5.87}$$

где введены стандартные матрицы Паули $\hat{\sigma}_x,\ \hat{\sigma}_y,\ \hat{\sigma}_z$ и их линейные комбинации $\hat{\sigma}^{\pm} = \hat{\sigma}_x \pm i\hat{\sigma}_y$.

Легко проверить, что

$$i\hat{G}(x_1, x_2) = < T\hat{\psi}(x_1)\hat{\psi}^+(x_2) > \tag{5.88}$$

где

$$\hat{\psi}(x_1) = \begin{pmatrix} \psi_\alpha(x_1) \\ \psi^+_\beta(x_1) \end{pmatrix} \qquad \hat{\psi}^+(x_2) = (\psi^+_\alpha(x_2), \psi_\beta(x_2)) \tag{5.89}$$

— спиноры Намбу.

Если сверхпроводник находится во внешнем электромагнитном поле, то функции Грина уже не будут зависеть только от разности координат. Введение электромагнитного поля легко провести в уравнениях Горькова в форме (5.60), (5.62). Это делается обычной заменой:

$$\nabla\psi \to (\nabla - ie\mathbf{A})\psi \qquad \nabla\psi^+ \to (\nabla + ie\mathbf{A})\psi^+ \tag{5.90}$$

где $\mathbf{A}$ — внешний вектор – потенциал[14]. Тогда уравнения для $G$ и $F^+$ принимают вид:

$$\left\{i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla - ie\mathbf{A})^2 + \mu\right\}G(x, x') + i\lambda F(x, x)F^+(x, x') = \delta(x - x') \tag{5.91}$$

[14]Подразумевается выбор калибровки, в которой скалярный потенциал $\phi = 0$.

$$\left\{i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{2m}(\nabla+ie\mathbf{A})^2-\mu\right\}F^+(x,x')+i\lambda F^-(x,x)G(x,x')=0 \qquad (5.92)$$

При градиентном преобразовании:

$$\mathbf{A}\to\mathbf{A}+\nabla\varphi \qquad (5.93)$$

функции Грина $G$, $F$ и $F^+$ преобразуются как:

$$G(x,x')\to G(x,x')e^{ie[\varphi(\mathbf{r})-\varphi(\mathbf{r}')]} \qquad (5.94)$$

$$F(x,x')\to F(x,x')e^{+ie[\varphi(\mathbf{r})+\varphi(\mathbf{r}')]} \qquad (5.95)$$

$$F^+(x,x')\to F^+(x,x')e^{-ie[\varphi(\mathbf{r})+\varphi(\mathbf{r}')]} \qquad (5.96)$$

поскольку *заряженные* поля электронов преобразуются, при этом, как:

$$\psi(x)\to\psi e^{ie\varphi(\mathbf{r})} \qquad \psi^+(x)\to\psi^+e^{-ie\varphi(\mathbf{r})} \qquad (5.97)$$

Тогда "щели" $\Delta(x)\sim|\lambda|F(x,x)$ или $\Delta^*(x)\sim|\lambda|F^+(x,x)$, которые во внешнем поле являются, вообще говоря, функциями $x$, преобразуются по закону:

$$F(x,x)\to F(x,x)e^{2ie\varphi(\mathbf{r})} \qquad F^+(x,x)\to F^+(x,x)e^{-2ie\varphi(\mathbf{r})} \qquad (5.98)$$

что, в соответствии с общей идеологией теории калибровочных полей [20], означает, что параметр порядка теории сверхпроводимости ("щель") $\Delta$ является *заряженным* полем с зарядом $2e$, равным удвоенному заряду электрона (конденсат куперовских пар)!

Перейдем к рассмотрению случая конечных температур. В мацубаровской технике, наряду, с "нормальной" функцией Грина электрона, для сверхпроводника нужно ввести и "аномальную":

$$F_{\alpha\beta}(\tau_1,\mathbf{r}_1;\tau_2,\mathbf{r}_2)=Sp\left\{e^{\frac{\Omega+\mu N-H}{T}}T_\tau(\psi_\alpha(\tau_1\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\tau_2\mathbf{r}_2))\right\} \qquad (5.99)$$

$$F^+_{\alpha\beta}(\tau_1,\mathbf{r}_1;\tau_2,\mathbf{r}_2)=Sp\left\{e^{\frac{\Omega+\mu N-H}{T}}T_\tau(\bar\psi_\alpha(\tau_1\mathbf{r}_1)\bar\psi_\beta(\tau_2\mathbf{r}_2))\right\} \qquad (5.100)$$

где

$$\psi_\alpha(\tau\mathbf{r})=e^{\tau(H-\mu N)}\psi_\alpha(\mathbf{r})e^{-\tau(H-\mu N)} \qquad \bar\psi_\beta(\tau\mathbf{r})=e^{\tau(H-\mu N)}\psi^+_\beta(\mathbf{r})e^{-\tau(H-\mu N)} \qquad (5.101)$$

и усреднение в (5.99) и (5.100) ведется по большому каноническому ансамблю Гиббса ($\Omega$ – соответствующий термодинамический потенциал), $T_\tau$ – операция упорядочения по мнимому (мацубаровскому) времени[15].

Спиновая зависимость этих функций отделяется в виде (аналогично (5.53))[16]:

$$F_{\alpha\beta}=g_{\alpha\beta}F \qquad F^+_{\alpha\beta}=-g_{\alpha\beta}F^+ \qquad (5.103)$$

---

[15] Для нормальной функции Грина подразумевается стандартное определение [1]:

$$G_{\alpha\beta}(\tau_1,\mathbf{r}_1;\tau_2,\mathbf{r}_2)=-Sp\left\{e^{\frac{\Omega+\mu N-H}{T}}T_\tau(\psi_\alpha(\tau_1\mathbf{r}_1)\bar\psi_\beta(\tau_2\mathbf{r}_2))\right\} \qquad (5.102)$$

[16] Отличие в знаке, по сравнению с (5.53), связано здесь отсутствием в определениях (5.99), (5.100) множителя $i$, который был в технике $T=0$.

Как и $G$, функции $F$ и $F^+$ зависят от разности $\tau = \tau_1 - \tau_2$ и удовлетворяют условиям “антипериодичности”:

$$F(\tau) = -F\left(\tau + \frac{1}{T}\right) \qquad F^+(\tau) = -F^+\left(\tau + \frac{1}{T}\right) \tag{5.104}$$

так что ряды Фурье по $\tau$ для этих функций содержат только нечетные частоты $\varepsilon_n = \pi T(2n+1)$. Мацубаровские $\psi$ – операторы при $\tau = 0$ совпадают с гейзенберговскими при $t = 0$, поэтому из сравнения определений (5.99), (5.100) с (5.45), (5.46) и (5.54), находим:

$$F(0, \mathbf{r}; 0, \mathbf{r}) = \Xi(\mathbf{r}) \qquad F^+(0, \mathbf{r}; 0, \mathbf{r}) = \Xi^*(\mathbf{r}) \tag{5.105}$$

и так определенная $\Xi$ может рассматриваться как конденсатная волновая функция, усредненная по Гиббсу.

Уравнения “движения” для мацубаровских функций Грина сверхпроводника $G$, $F$, $F^+$ выводятся вполне аналогично выводу (5.60), (5.62), причем вместо дифференцирования по $t$ дифференцируем по $\tau$ и вместо (5.34) пользуемся ими же, но с заменой $it \to \tau$. В результате получаем уравнения:

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) G(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') + \lambda\Xi F^+(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') = \delta(\tau - \tau')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{5.106}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) F^+(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') - \lambda\Xi^* G(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') = 0 \tag{5.107}$$

После перехода к фурье – компонентам эти уравнения принимают вид:

$$(i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}))G(\varepsilon_n\mathbf{p}) + \Delta F^+(\varepsilon_n\mathbf{p}) = 1 \tag{5.108}$$

$$-(i\varepsilon_n + \xi(\mathbf{p}))F^+(\varepsilon_n\mathbf{p}) - \Delta^* G(\varepsilon_n\mathbf{p}) = 0 \tag{5.109}$$

где ввели:

$$\Delta = \lambda\Xi = \lambda F(0\mathbf{r}; 0\mathbf{r}) \qquad \Delta^* = \lambda\Xi^* = \lambda F^+(0\mathbf{r}; 0\mathbf{r}) \tag{5.110}$$

Решение системы уравнений (5.108) и (5.109) имеет вид:

$$G(\varepsilon_n\mathbf{p}) = -\frac{i\varepsilon_n + \xi(\mathbf{p})}{\varepsilon_n^2 + \xi^2(\mathbf{p}) + |\Delta|^2} = -\frac{i\varepsilon_n + \xi(\mathbf{p})}{\varepsilon_n^2 + \varepsilon^2(\mathbf{p})} \tag{5.111}$$

$$F^+(\varepsilon_n\mathbf{p}) = \frac{\Delta^*}{\varepsilon_n^2 + \xi^2(\mathbf{p}) + |\Delta|^2} = \frac{\Delta^*}{\varepsilon_n^2 + \varepsilon^2(\mathbf{p})} \tag{5.112}$$

где $\varepsilon(\mathbf{p})$ дается снова выражением (5.68):

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{\xi^2(\mathbf{p}) + |\Delta|^2} \tag{5.113}$$

В отличие от случая $T = 0$ здесь все однозначно и никакого доопределения этих функций Грина не требуется.

Уравнение, определяющее энергетическую щель, находим из:

$$\Xi^* = F^+(\tau = 0, \mathbf{r} = 0) = T\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}F^+(\varepsilon_n\mathbf{p}) \tag{5.114}$$

что после подстановки (5.112) дает:

$$1 = \frac{|\lambda|T}{(2\pi)^3}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int\frac{d^3p}{\varepsilon_n^2+\xi^2(\mathbf{p})+|\Delta|^2} = \frac{|\lambda|T}{(2\pi)^3}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int\frac{d^3p}{\varepsilon_n^2+\varepsilon^2(\mathbf{p})} \tag{5.115}$$

Суммирование по частотам опять можно выполнить с помощью (2.99), что дает уравнение для щели теории БКШ для случая конечных температур:

$$1 = \frac{|\lambda|}{2}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{\xi^2(p)+\Delta^2(T)}}th\frac{\sqrt{\xi^2(p)+\Delta^2(T)}}{2T} \tag{5.116}$$

Свойства этого уравнения хорошо известны [2, 5, 11, 21], поэтому мы не будем заниматься подробным решением (5.116), а просто отметим, что оно дает известную температурную зависимость щели $\Delta(T)$ теории БКШ. В частности, щель обращается в нуль при $T = T_c$, определяемой (5.31). Это следует из того, что при $\Delta = 0$ уравнение (5.116) сводится к:

$$1 = \frac{|\lambda| m p_F}{2\pi^2}\int_0^{\omega_D}\frac{d\xi}{\xi}th\frac{\xi}{2T} \tag{5.117}$$

которое, фактически, совпадает с уравнением, определяющим положение полюса в куперовской "лестнице" (5.30). При $T = 0$ (5.116) сводится к (5.73), так что снова получаем (5.76), (5.77) $\Delta_0 = \frac{\pi}{\gamma}T_c$.

Уравнения Горькова (5.108) и (5.109) можно переписать в виде:

$$G(\varepsilon_n\mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n-\xi(\mathbf{p})} - \frac{1}{i\varepsilon_n-\xi(\mathbf{p})}\Delta F^+(\varepsilon_n\mathbf{p}) \tag{5.118}$$

$$F^+(\varepsilon_n\mathbf{p}) = \frac{1}{-i\varepsilon_n-\xi(-\mathbf{p})}\Delta^* G(\varepsilon_n\mathbf{p}) = -\frac{1}{i\varepsilon_n+\xi(\mathbf{p})}\Delta^* G(\varepsilon_n\mathbf{p}) \tag{5.119}$$

аналогичном (5.80), (5.81) и представленном в диаграммном виде на Рис. 5.4, где теперь следует понимать $p = (\varepsilon_n, \mathbf{p})$. Итерируя (подставляя многократно (5.119) в (5.118)) получаем для нормальной функции Грина разложение в ряд теории возмущений по $\Delta$:

$$\begin{aligned} G(\varepsilon_n\mathbf{p}) = &\frac{1}{i\varepsilon_n-\xi(\mathbf{p})} + \frac{1}{i\varepsilon_n-\xi(\mathbf{p})}\frac{|\Delta|^2}{(i\varepsilon+\xi(\mathbf{p}))(i\varepsilon-\xi(\mathbf{p}))} + \\ &+\frac{1}{i\varepsilon_n-\xi(\mathbf{p})}\frac{|\Delta|^4}{(i\varepsilon_n+\xi(\mathbf{p}))^2(i\varepsilon_n-\xi(\mathbf{p}))^2} + \cdots = \\ &= \frac{i\varepsilon_n+\xi(\mathbf{p})}{(i\varepsilon_n)^2-\xi^2(\mathbf{p})-|\Delta|^2} \end{aligned} \tag{5.120}$$

показанное графически на Рис. 5.6 (a). Результат суммирования, этого ряда, естественно, совпадает с (5.111). Аналогичным образом, можно уравнение (5.118) подставлять в (5.119) "генерировать" диаграммный ряд для $F^+(\varepsilon_n\mathbf{p})$, показанный на Рис. 5.6 (b), в каждом члене которого фигурирует нечетное число линий взаимодействия с "полем" $\Delta$, и который суммируется в (5.112). Обратим внимание, что в разложении аномальной функции Грина отсутствует член нулевого порядка по взаимодействию — "свободной" аномальной функции не существует[17]. Заметим также, что аномальная функция Грина $F^+$ явно зависит от *фазы* "поля" (параметра порядка) $\Delta$.

[17]Она возникает при введении бесконечно малого "боголюбовского" источника куперовских пар в рамках идеологии квазисредних [11, 25], который действует как бесконечно слабое "поле" $\Delta$.

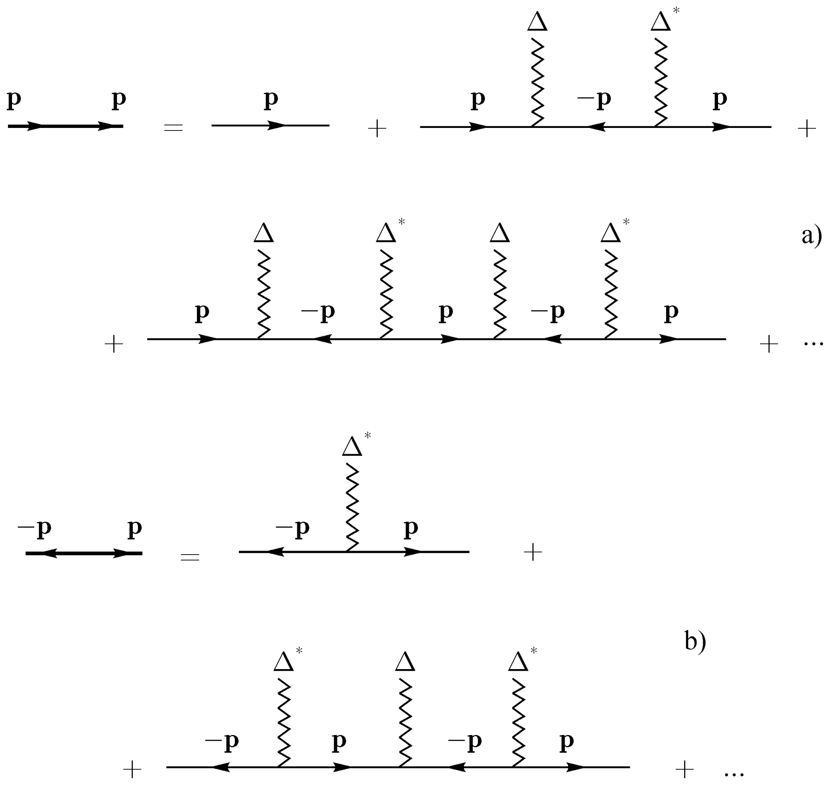



Рис. 5.6: Диаграммное разложение нормальной (a) и аномальной (b) функции Грина в ряд по степеням $\Delta$.

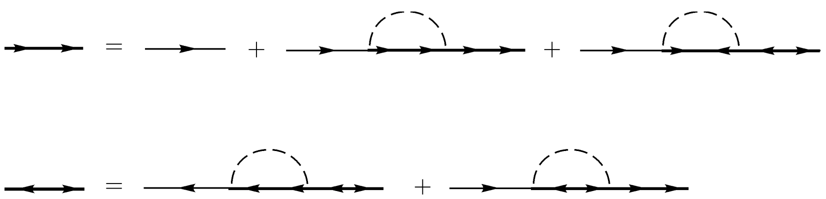


Рис. 5.7: Диаграммное представление уравнений Элиашберга. Пунктирная линия обозначает функцию Грина фонона.

Аналогично (5.82) выражения для щели (5.110) и (5.114) можно записать как:

$$\Delta = \lambda \Xi = \lambda T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} F(\varepsilon_n \mathbf{p}) \tag{5.121}$$

и изобразить графиком, показанным на Рис. 5.5 (a), так что уравнения Горькова примут вид, показанный графически на Рис. 5.5 (b).

Можно, разумеется построить и более совершенную теорию сверхпроводимости, основанную не на применении модельного спаривательного взаимодействия БКШ – Горькова (5.33), а на более "реалистической" модели электрон – фононного взаимодействия (гамильтониан Фрелиха). Эта теория строится на основе системы уравнений для нормальной и аномальной функций Грина сверхпроводника, показанной графически на Рис. 5.7. Структура этих уравнений (Г.М.Элиашберг, 1960) ясна без дальнейших пояснений. Разумеется, решение этих *интегральных* уравнений, с учетом особенностей реального спектра фононов, представляет собой весьма трудную задачу. Тем не менее, здесь был достигнут существенный прогресс (W.L.McMillan, 1968) и теория традиционных сверхпроводников, основанная на картине спаривания за счет электрон – фононного взаимодействия является примером весьма успешного применения метода функций Грина. Прекрасное изложение методов анализа уравнений Элиашберга и результатов их применения можно найти в [26].

В температурной технике также удобно использовать матричный формализм Намбу, когда в дополнение к (5.99), (5.100) и (5.102) вводится еще:

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2) = -Sp\left\{ e^{\frac{\Omega + \mu N - H}{T}} T_\tau(\bar{\psi}_\alpha(\tau_1 \mathbf{r}_1)\psi_\beta(\tau_2 \mathbf{r}_2)) \right\} \tag{5.122}$$

и матрица функций Грина:

$$\hat{G}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \begin{pmatrix} G(\varepsilon_n \mathbf{p}) & -F(\varepsilon_n \mathbf{p}) \\ -F^+(\varepsilon_n \mathbf{p}) & \tilde{G}(\varepsilon_n \mathbf{p}) \end{pmatrix} \tag{5.123}$$

которая удовлетворяет единому матричному уравнению вида:

$$\left\{ i\varepsilon_n \hat{1} - \hat{\sigma}_z \xi(\mathbf{p}) - \frac{1}{2}\left(\Delta \hat{\sigma}^+ + \Delta^* \hat{\sigma}^-\right) \right\} \hat{G}(p) = \hat{1} \tag{5.124}$$

которое содержит в себе (5.108) и (5.109) и аналогичные уравнения для $\tilde{G}$ и $F$

$$(i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}))F(\varepsilon_n \mathbf{p}) + \Delta \tilde{G}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = 0 \tag{5.125}$$

$$(i\varepsilon_n + \xi(\mathbf{p}))\tilde{G}(\varepsilon_n \mathbf{p}) + \Delta^* F(\varepsilon_n \mathbf{p}) = 1 \tag{5.126}$$

Матричная функция Грина (5.123) может быть записана как ($x = (\tau, \mathbf{r})$):

$$\hat{G}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} -< T\psi_\alpha(x_1)\bar{\psi}_\beta(x_2) > & -< T\psi_\alpha(x_1)\psi_\beta(x_2) > \\ -< T\bar{\psi}_\alpha(x_1)\bar{\psi}_\beta(x_2) > & -< T\bar{\psi}_\alpha(x_1)\psi_\beta(x_2) > \end{pmatrix} = -< T\hat{\psi}(x_1)\hat{\psi}^+(x_2) > \tag{5.127}$$

где угловые скобки обозначают усреднение по Гиббсу, а спиноры Намбу имеют вид:

$$\hat{\psi}(x_1) = \begin{pmatrix} \psi_\alpha(x_1) \\ \bar{\psi}_\beta(x_1) \end{pmatrix} \qquad \hat{\psi}^+(x_2) = (\bar{\psi}_\alpha(x_2), \psi_\beta(x_2)) \tag{5.128}$$

Возникновение матричных функций Грина типа Намбу, включающих в себя "аномальные" функции, является типичным в системах со спонтанным нарушением симметрии (претерпевающих фазовые переходы II рода) [24]. Удобством такого представления является то обстоятельство, что все диаграммы можно изображать как в теории "нормального" состояния, но при этом графическим элементам следует сопоставлять матричные функции Грина, так что реально возникают системы связанных уравнений для "нормальных" и "аномальных" функций.

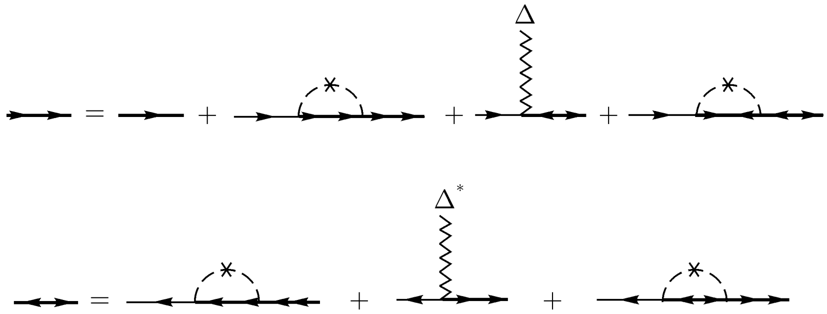



Рис. 5.8: Уравнения Горькова для сверхпроводника с примесями.

## 5.3 Сверхпроводимость в неупорядоченном металле.

Рассмотрим сверхпроводник, в котором имеются случайно распределенные в пространстве (с концентрацией $\rho$) примеси, потенциал которых (точнее его фурье – образ) есть $v(\mathbf{p})$. В принципе, эту задачу следует рассматривать также, как выше рассматривались примеси в нормальном металле. Отличие сверхпроводника в том, что в нем имеется "нормальная" и "аномальная" функции Грина. Соответственно, нужно писать систему уравнений для обеих этих функций, усредненных по хаотическим конфигурациям примесей. "Примесная" диаграммная техника имеет обычный вид, только теперь в графиках фигурируют "нулевые" (в смысле теории возмущений по примесному рассеянию) функции Грина $G$ и $F^+$. Тут, правда, есть одна тонкость — введение примесей, вообще говоря, приводит к изменению (т.е. примесной зависимости) энергетической щели (параметра порядка) $\Delta(\mathbf{r})$, $\Delta^*(\mathbf{r})$. Это обстоятельство может сильно усложнить диаграммную технику, поскольку соответствующие поправки к $\Delta$ будут определяться из интегрального уравнения, ввиду того, что $\Delta(\mathbf{r}) = \lambda F(x,x)$. Поэтому обычно предполагается *самоусредняемость* (неслучайность) сверхпроводящего параметра порядка: $< \Delta(\mathbf{r}) >= \Delta^{(0)}$ (где угловые скобки обозначают усреднение по примесям), $< \Delta^2(\mathbf{r}) > - < \Delta(\mathbf{r}) >^2 = 0$, так что все поправки от примесного рассеяния зануляются. Это предположение[18] в дальнейшем подтвердится нашим конечным результатом, из которого будет видно, что все величины типа $F(x,x)$ не меняются при добавлении (немагнитных) примесей. Поэтому диаграммная техника для рассеяния на примесях сохраняет известный нам вид — пунктирной линии с крестиком, по – прежнему, сопоставляется множитель $\rho v^2(\mathbf{q})$, а частота электронной линии в примесной вершине не меняется. Все оценки, позволяющие пренебрегать пересечением пунктирных линий остаются в силе. Уравнения для усредненных $G(p)$ и $F^+(p)$ имеют графический вид, показанный на Рис. 5.8 и понятный без дальнейших пояснений. Эту систему уравнений, пользуясь явным видом функций Грина "чистого" сверхпроводника $G^{(0)}$ и $F^{+(0)}$, который мы нашли

[18]Фактически, оно может быть оправдано в пределе слабого беспорядка $p_F l \gg 1$, $E_F\tau \gg 1$.

выше, нетрудно привести к следующему (относительно) простому виду [1][19]:

$$(i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}) - \bar{G}_\varepsilon)G(p) - (\Delta + \bar{F}_\varepsilon)F^+(p) = 1 \tag{5.130}$$

$$-(i\varepsilon_n + \xi(\mathbf{p}) - \bar{G}_{-\varepsilon})F^+(p) + (\Delta^* + \bar{F}_\varepsilon^+)G(p) = 0 \tag{5.131}$$

где:

$$\bar{G}_\varepsilon = \rho \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3}|v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2 G(p') \tag{5.132}$$

$$\bar{F}_\varepsilon^+ = \rho \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3}|v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2 F^+(p') \tag{5.133}$$

где снова подразумевается обозначение $p = (\mathbf{p}, \varepsilon_n)$.

Решение этой системы уравнений имеет вид (ниже мы увидим, что $\bar{G}_\varepsilon = -\bar{G}_{-\varepsilon}$):

$$G(p) = -\frac{i\varepsilon_n - \bar{G}_\varepsilon + \xi(\mathbf{p})}{-(i\varepsilon_n - \bar{G}_\varepsilon)^2 + \xi^2(\mathbf{p}) + |\Delta + F_\varepsilon^+|^2} \tag{5.134}$$

$$F^+(p) = -\frac{\Delta + \bar{F}_\varepsilon^+}{-(i\varepsilon_n - \bar{G}_\varepsilon)^2 + \xi^2(\mathbf{p}) + |\Delta + F_\varepsilon^+|^2} \tag{5.135}$$

Подстановка этих выражений в (5.132) и (5.133) дает два уравнения для определения $\bar{G}_\varepsilon$ и $\bar{F}_\varepsilon^+$. Как и раньше (при рассмотрении примесей в нормальном металле), собственно – энергетическая часть $\bar{G}_\varepsilon$ содержит некоторую константу, которую можно рассматривать в качестве аддитивной добавки к химпотенциалу. Этот вклад не зависит от температуры и происходит, в основном, из – за интегрирования по $d^3p'$ вдали от поверхности Ферми. Поэтому этот член, фактически, тот же самый, что и в нормальном металле:

$$\delta\mu \approx \rho \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3}|v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2 \frac{1}{\xi(\mathbf{p}')} \tag{5.136}$$

Поэтому, фактически, в (5.132) и (5.133) достаточно проинтегрировать по линеаризованному спектру (вблизи поверхности Ферми), так что (5.130) и (5.131) перепишутся как:

$$(i\tilde{\varepsilon}_n - \xi(\mathbf{p}))G(p) - \tilde{\Delta}F^+(p) = 1 \tag{5.137}$$

$$(i\tilde{\varepsilon}_n + \xi(\mathbf{p}))F^+(p) - \tilde{\Delta}^* G(p) = 0 \tag{5.138}$$

где

$$i\tilde{\varepsilon}_n = i\varepsilon_n - \bar{G}_\varepsilon = i\varepsilon_n + \rho v^2 \nu_F \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{i\tilde{\varepsilon}_n + \xi}{-(i\tilde{\varepsilon}_n)^2 + \xi^2 + \tilde{\Delta}^2} \tag{5.139}$$

$$\tilde{\Delta} = \Delta + \bar{F}_\varepsilon = \Delta + \rho v^2 \nu_F \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\tilde{\Delta}}{-(i\tilde{\varepsilon}_n)^2 + \xi^2 + \tilde{\Delta}^2} \tag{5.140}$$

где мы уже перешли к модели точечных примесей. Заметим, что вклад второго слагаемого под интегралом в (5.139) равен нулю (из – за нечетности), так что:

$$-\frac{\bar{G}_\varepsilon}{i\varepsilon_n} = \frac{\bar{F}_\varepsilon}{\Delta} \tag{5.141}$$

[19] При $\rho v(\mathbf{p})^2 \to 0$ уравнения (5.130), (5.131), естественно, переходят в (5.108) и (5.109). Нужно только учесть, что в соответствии с обозначениями [1], вместо (5.110) и (5.121) мы определяем здесь:

$$\Delta = |\lambda| F(x,x) \qquad \Delta^* = |\lambda| F^+(x,x) \tag{5.129}$$

что приводит к некоторому различию в знаках (по сравнению с (5.108) и (5.109)).

Теперь можно написать:

$$\tilde{\Delta} = \Delta + \bar{F}_\varepsilon = \Delta\eta_\varepsilon \tag{5.142}$$

$$i\tilde{\varepsilon}_n = i\varepsilon_n - \bar{G}_\varepsilon = i\varepsilon_n\eta_\varepsilon \tag{5.143}$$

где $\eta_\varepsilon$ определяется (ср. (5.139) и (5.140)) уравнением:

$$\eta_\varepsilon = 1 + \frac{\eta_\varepsilon}{2\pi\tau}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\xi}{\xi^2 + (\varepsilon_n^2 + \Delta^2)\eta_\varepsilon^2} = 1 + \frac{\eta_\varepsilon}{2\pi\tau}\frac{\pi}{\eta_\varepsilon\sqrt{\varepsilon_n^2 + \Delta^2}} \tag{5.144}$$

где учли, что $\rho v^2\nu_F = \frac{1}{2\pi\tau}$. Окончательно, имеем:

$$\eta_\varepsilon = 1 + \frac{1}{2\tau\sqrt{\varepsilon_n^2 + \Delta^2}} \tag{5.145}$$

Таким образом, усредненные по положениям примесей функции Грина сверхпроводника $G(p)$ и $F^+(p)$ получаются из соответствующих горьковских функций "чистого" сверхпроводника (5.111) и (5.112) простой заменой:

$$\{\varepsilon_n,\ \Delta\} \to \{\varepsilon_n\eta_\varepsilon,\ \Delta\eta_\varepsilon\} \tag{5.146}$$

Тогда повторяя вычисления, ведущие к (5.114), (5.115) и (5.116), можно убедиться, что величина $\eta_\varepsilon$ просто выпадает из уравнения для сверхпроводящей щели $\Delta(T)$, поскольку после перехода к переменной интегрирования $\xi$ можно сделать замену переменной $\xi \to \xi/\eta$, которая ни на чем не сказывается. Посмотрим как это получается подробнее. Замена (5.146) в (5.114) и (5.115) дает уравнение для щели следующего вида:

$$1 = \frac{|\lambda|T}{(2\pi)^3}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int d^3p\frac{\eta_\varepsilon}{\varepsilon_n^2\eta_\varepsilon^2 + \xi^2(\mathbf{p}) + |\Delta|^2\eta_\varepsilon^2} \approx |\lambda|\nu_F T\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{-\omega_D}^{\omega_D}d\xi\frac{\eta_\varepsilon}{\varepsilon_n^2\eta_\varepsilon^2 + \xi^2 + |\Delta|^2\eta_\varepsilon^2} \tag{5.147}$$

Уравнение для $T_c$ получаем, полагая в (5.147) $\Delta = 0$:

$$1 = \frac{|\lambda|T}{(2\pi)^3}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int d^3p\frac{\eta_\varepsilon}{\varepsilon_n^2\eta_\varepsilon^2 + \xi^2} \approx |\lambda|\nu_F T\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{-\omega_D}^{\omega_D}d\xi\frac{\eta_\varepsilon}{\varepsilon_n^2\eta_\varepsilon^2 + \xi^2} \tag{5.148}$$

где

$$\eta_\varepsilon = 1 + \frac{1}{2|\varepsilon_n|\tau} \tag{5.149}$$

Теперь добавим и вычтем в подинтегральном выражении $\frac{1}{\varepsilon_n^2+\xi^2}$, тогда, используя снова (2.99), переписываем уравнение для $T_c$ как:

$$\begin{aligned} 1 = |\lambda|\nu_F\int_{-\omega_D}^{\omega_D}\frac{d\xi}{2\xi}th\frac{\xi}{2T_c} + \\ +|\lambda|\nu_F\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{-\omega_D}^{\omega_D}d\xi\left\{\frac{\eta_\varepsilon}{\varepsilon_n^2\eta_\varepsilon^2 + \xi^2} - \frac{1}{\varepsilon_n^2 + \xi^2}\right\} \end{aligned} \tag{5.150}$$

Во втором интеграле (ввиду его быстрой сходимости) можно устремить $\omega_D \to \infty$. Тогда, после замены переменной интегрирования $\xi \to \xi/\eta_\varepsilon$ в первом слагаемом, оно оказывается равным второму, так что они в точности компенсируют друг друга!

В результате (5.150) сводится к уравнению (5.117), определяющему $T_c$ "чистого" сверхпроводника (5.31).

Аналогичным образом можно рассмотреть и "полное" уравнение (5.147), определяющее $\Delta(T)$ в примесном сверхпроводнике. В результате оно сведется к (5.116) для "чистого" случая.

Таким образом $T_c$ и $\Delta(T)$ сверхпроводника с "нормальными" (немагнитными) примесями вообще не зависят от наличия этих примесей в металле (А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, 1959)[20]. Мы получили этот результат в пределе слабого беспорядка $p_F l \gg 1$, $E_F\tau \gg 1$, когда можно пренебречь "перекрестными" графиками примесного рассеяния. Фактически, это утверждение имеет даже более широкую область применимости [16], пока мы предполагаем самоусредняемость сверхпроводящего параметра порядка (щели). Все это достаточно хорошо соответствует экспериментально известной *относительной* устойчивости сверхпроводящего состояния в большинстве металлов к введению не слишком большого количества немагнитных примесей (разупорядочения).

Разумеется, ввиду чрезвычайной упрощенности модели БКШ, полученный вывод является достаточно ограниченным. Например, разупорядочение ведет к росту эффективного отталкивания (за счет роста кулоновского псевдопотенциала [11, 21]) электронов, составляющих куперовскую пару, и соответствующему снижению $T_c$ [16]. Это вывод несправедлив и в рамках модели БКШ, когда речь идет о сверхпроводниках с анизотропией энергетической щели на поверхности Ферми (например для систем, в которых образуются куперовские пары в состояниях с высшими орбитальными моментами, типа случая $d$ – спаривания в высокотемпературных сверхпроводниках на основе оксидов меди). В этом случае, введение примесей, как правило, сильно подавляет сверхпроводимость [16]. Особенно ярким примером такого рода является подавление сверхпроводимости магнитными (парамагнитными) примесями (т.е. примесями, обладающими свободным нескомпенсированным спином $\mathbf{S}$) (А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, 1960). Рассмотрим кратко суть дела.

Если в сверхпроводнике имеются парамагнитные примеси, то в потенциале взаимодействия электрона с примесным атомом есть член обменного взаимодействия:

$$V(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r}) + J(\mathbf{r})(\mathbf{S}\cdot\mathbf{s}) \tag{5.151}$$

где $J(\mathbf{r})$ – соответствующий обменный интеграл, $\mathbf{S}$ – спин примеси, $\mathbf{s}=\frac{1}{2}\sigma$ – спин электрона. В этом случае, при рассмотрении диаграмм примесного рассеяния в уравнениях Горькова, показанных на Рис. 5.8, нужно аккуратно учесть спиновую структуру $G$ и $F^+$. Выше мы видели, что $G_{\alpha\beta}=G\delta_{\alpha\beta}$, $F_{\alpha\beta}=g_{\alpha\beta}F$, $F^+_{\alpha\beta}=-g_{\alpha\beta}F^+$, где $g_{\alpha\beta}=i\sigma^y_{\alpha\beta}$ (см. (5.52)). В результате оказывается, что вклады от второго слагаемого в (5.151) в примесные собственно – энергетические части в уравнениях Рис. 5.8, построенные на нормальных и аномальных функциях Горькова, *отличаются знаком*[21]. Тогда вместо *одинаковой* перенормировки $i\varepsilon_n$ и $\Delta$ типа (5.142), (5.143) и (5.145) возникают *уравнения*:

$$i\tilde{\varepsilon}_n = i\varepsilon_n + \frac{i\tilde{\varepsilon}_n}{2\tau_1\sqrt{\tilde{\varepsilon}_n^2+\tilde{\Delta}^2}} \tag{5.152}$$

$$\tilde{\Delta} = \Delta + \frac{\tilde{\Delta}}{2\tau_2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_n^2+\tilde{\Delta}^2}} \tag{5.153}$$

где

$$\frac{1}{\tau_1} = 2\pi\rho\nu_F\left(v^2+\frac{1}{4}S(S+1)J^2\right) \tag{5.154}$$

$$\frac{1}{\tau_2} = 2\pi\rho\nu_F\left(v^2-\frac{1}{4}S(S+1)J^2\right) \tag{5.155}$$

где мы приняли модель точечного потенциального и обменного рассеяния, а также усреднили по ориентациям примесных спинов, записав $<\mathbf{S}^2>=\frac{1}{3}S(S+1)$. Кроме того, мы учли, что для электронного спина $\mathbf{s}^2=\frac{1}{4}\sigma^2=\frac{3}{4}$. Разность выражений, стоящих в (5.154) и (5.155):

$$\frac{1}{\tau_1}-\frac{1}{\tau_2}=\frac{2}{\tau_s} \qquad \text{т.е.} \qquad \frac{1}{\tau_s}=\frac{\pi}{2}\pi\rho J^2\nu_F S(S+1) \tag{5.156}$$

[20]Иногда это утверждение называют теоремой Андерсона, который независимо получил такой же результат несколько иным методом [21]

[21]Это следует из $\sigma_{\alpha\gamma}\delta_{\gamma\delta}\sigma_{\delta\beta}=\sigma_{\alpha\delta}\sigma_{\delta\beta}=\sigma^2\delta_{\alpha\beta}$ и $\sigma_{\alpha\gamma}g_{\gamma\delta}\sigma_{\delta\beta}=-\sigma^2 g_{\alpha\beta}$, где $\sigma^2=3$.

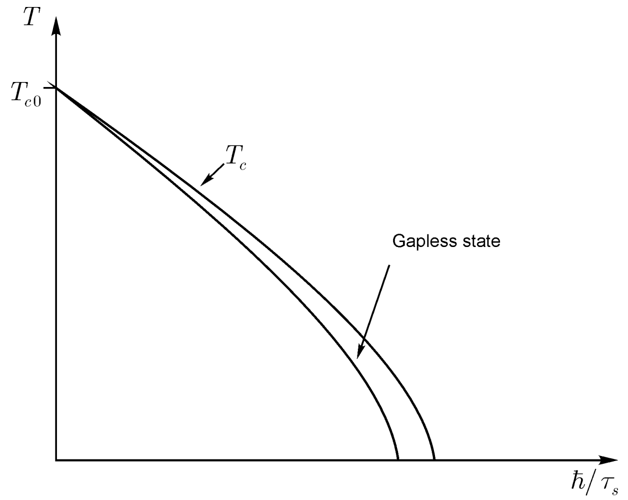



Рис. 5.9: Зависимость температуры сверхпроводящего перехода от частоты рассеяния на магнитных примесях и область существования "бесщелевой" сверхпроводимости.

определяет обратное время рассеяния (в том числе, с переворотом спина) на обменном потенциале. Хотя, фактически, всегда выполняется неравенство $\frac{1}{\tau_s} \ll \frac{1}{\tau}$, где $\tau$ – время потенциального рассеяния, именно $\tau_s$ является существенным параметром для сверхпроводимости. Последовательный анализ[22] уравнения для сверхпроводящей щели, возникающего из (5.134), (5.135) или (5.137), (5.138), с использованием (5.152), (5.153), приводит к следующим выводам. Рассеяние на магнитных примесях приводит к сильному подавлению температуры сверхпроводящего перехода, которое описывается уравнением Абрикосова – Горькова:

$$\ln\frac{T_{c0}}{T_c} = \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi T_c \tau_s}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \tag{5.157}$$

где $T_{c0}$ – температура сверхпроводящего перехода в отсутствие примесей,

$$\psi(z) = \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)} = -\ln\gamma - \frac{1}{z} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{n} - \frac{1}{n+z}\right) \tag{5.158}$$

– логарифмическая производная $\Gamma$ – функции (дигамма функция), $\ln\gamma = C = 0.577...$ – постоянная Эйлера. Характерный вид возникающей зависимости температуры перехода $T_c$ от частоты обменного рассеяния показан на Рис. 5.9. Существует критическое значения частоты рассеяния (определяющее критическую концентрацию магнитных примесей):

$$\frac{1}{\tau_s^c} = \frac{\pi T_{c0}}{2\gamma} = \frac{\Delta_0}{2} \qquad \text{где} \qquad \Delta_0 = \frac{\pi}{\gamma}T_{c0} \tag{5.159}$$

при достижении которого (с ростом концентрации магнитных примесей) сверхпроводимость исчезает ($T_c$ обращается в нуль). При слабом рассеянии (малой концентрации примесей) $\tau_s \to \infty$ и из (5.157) имеем:

$$T_c \approx T_{c0} - \frac{\pi}{4\tau_s} \tag{5.160}$$

так что происходит небольшое снижение $T_c$. Отметим, что зависимость $T_c$ от концентрации магнитных примесей, определяемая (5.157), непосредственно подтверждается на эксперименте.

Другой замечательной особенностью модели с магнитными примесями является существование на "фазовой диаграмме" Рис. 5.9 узкой области где, как показывают детальные расчеты на основе уравнений (5.137), (5.138) и (5.152), (5.153), существует так называемая *бесщелевая* сверхпроводимость. В этом состоянии $T_c$ и параметр порядка $\Delta$ остаются конечными ($\Delta$ обращается в нуль при $T = T_c$), тогда как энергетическая щель в спектре элементарных возбуждений (точнее в плотности

[22] Подробности расчетов для аналогичной задачи будут приведены в следующей Главе.

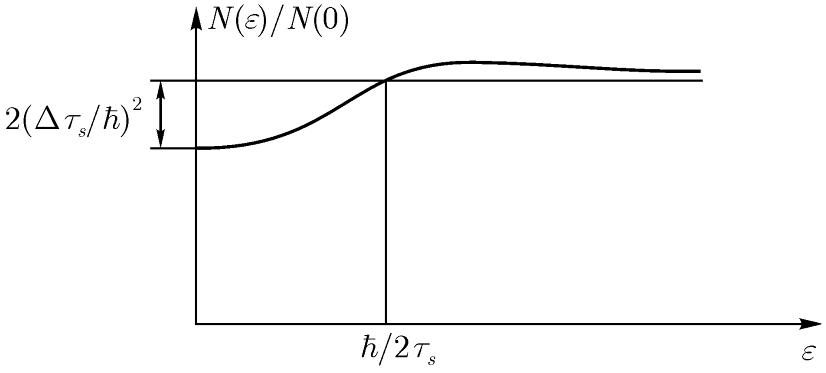



Рис. 5.10: Плотность электронных состояний в бесщелевом сверхпроводнике.

электронных состояний) отсутствует. Дело здесь в том, что при наличии примесей параметр порядка $\Delta$ уже не играет, вообще говоря, роль щели в спектре, а рассеяние на магнитных примесях эту щель "замывает", что приводит к характерному виду плотности состояний с "псевдощелью", качественно отличному от результата БКШ (5.79) и показанному на Рис. 5.10. Сверхпроводящий отклик системы при этом сохраняется.

Почему сверхпроводящее состояние устойчиво к введению нормальных примесей, но неустойчиво по отношению к примесям магнитным? Дело здесь в том, что обычное потенциальное рассеяние действует на оба электрона, составляющие куперовскую пару одинаково, потому пара и "выживает". В тоже время, магнитное рассеяние по разному действует на электроны пары, поскольку (для рассматриваемого нами синглетного спаривания) их спины направлены противоположно — происходит "распаривание", т.е. разрушение куперовских пар.

## 5.4 Разложение Гинзбурга – Ландау.

Хорошо известно значение, которое имеет в теории сверхпроводимости имеет феноменологический подход, предложенный Гинзбургом и Ландау (1950) и основанный на разложении свободной энергии по степеням параметра порядка, и позволяющий описать основные свойства сверхпроводников вблизи температуры сверхпроводящего перехода [2, 11, 21]. Покажем, как это разложение может быть выведено из микроскопической теории БКШ. Впервые это было сделано Горьковым (1959), но ниже мы используем несколько иной метод [16].

Фактически нам достаточно рассмотреть электроны в нормальном металле ($T > T_c$), распространяющиеся в случайном "поле" термодинамических флуктуаций[23] сверхпроводящего параметра порядка $\Delta_{\mathbf{q}}$, характеризуемых фиксированным (малым) волновым вектором $\mathbf{q}$. Тогда можно записать следующий гамильтониан взаимодействия электронов с этими флуктуациями[24]:

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \Delta_{\mathbf{q}} a^{+}_{\mathbf{p}_+} a^{+}_{-\mathbf{p}_-} + \Delta^{*}_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{p}_-} a_{\mathbf{p}_+} \right\} \tag{5.161}$$

где, как обычно, используется обозначение $\mathbf{p}_{+} = \mathbf{p} \pm \frac{1}{2}\mathbf{q}$.

[23] Эти флуктуации считаем статическими и достаточно "плавными" в пространстве.

[24] Этот гамильтониан можно рассматривать также как описывающий взаимодействие с случайным "источником" куперовских пар.

Рассчитаем теперь поправку к термодинамическому потенциалу (свободной энергии) системы, связанную с (5.161). Согласно [1] поправка к термодинамическому потенциалу от любого взаимодействия выражается через среднее значение мацубаровской $S$ - матрицы:

$$\Delta F = -T \ln < S > \tag{5.162}$$

где угловые скобки обозначают гиббсовское среднее, а

$$S = T_\tau \exp \left\{ -\int_0^{\frac{1}{T}} d\tau H_{int}(\tau) \right\} \tag{5.163}$$

и определяется *петлевым* разложением по связным диаграммам:

$$\Delta F = -T \{ < S >_c -1 \} \tag{5.164}$$

Диаграммы для $< S >_c -1$ имеют вид замкнутых петель и строятся по обычным правилам диаграммной техники (для данного вида взаимодействия), с тем отличием, что в $n$-м порядке теории возмущений перед каждой диаграммой (если считать отличными только топологически неэквивалентные диаграммы) появляется множитель $\frac{1}{n}$ [1].

В отсутствие внешнего магнитного поля[25] разложение Гинзбурга – Ландау (ГЛ) для разности свободных энергий сверхпроводящего и нормального состояния обычно записывается как [21]:

$$F_s - F_n = A|\Delta(\mathbf{r})|^2 + \frac{B}{2}|\Delta(\mathbf{r})|^4 + C|\nabla\Delta(\mathbf{r})|^2 \tag{5.166}$$

Если написать фурье – разложение:

$$\Delta(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{qr}} \tag{5.167}$$

и оставить только одну фурье – компоненту, то (5.166) сведется к:

$$F_s - F_n = A|\Delta_{\mathbf{q}}|^2 + \frac{B}{2}|\Delta_{\mathbf{q}}|^4 + Cq^2|\Delta_{\mathbf{q}}|^2 \tag{5.168}$$

и задача микроскопической теории сводится к вычислению коэффициентов $A$, $B$ и $C$. Из общих соображений известно только, что $A \sim T - T_c$ [2, 11, 21].

Знание коэффициентов разложения ГЛ позволяет, как известно, найти основные характеристики сверхпроводника вблизи $T_c$ [2, 11, 21]. В частности, длина когерентности $\xi(T)$ определяет характерный масштаб неоднородностей параметра порядка $\Delta$, т.е. фактически задает "размер" куперовской пары:

$$\xi^2(T) = -\frac{C}{A} \tag{5.169}$$

Глубина проникновения магнитного поля выражается через коэффициенты ГЛ как:

$$\lambda_L^2(T) = -\frac{c^2}{32\pi e^2}\frac{B}{AC} \tag{5.170}$$

[25] С учетом того, что "поле" $\Delta$ является заряженным и заряд его равен $2e$ (5.98), взаимодействие с внешним магнитным полем может быть введено с помощью стандартной замены:

$$\nabla \to \nabla \mp 2ie\mathbf{A} \tag{5.165}$$

соответственно для $\Delta$ и $\Delta^*$, где $\mathbf{A}$ — вектор – потенциал внешнего поля.

где мы "восстановили" скорость света $c$. Так называемый параметр Гинзбурга – Ландау равен:

$$\kappa = \frac{\lambda_L(T)}{\xi(T)} = \frac{c}{4eC}\sqrt{\frac{B}{2\pi}} \tag{5.171}$$

Вблизи $T_c$ верхнее критическое магнитное поле $H_{c2}$ определяется как:

$$H_{c2} = \frac{\phi_0}{2\pi\xi^2(T)} = -\frac{\phi_0}{2\pi}\frac{A}{C} \tag{5.172}$$

где $\phi_0 = \pi\hbar c/|e|$ – квант магнитного потока [2, 11]. Наконец, скачок теплоемкости в точке сверхпроводящего перехода в расчете на единицу объема есть:

$$c_s - c_n = \frac{T_c}{B}\left(\frac{A}{T-T_c}\right)^2 \tag{5.173}$$

С точностью до членов четвертого порядка имеем:

$$< S >_c - 1 = \frac{1}{2!}\int_0^{1/T} d\tau_1 \int_0^{1/T} d\tau_2 < T_\tau(H_{int}(\tau_1)H_{int}(\tau_2)) >_c + \\ + \frac{1}{4!}\int_0^{1/T} d\tau_1 ... \int_0^{1/T} d\tau_4 < T_\tau(H_{int}(\tau_1)...H_{int}(\tau_4)) >_c \tag{5.174}$$

Рассмотрим поправку второго порядка к свободной энергии (5.164):

$$\Delta F_2 = -\frac{T}{2}\int_0^{1/T} d\tau_1 \int_0^{1/T} d\tau_2 < T_\tau(H_{int}(\tau_1)H_{int}(\tau_2)) >_c \tag{5.175}$$

При вычислении этой поправки следует использовать теорему Вика, позволяющую свести среднее от входящих в нее произведений фермиевских операторов к произведениям средних от парных произведений, содержащих[26] один оператор $a$ и один оператор $a^+$. Тогда из (5.175), после соответствующих выкладок, получаем:

$$\Delta F_2 = -\frac{T}{2}\int_0^{1/T} d\tau_1 \int_0^{1/T} d\tau_2 \Delta^*_{\mathbf{q}}\Delta_{\mathbf{q}} \left\{ \sum_{\mathbf{p}} G(\mathbf{p}_+, \tau_1 - \tau_2)G(-\mathbf{p}_-, \tau_1 - \tau_2) + \right. \\ \left. + \sum_{\mathbf{p}} G(\mathbf{p}_+, \tau_2 - \tau_1)G(-\mathbf{p}_-, \tau_2 - \tau_1) \right\} = \\ = -T\int_0^{1/T} d\tau_1 \int_0^{1/T} d\tau_2 |\Delta_{\mathbf{q}}|^2 \sum_{\mathbf{p}} G(\mathbf{p}_+, \tau_1 - \tau_2)G(-\mathbf{p}_-, \tau_1 - \tau_2) \tag{5.176}$$

где

$$G(\mathbf{p}, \tau_1 - \tau_2) = - < T_\tau a_{\mathbf{p}}(\tau_1) a^+_{\mathbf{p}}(\tau_2) > \tag{5.177}$$

– функция Грина свободного электрона в $(\mathbf{p}, \tau)$ – представлении. Разлагая эту функцию Грина в ряд Фурье по $\tau$ и вычисляя интегралы, получаем:

$$\Delta F_2 = -|\Delta_{\mathbf{q}}|^2 T \sum_{\mathbf{p}}\sum_n G(\mathbf{p}_+, \varepsilon_n)G(-\mathbf{p}_-, -\varepsilon_n) \tag{5.178}$$

[26] Никаких аномальных спариваний здесь рассматривать не надо – мы рассматриваем нормальный металл, находящийся при $T > T_c$, в котором "работает" флуктуационный источник куперовских пар (5.161).

где

$$G(\mathbf{p}\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p})}, \qquad \varepsilon_n = (2n+1)\pi T \tag{5.179}$$

– стандартный вид свободной мацубаровской функции Грина электрона.

Аналогичным образом, для поправки четвертого порядка, имеем:

$$\Delta F_4 = -T\frac{1}{4!}12|\Delta_{\mathbf{q}}|^4 \int_0^{1/T} d\tau_1 ... \int_0^{1/T} d\tau_4 G(\mathbf{p}, \tau_1 - \tau_3) G(-\mathbf{p}, \tau_1 - \tau_4) \times$$
$$\times G(\mathbf{p}, \tau_2 - \tau_4) G(-\mathbf{p}, \tau_2 - \tau_3) \tag{5.180}$$

где в функциях Грина положили $q = 0$, что соответствует пренебрежению пространственными неоднородностями при вычислении коэффициента при члене четвертого порядка в разложении ГЛ. Соответственно, после тех же процедур, что и выше, получаем:

$$\Delta F_4 = \frac{T}{2}|\Delta_{\mathbf{q}}|^4 \sum_{\mathbf{p}} \sum_n G(\mathbf{p}, \varepsilon_n) G(-\mathbf{p}, -\varepsilon_n) G(\mathbf{p}, \varepsilon_n) G(-\mathbf{p}, -\varepsilon_n) \tag{5.181}$$

В итоге, с точностью до членов четвертого порядка по $\Delta_{\mathbf{q}}$, поправка к свободной энергии электронов, находящихся в поле флуктуирующих куперовских пар, имеет вид:

$$\Delta F \approx -|\Delta_{\mathbf{q}}|^2 T \sum_{\mathbf{p}} \sum_n G(\mathbf{p}_+, \varepsilon_n) G(-\mathbf{p}_-, -\varepsilon_n) + \frac{T}{2}|\Delta_{\mathbf{q}}|^4 \sum_{\mathbf{p}} \sum_n G(\mathbf{p}, \varepsilon_n)^2 G(-\mathbf{p}, -\varepsilon_n)^2 \tag{5.182}$$

Разложение ГЛ для разности свободных энергий сверхпроводника и нормального металла получится из (5.182), если мы перепишем его так, чтобы коэффициент перед $|\Delta_{\mathbf{q}}|^2$ при $q = 0$ обращался в нуль при $T = T_c$ и был отрицателен для $T < T_c$. Такое поведение легко обеспечить, если вычесть из правой части (5.182) выражение, равное поправке $\Delta F_2$ (5.178), взятой с коэффициентом при $|\Delta_{\mathbf{q}}|^2$ вычисленным для $T = T_c$ и $q = 0$. В результате, разложение ГЛ записывается в виде:

$$F_s - F_n = -|\Delta_{\mathbf{q}}|^2 T \sum_{\mathbf{p}} \sum_n G(\mathbf{p}_+, \varepsilon_n) G(-\mathbf{p}_-, -\varepsilon_n) +$$
$$+|\Delta_{\mathbf{q}}|^2 T_c \sum_{\mathbf{p}} \sum_n G(\mathbf{p}, \varepsilon_n) G(-\mathbf{p}, -\varepsilon_n)|_{T=T_c} +$$
$$+\frac{T_c}{2}|\Delta_{\mathbf{q}}|^4 \sum_{\mathbf{p}} \sum_n G(\mathbf{p}, \varepsilon_n)^2 G(-\mathbf{p}, -\varepsilon_n)^2|_{T=T_c} \tag{5.183}$$

где мы еще учли, что коэффициент $B$ при $|\Delta_{\mathbf{q}}|^4$ конечен при $T = T_c$, так что в нем (помимо пренебрежения $q$ – зависимостью) можно сразу положить $T = T_c$. С учетом уравнения БКШ для $T_c$, взятого в виде (5.115) с $\Delta = 0$, видим, что второй член в (5.183) сводится просто к $\frac{1}{|\lambda|}|\Delta_{\mathbf{q}}|^2$, так что это разложение можно переписать в следующем более компактном виде:

$$F_s - F_n = \frac{1}{|\lambda|}|\Delta_{\mathbf{q}}|^2 - |\Delta_{\mathbf{q}}|^2 T \sum_{\mathbf{p}} \sum_n G(\mathbf{p}_+, \varepsilon_n) G(-\mathbf{p}_-, -\varepsilon_n) +$$
$$+\frac{T_c}{2}|\Delta_{\mathbf{q}}|^4 \sum_{\mathbf{p}} \sum_n G(\mathbf{p}, \varepsilon_n)^2 G(-\mathbf{p}, -\varepsilon_n)^2|_{T=T_c} \tag{5.184}$$

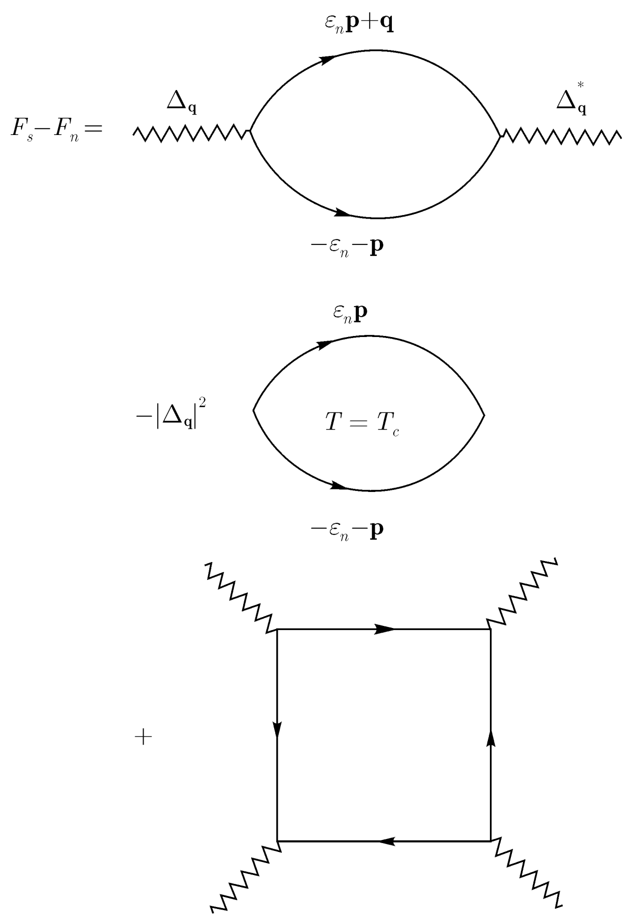



Рис. 5.11: Диаграммное представление разложения Гинзбурга – Ландау.

Графически (5.183), (5.184) можно представить диаграммами, показанными на Рис. 5.11. Вычитание второй диаграммы на этом рисунке как раз и обеспечивает правильное поведение коэффициента разложения $A$, т.е. обращение его в нуль и смену знака при $T = T_c$.

Перейдем теперь непосредственно к расчетам коэффициентов разложения ГЛ. Из (5.183) имеем для коэффициента $A$:

$$A = -T\sum_{\mathbf{p}}\sum_{n} G(\mathbf{p}\varepsilon_n)G(-\mathbf{p},-\varepsilon_n) + T_c\sum_{\mathbf{p}}\sum_{n} G(\mathbf{p}\varepsilon_n)G(-\mathbf{p},-\varepsilon_n)|_{T=T_c} =$$

$$= -T\nu_F\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \sum_n \frac{1}{\varepsilon_n^2+\xi^2} + T_c\nu_F\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \sum_n \frac{1}{\varepsilon_n^2+\xi^2}\Bigg|_{T=T_c} =$$

$$= -\nu_F\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\xi}{\xi}\left[th\frac{\xi}{2T} - th\frac{\xi}{2T_c}\right] \quad (5.185)$$

При $T \approx T_c$ имеем $\frac{1}{\xi}th\frac{\xi}{2T} \approx \frac{1}{\xi}th\frac{\xi}{2T_c} + \frac{T_c-T}{2T_c^2}\frac{1}{ch^2\frac{\xi}{2T_c}}$, так что:

$$A = -\nu_F\frac{T_c - T}{4T_c^2}\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\frac{1}{ch^2\frac{\xi}{2T_c}} = \nu_F\frac{T-T_c}{T_c} \tag{5.186}$$

При расчете коэффициента $C$ нужно разложить произведение функций Грина в первом слагаемом (5.183) в ряд по степеням $q$:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p}_+, \varepsilon_n)G(-\mathbf{p}_-, -\varepsilon_n) \approx \frac{1}{\varepsilon_n^2+\xi^2(\mathbf{p})} - \frac{(\mathbf{qp})^2}{4m^2(\varepsilon_n^2+\xi^2(\mathbf{p}))^2} - \frac{i\varepsilon_n(\mathbf{qp})}{m(\varepsilon_n^2+\xi^2(\mathbf{p}))^2} - \\ - \frac{\xi(\mathbf{p})q^2}{4m^2(\varepsilon_n^2+\xi^2(\mathbf{p}))^2} - \frac{\varepsilon_n^2-\xi^2(\mathbf{p})}{2m^2(\varepsilon_n^2+\xi^2(\mathbf{p}))^3}(\mathbf{qp})^2 \end{aligned} \tag{5.187}$$

так что

$$-T_c\sum_{\mathbf{p}}\sum_n G(\mathbf{p}_+\varepsilon_n)G(-\mathbf{p}_-, -\varepsilon_n) \approx -T_c\sum_{\mathbf{p}}\sum_n\left\{\frac{1}{\varepsilon_n^2+\xi^2(\mathbf{p})} - (\mathbf{qp})^2\frac{3\varepsilon_n^2-\xi^2(\mathbf{p})}{4m^2(\varepsilon_n^2+\xi^2(\mathbf{p}))^3}\right\} \tag{5.188}$$

и мы получаем выражение для коэффициента $C$ в виде:

$$C = T_c\nu_F\frac{1}{d}\sum_n\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\left(\frac{p}{2m}\right)^2\frac{3\varepsilon_n - \xi^2}{(\varepsilon_n^2+\xi^2(\mathbf{p}))^3} \tag{5.189}$$

где $d$ – размерность пространства. Ввиду быстрой сходимости интеграла в (5.189) основной вклад дает непосредственная окрестность уровня Ферми и мы можем положить $p \approx p_F = mv_F$. Тогда окончательно:

$$C = T_c\nu_F\frac{v_F^2}{4d}\sum_n\frac{\pi}{|\varepsilon_n|^3} = \nu_F\frac{7\zeta(3)}{16\pi^2 d}\frac{v_F^2}{T_c^2} \equiv \nu_F\xi_0^2 \tag{5.190}$$

где мы определили длину когерентности сверхпроводника $\xi_0$ [21] как:

$$\xi_0^2 = \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2 d}\frac{v_F^2}{T_c^2} \tag{5.191}$$

где $\zeta(3) \approx 1.202...$ ($\zeta(x)$ – $\zeta$ - функция Римана). В этих формулах, как и выше, введена:

$$\nu_F = \begin{cases} \frac{mp_F}{2\pi^2} & \text{для} \quad d=3 \\ \frac{m}{2\pi} & \text{для} \quad d=2 \end{cases} \tag{5.192}$$

– плотность состояний свободных электронов на поверхности Ферми для одного направления спина.

Наконец, значение коэффициента $B$ сразу же получается из диаграммы с четырьмя "хвостами" $\Delta$, показанной на Рис. 5.11:

$$\begin{aligned} B = T_c\sum_{\mathbf{p}}\sum_n G^2(\varepsilon_n\mathbf{p})G^2(-\varepsilon_n, -\mathbf{p}) = \nu_F T_c\sum_n\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\frac{1}{(\varepsilon_n^2+\xi^2(\mathbf{p}))^2} = \\ = \nu_F T_c\sum_n\frac{\pi}{2|\varepsilon_n|^3} = \nu_F\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T_c^2} \end{aligned} \tag{5.193}$$

Результаты (5.186), (5.190) и (5.193) дают стандартные выражения для коэффициентов разложения ГЛ, полученные Горьковым (1959) для "чистых" сверхпроводников. Их использование в (5.169) — (5.173) дает известные выражения для этих величин, получающиеся вблизи $T_c$ из теории БКШ. Таким образом, можно сказать, что теория Гинзбурга – Ландау получает полное микроскопическое обоснование в рамках модели БКШ. В тоже время, эта теория гораздо удобнее и проще при анализе широкого набора свойств сверхпроводников, нежели полная микроскопическая теория.

Полученные результаты допускают дальнейшие обобщения. Рассмотрим, например, так называемые "грязные" сверхпроводники с немагнитными примесями. Разложение ГЛ для этого случая получается прямым обобщением проведенных выше рассуждений. Нужно только учесть в диаграммах процессы рассеяния на примесях, что нами уже не раз делалось. Нетрудно понять, что соответствующее обобщение разложения ГЛ описывается графиками, показанными на Рис. 5.12, где введены (рассмотренные в предыдущей главе) "треугольные" вершины, учитывающие примесное рассеяние и имеется в виду, что линии гриновских функций "одеты" примесями[27]:

$$G(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}) + i\gamma\frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}}, \qquad \gamma = \frac{1}{2\tau} = \pi\rho v^2 \nu_F \tag{5.194}$$

и имеется в виду простейшая модель точечных примесей.

Некоторое отличие от рассмотрения, проводившегося в предыдущей главе, состоит в том, что здесь рассматривается "куперовский" канал и петли на Рис. 5.12 (a) определяются (в обозначениях, аналогичных использованным в предыдущей главе, и в мацубаровской технике) как:

$$\Psi(\mathbf{q}\omega_m\varepsilon_n) = -\frac{1}{2\pi i}\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} < G(\mathbf{p}_+\mathbf{p}'_+, -\varepsilon_n + \omega_m) G(-\mathbf{p}'_-, -\mathbf{p}_-, -\varepsilon_n) > \tag{5.195}$$

что показано на Рис. 5.13 (для интересующего нас случая $\omega_m = 2\varepsilon_n$). Тогда из разложения, показанного на Рис. 5.12 нетрудно получить для коэффициентов ГЛ $A$ и $C$ следующие довольно общие выражения[28]:

$$A = \frac{1}{|\lambda|} + 2\pi i T \sum_n \Psi(\mathbf{q} = 0, \omega_m = 2\varepsilon_n) \tag{5.196}$$

$$C = i\pi T \sum_n \frac{\partial^2}{\partial q^2}\Psi(\mathbf{q}, \omega_m = 2\varepsilon_n)|_{q=0, T=T_c} \tag{5.197}$$

Дело несколько упрощается в том отношении, что при наличии инвариантности по отношению к обращению времени (т.е. в отсутствие внешнего магнитного поля или магнитных примесей) мы можем (как это обсуждалось в предыдущей главе) "обратить" одну из линий в петлях на Рис. 5.12, 5.13 и убедиться, что

$$\Psi(\mathbf{q}\omega_m\varepsilon_n) = \Phi(\mathbf{q}\omega_m\varepsilon_n) \tag{5.198}$$

где $\Phi(\mathbf{q}\omega_m\varepsilon_n)$ – очевидное мацубаровское обобщение двухчастичной функции Грина (петли), столь подробно рассматривавшейся нами в предыдущей главе (ср. (4.88),

[27] В использовавшемся нами приближении "неперекрещивающихся" диаграмм, справедливом в пределе достаточно слабого беспорядка, когда $p_F l \gg 1$, $E_F\tau \gg 1$.

[28] Не останавливаясь на подробностях вычислений, укажем, что для коэффициента $B$ и для сверхпроводника с примесями, из графика Рис. 5.12 (b) по прежнему следует выражение (5.193), полученное выше для "чистого" случая [16]. Поэтому ниже мы ограничимся рассмотрением коэффициентов $A$ и $C$.

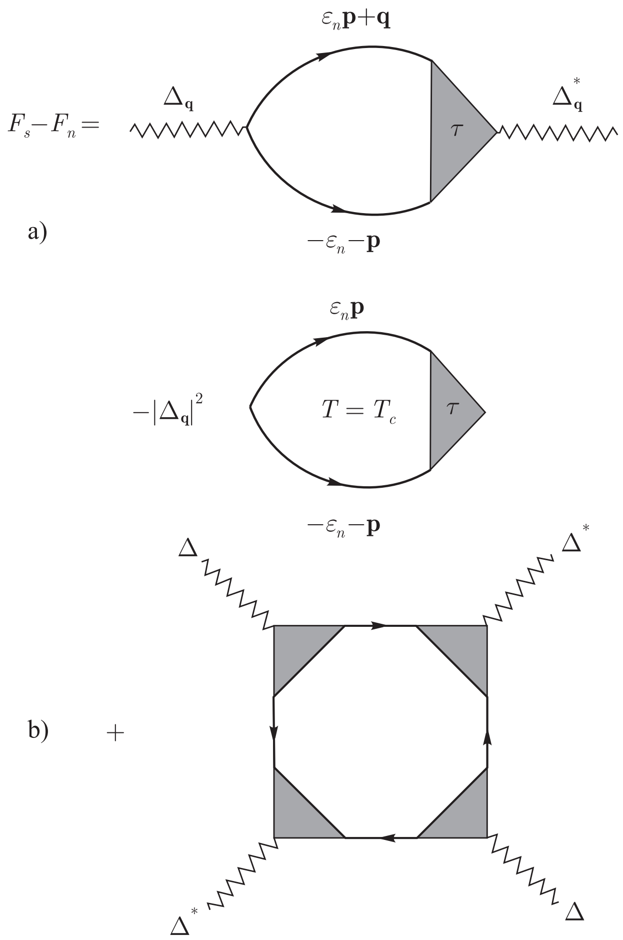



Рис. 5.12: Диаграммное представление разложения Гинзбурга – Ландау для сверхпроводника с примесями.

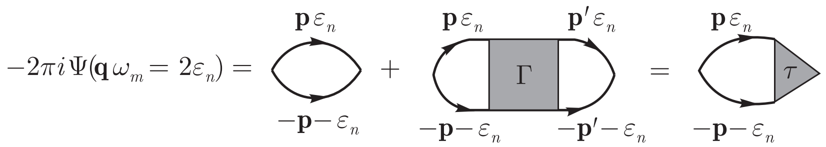



Рис. 5.13: Диаграммное представление для $\Psi(\mathbf{q}\omega_m = 2\varepsilon_n)$ в системе с примесями.

(4.274)). Поэтому расчеты нам сейчас, практически, никакие и не нужны. Коэффициенты ГЛ определяются из $\Phi(\mathbf{q}\omega_m = 2\varepsilon_n)$, вид которой легко "угадать", вспоминая соответствующие результаты предыдущей главы:

$$\Phi(\mathbf{q}\omega_m) = -\frac{\nu_F}{i|\omega_m| + iD_0q^2} \tag{5.199}$$

где $D_0 = \frac{1}{d}v_F^2\tau = \frac{1}{d}\frac{E_F}{m\gamma}$ – друдевский коэффициент диффузии, коль скоро речь идет о системе с небольшим беспорядком ($p_Fl \gg 1,\ E_F\tau \gg 1$) и можно пользоваться "лестничным" приближением для вершины $\Gamma$ примесного рассеяния[29].

Используя (5.199) и (5.198) в (5.196), находим:

$$A = \frac{1}{|\lambda|} - 2\nu_F\sum_{n\geq 0}^{n^*}\frac{1}{2n+1} = \frac{1}{|\lambda|} - \nu_F\ln\frac{2\gamma}{\pi}\frac{\omega_D}{T} =$$
$$= \nu_F\ln\frac{T}{T_c} \approx \nu_F\frac{T-T_c}{T_c} \tag{5.200}$$

где ввели обрезание (логарифмически расходящейся) суммы по $n$ на $n^* = \frac{\omega_D}{2\pi T}$. При этом у нас возникло стандартное выражение $T_c = \frac{2\gamma}{\pi}\omega_D\exp\left(-\frac{1}{|\lambda|\nu_F}\right)$ теории БКШ, так что температура перехода оказывается не зависящей от наличия примесей, в полном соответствии с рассмотрением, проведенным в предыдущем разделе ("теорема" Андерсона). Формально, вклад примесей "выпал" вместе с $D_0$ из-за того, что в (5.196) нужно положить $q = 0$.

Для коэффициента $C$, напротив, имеем из (5.197):

$$C = -i\pi T\nu_F\sum_n\frac{\partial^2}{\partial q^2}\left.\frac{1}{2i|\varepsilon_n| + iD_0q^2}\right|_{q=0} =$$
$$= \pi T\nu_F D_0\sum_n\frac{1}{2\varepsilon_n^2} = \frac{\nu_F D_0}{\pi T}\sum_{n\geq 0}\frac{1}{(2n+1)^2} = \frac{\pi}{8T}\nu_F D_0 \tag{5.201}$$

Если записать (5.201) как:

$$C \equiv \nu_F\xi^2 = \frac{\pi}{8T_c}D_0 = \frac{\pi}{8T_c}\frac{1}{3}v_F^2\tau = \frac{\pi}{24}\frac{v_F}{T_c}v_F\tau = \frac{\pi}{24}\frac{v_F}{T_c}l = 0.13\frac{v_F}{T_c}l \tag{5.202}$$

где $l = v_F\tau$ – длина свободного пробега, то, с учетом следующего из (5.191) (для $d = 3$) результата БКШ $\xi_0 = 0.18\frac{v_F}{T_c}$, немедленно получаем основной результат теории "грязных" сверхпроводников для длины когерентности (Л.П.Горьков, 1959):

$$\xi^2 \approx \xi_0 l \qquad \text{или} \qquad \xi \approx \sqrt{\xi_0 l} \tag{5.203}$$

Таким образом эффективный размер куперовских пар в "грязном пределе", когда $l \ll \xi_0$, уменьшается по сравнению с "чистым" случаем. Согласно (5.172) это, например, означает, что разупорядочение (введение примесей), при неизменном значении $T_c$, может привести к заметному росту верхнего критического поля $H_{c2}$, так что сверхпроводники (иногда[30]) полезно разупорядочивать!

---

[29] На самом деле, выражение (5.199) "работает" и в рамках самосогласованной теории локализации [16], только $D_0 \to D(|\omega_m|)$, т.е. заменяется на соответствующий обобщенный коэффициент диффузии.

[30] Конечно, мы сильно упрощаем реальную ситуацию. Например, как уже отмечалось выше, $T_c$ может существенно зависеть от беспорядка [16].

Использование (5.202), (5.203) в (5.172) позволяет получить замечательное соотношение Горькова, связывающее производную (наклон кривой температурной зависимости) верхнего критического поля $H_{c2}$ (вблизи $T_c$) с проводимостью системы $\sigma = \frac{ne^2}{m}\tau = 2e^2\nu_F D_0$ и плотностью состояний $\nu_F$:

$$-\frac{\sigma}{\nu_F}\left(\frac{dH_{c2}}{dT}\right)_{T_c} = \frac{8e^2}{\pi^2\hbar}\phi_0 \tag{5.204}$$

где $\phi_0 = \frac{\pi c\hbar}{e}$ – квант потока. Справа в (5.204) стоят фундаментальные константы, а слева — наблюдаемые величины. В частности, рост беспорядка (концентрации примесей), в первом приближении, не очень сильно меняет $\nu_F$, тогда как проводимость линейно падает с ростом концентрации примесей (а сопротивление растет!)[31]. Тогда из (5.204) следует линейный рост наклона кривой температурной зависимости $H_{c2}$ (вблизи $T_c$) с ростом беспорядка. Это довольно хорошо соответствует эксперименту на традиционных сверхпроводниках.

Проведенное выше рассмотрение "грязных" сверхпроводников относится к не очень сильно разупорядоченным системам. В силу того, что типичные значения длины когерентности $\xi_0 \sim \frac{v_F}{T_c}$ в обычных сверхпроводниках на несколько порядков превышают межатомное расстояние $a$, в них не составляет труда удовлетворить условие "грязного" предела $l \ll \xi_0$ при относительно больших длинах пробега $l \gg a$ (соответствующих слабому беспорядку в смысле использовавшегося выше критерия $p_F l \gg 1$). Возникает интересный вопрос о том, как изменятся эти результаты при дальнейшем уменьшении длины свободного пробега (росте беспорядка), вплоть до $l \sim a$, когда, как мы видели в предыдущей главе, в системе может произойти андерсоновский переход металл – диэлектрик [16]. Фактически, мы понимаем, что выражение для двухчастичной функции Грина типа (5.199) сохраняет свой вид, только друдевский коэффициент диффузии заменяется на обобщенный $D_0 \to D(|\omega_m|)$, который определяется обобщенным (для случая мацубаровских частот) уравнением самосогласованной теории локализации типа (4.255), которое (для $d = 3$) имеет вид [16]:

$$\frac{D_E(\omega_m)}{D_0} = 1 - \frac{\lambda}{\lambda_c} + \frac{\pi}{2}\frac{\lambda}{\lambda_c}\left[\frac{D_0}{D_E(\omega_m)}\frac{\omega_m}{2\gamma}\right]^{1/2} \tag{5.205}$$

где все обозначения те же, что и при нашем обсуждении этой теории в предыдущей главе[32]. Аналогично (4.262) и с достаточной для наших целей точностью, решение (5.205) можно записать в виде:

$$D_E(\omega_m) \approx Max\left\{D_E\frac{\omega_m}{\omega_m + 3D_E\omega_0^2(E)/v_F^2};\quad D_0\left(\frac{\omega_m}{2\gamma}\right)^{1/3}\right\} \tag{5.206}$$

где $D_E = \frac{D_0}{p_F\xi_{loc}(E)}$ – перенормированный коэффициент диффузии (обращающийся в нуль на пороге подвижности), а $\omega_0$ – характерная частота, определенная в (4.219).

Тогда оказывается, что коэффициенты разложения ГЛ $A$ и $B$, по прежнему, сохраняют вид (5.200) и (5.193), а коэффициент $C$ существенно меняется. При его вычислении в окрестности андерсоновского перехода решающую роль приобретает частотная дисперсия обобщенного коэффициента диффузии (4.263), определяемая (в мацубаровском формализме) вторым выражением в фигурных скобках (5.206).

В металлической области, не слишком близко к порогу подвижности $D_E(\omega_m) = D_E$, и коэффициент $C$ определяется как:

$$C = -i\pi T\nu_F\sum_{\varepsilon_n}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\left.\frac{1}{2i|\varepsilon_n| + iD_Eq^2}\right|_{q=0} =$$
$$= \pi T\nu_F D_E\sum_{\varepsilon_n}\frac{1}{2\varepsilon_n^2} = \frac{\nu_F D_E}{\pi T}\sum_{n\geq 0}\frac{1}{(2n+1)^2} = \frac{\pi}{8T}\nu_F D_E \tag{5.207}$$

В диэлектрической области, но тоже не слишком близко к порогу подвижности, согласно (5.206)):

$$D_E(\omega_m) = D_E\frac{\omega_m}{\omega_m + 3D_E\omega_0^2/v_F^2} \tag{5.208}$$

[31]При интересующих нас достаточно низких температурах, можно ограничиться рассмотрением только остаточного сопротивления.

[32]В частности, для краткости, вместо $E_F$ используем обозначение $E$.

и мы получаем ($R_{loc}$ – радиус локализации, определяемый из (4.219)):

$$
\begin{aligned}
C = \frac{\pi}{2}T\nu_F \sum_{\varepsilon_n} \frac{1}{\varepsilon_n^2} D_E(2|\varepsilon_n|) \\
= \frac{\nu_F D_E}{2\pi T} \sum_n \frac{1}{(2n+1)^2 + (2n+1)3D_E\omega_0^2/2\pi T v_F^2} \\
= \frac{\nu_F v_F^2}{3\omega_0^2}\left[\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{3D_E\omega_0^2}{4\pi T v_F^2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right)\right] \\
= \nu_F R_{loc}^2 \left[\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{D_E}{4\pi T R_{loc}^2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right)\right] \\
\approx \nu_F R_{loc}^2 \ln \frac{1.78 D_E}{\pi T R_{loc}^2}
\end{aligned}
\tag{5.209}
$$

где приближенное равенство справедливо, покуда $D_E R_{loc}^{-2} \gg 4\pi T$.

В непосредственной окрестности порога подвижности, как в металлической, так и в диэлектрической области, можем написать (ср. (5.206)):

$$
D_E(\omega_m) \approx D_0(\omega_m \tau)^{1/3} \approx (D_0 l)^{2/3}\omega_m^{1/3} \tag{5.210}
$$

так что

$$
\begin{aligned}
C = \frac{\pi}{2}T\nu_F \sum_{\varepsilon_n} \frac{1}{\varepsilon_n^2} D_E(2|\varepsilon_n|) \sim (D_0 l)^{2/3} T\nu_F \sum_{\varepsilon_n} \frac{1}{|\varepsilon_n|^{5/3}} \sim \\
\sim \left(\frac{D_0 l}{T}\right)^{2/3} \nu_F \sum_{n \geq 0} \frac{1}{(2n+1)^{5/3}} \sim \\
\sim \zeta\left(\frac{5}{3}\right)\nu_F\left(\frac{D_0 l}{T}\right)^{2/3}
\end{aligned}
\tag{5.211}
$$

Выражение (5.211) доминирует, по сравнению с (5.207), в области параметров, когда выполняется неравенство:

$$
D_E/T_c \approx D_0 l/\xi_{loc} T_c \leq D_0^{2/3}(l/T_c)^{2/3} \tag{5.212}
$$

В результате получаем следующее поведение коэффициента $C$ во всей области изменения параметров от металла к андерсоновскому диэлектрику (Л.Н.Булаевский, М.В.Садовский, 1984):

$$
C \equiv \nu_F \xi^2 \approx \nu_F \begin{cases} \frac{\pi}{8T_c} D_E & \text{для} \quad \xi_{loc}(E) < (\xi_0 l^2)^{1/3} \quad \text{при} \quad E > E_c \\ \left(\frac{D_0 l}{T_c}\right)^{2/3} \approx (\xi_0 l^2)^{2/3} & \text{для} \quad \xi_{loc}(E) > (\xi_0 l^2)^{1/3} \quad \text{при} \quad E \sim E_c \\ R_{loc}^2(E) ln \frac{1.78 D_E}{\pi T_c R_{loc}^2(E)} & \text{для} \quad R_{loc}(E) < (\xi_0 l^2)^{1/3} \quad \text{при} \quad E < E_c \end{cases} \tag{5.213}
$$

где, как и выше, $\xi_0 = 0.18 v_F/T_c$, $l$ – друдевская длина пробега.

В металлической фазе, по мере того, как энергия Ферми приближается к порогу подвижности $E_c$, корреляционная длина теории локализации (4.248) $\xi_{loc}$ увеличивается и коэффициент $C$ сначала уменьшается вместе с обобщенным коэффициентом диффузии $D_E$, т.е. с уменьшением проводимости системы в нормальном состоянии. Однако, в окрестности перехода Андерсона, в то время как $\sigma \to 0$, падение коэффициента $C$ прекращается и он остается конечным даже в области $E < E_c$, т.е. в андерсоновском диэлектрике. С дальнейшим понижением $E$ в область локализованных состояний (или ростом $E_c$ с ростом беспорядка) коэффициент $C$ определяется радиусом локализации $R_{loc}$, который уменьшается с дальнейшим движением $E$ вглубь области локализации.

Конечность ГЛ коэффициента $C$ в окрестности перехода Андерсона означает, что в этой области сохраняется сверхпроводящий (мейсснеровский) отклик системы. Соответственно, в принципе, при $T < T_c$ система может перейти из состояния андерсоновского диэлектрика в сверхпроводящее состояние (Л.Н.Булаевский, М.В.Садовский, 1984). Разумеется, рассмотрения на основе разложения ГЛ и простейшей модели спаривательного взаимодействия типа БКШ недостаточно для того, чтобы убедиться даже в принципиальной возможности столь экзотического поведения системы в условиях сильного разупорядочения. В частности, все рассмотрение основывалось на картине независимости $T_c$ от степени разупорядочения ("теорема" Андерсона). Выше уже отмечалось, что такое утверждение сохраняет силу и для достаточно сильно разупорядоченной системы, вплоть до перехода Андерсона, в пренебрежении влияния разупорядочения на само спаривательное взаимодействие. В действительности, при росте беспорядка неизбежно происходит рост эффективного кулоновского отталкивания электронов, образующих куперовскую пару [16]. Поэтому, при более или менее типичных параметрах сверхпроводников, температура перехода $T_c$ подавляется беспорядком задолго до перехода Андерсона. Тем не менее, при соблюдении достаточно жестких условий (например достаточно высокой исходной $T_c$ в системе без беспорядка) можно надеяться на сохранение конечных $T_c$ вплоть до непосредственной окрестности андерсоновского перехода (или даже в диэлектрической фазе) [16]. Именно для таких систем и представляют интерес приведенные выше формулы и оценки. К сожалению, в рамках данных лекций у нас нет времени и места для более подробного обсуждения этих интересных возможностей. Дальнейшие подробности, также как и обсуждение ряда экспериментально изучавшихся систем такого типа можно найти в [16].

Удобно переписать (5.213), используя связь между проводимостью и обобщенным коэффициента диффузии (типа (4.176)) и полученные выше формулы (4.234) и (4.237). Тогда пользуясь определением характерной длины $\xi$ из (5.213) можно легко получить следующее выражение для температурно зависящей длины когерентности $\xi(T)$ [21] неупорядоченного сверхпроводника:

$$\xi^2(T) = \frac{T_c}{T_c - T}\begin{cases} \xi_0 l \frac{\sigma}{\sigma+\sigma_c} & \sigma > \sigma^\star \quad (E > E_c) \\ (\xi_0 l^2)^{2/3} & \sigma < \sigma^\star \quad (E \sim E_c) \end{cases} \tag{5.214}$$

где, в соответствии с (4.234) $\sigma_c = e^2 p_F/(\pi^3\hbar^2)$, а характерный масштаб проводимости $\sigma^\star$ определяется как:

$$\sigma^\star \approx \sigma_c (p_F\xi_0)^{-1/3} \approx \sigma_c \left(\frac{T_c}{E}\right)^{1/3} \tag{5.215}$$

Таким образом, в области очень малых проводимостей $\sigma < \sigma^\star$ масштаб длины когерентности $\xi(T)$ определяется не $\xi \sim \sqrt{\xi_0 l}$, как в обычной теории "грязных" сверхпроводников, рассмотренной выше, а новой характерной длиной $\xi \sim (\xi_0 l^2)^{1/3} \sim (\xi_0/p_F^2)^{1/3}$, которая определяет характерный размер куперовских пар в сверхпроводнике, находящемся в окрестности перехода Андерсона (Л.Н.Булаевский, М.В.Садовский, 1984).

Плотность сверхпроводящих электронов $n_s$ в теории ГЛ может быть определена как [21]:

$$n_s(T) = 8mC\Delta^2(T) = 8mC(-A)/B \tag{5.216}$$

Вблизи перехода Андерсона эту величину можно оценить как:

$$n_s \sim mN(E)\xi^2\Delta^2 \sim mp_F(\xi_0/p_F^2)^{2/3}\Delta^2 \sim n(T_c^{1/2}/E_F^2)^{2/3}(T_c - T) \tag{5.217}$$

где $n \sim p_F^3$ – полная плотность электронов. Если взять здесь $T \sim 0.5\ T_c$, то получим простую оценку:

$$n_s \sim n\left(\frac{T_c}{E_F}\right)^{4/3} \tag{5.218}$$

что, по порядку величины, справедливо вплоть до $T = 0$. Отсюда видно, что только небольшая часть электронов в сильно неупорядоченном сверхпроводнике остается сверхпроводящей. Тем не менее, это подтверждает саму возможность сверхпроводимости в окрестности андерсоновского перехода металл – диэлектрик.

Величина проводимости $\sigma^\star$, определенная в (5.215), задает характерный масштаб проводимости, начиная с которого проявляются эффекты влияния локализации на сверхпроводящие свойства. Если $\sigma_c$ порядка "минимальной металлической проводимости" по Мотту [22], то величина $\sigma^\star$ еще меньше. Однако, для сверхпроводника с достаточно небольшими куперовскими парами (что характерно для сверхпроводников с сильной связью и высокотемпературных сверхпроводников) $\sigma^\star$ более или менее порядка $\sigma_c$. Экспериментально эту проводимость можно определить как тот масштаб проводимости, при котором (с дальнейшим ростом беспорядка) начинают проявляться существенные отклонения от предсказаний стандартной теории "грязных" сверхпроводников.

Прямую информацию о величине длины когерентности $\xi^2(T)$ можно получить из измерений верхнего критического поля (5.172). В частности, нетрудно убедиться, что использование (5.213) и (5.214) приводит к следующему обобщению соотношения Горькова (5.204) (Л.Н.Булаевский, М.В.Садовский, 1984):

$$-\frac{\sigma}{\nu_F}\left(\frac{dH_{c2}}{dT}\right)_{T_c} \approx \begin{cases} \frac{8e^2}{\pi^2\hbar}\phi_0 & \sigma > \sigma^\star \\ \phi_0 \frac{\sigma}{\nu_F(\xi_0 l^2)^{2/3}T_c} \approx \phi_0 \frac{\sigma}{[\nu_F T_c]^{1/3}} & \sigma < \sigma^\star \end{cases} \tag{5.219}$$

Видим, что для $\sigma < \sigma^\star$, т.е. вблизи андерсоновского перехода металл – диэлектрик, стандартное соотношение (5.204) становится несправедливым и (в предположении достаточно слабого изменения $\nu_F$ и $T_c$ с ростом беспорядка) обычный рост производной $(dH_{c2}/dT)_{T_c}$ (наклона кривой $H_{c2}(T)$) с ростом беспорядка выходит на "насыщение", так что этот наклон становится не зависящим от величины электросопротивления системы в нормальном состоянии. Качественно, такое поведение наклона верхнего критического поля наблюдается в целом ряде сильно разупорядоченных сверхпроводников [16].

## 5.5 Электромагнитные свойства сверхпроводников.

В этом разделе мы рассмотрим микроскопическую теорию отклика сверхпроводников на внешнее электромагнитное поле, с целью понять их принципиальное отличие от нормальных металлов.

Начнем с общей постановки задачи [5]. Рассмотри односвязный массивный сверхпроводник единичного объема в слабом внешнем электромагнитном поле, описываемом векторным и скалярным потенциалами $\mathbf{A}(\mathbf{r}t)$ и $\varphi(\mathbf{r}t)$, вместе образующими 4-вектор $(x = (\mathbf{r}, t))$:

$$A_\mu(x) = \begin{cases} A_i(x) & \text{для} \quad \mu = i = 1,2,3 \\ c\varphi(x) & \text{для} \quad \mu = 0 \end{cases} \tag{5.220}$$

где мы снова "восстановили" скорость света $c$. В первом порядке по $A_\mu$ взаимодействие электронов с электромагнитным полем дается следующим выражением:

$$H^p = -\frac{1}{c}\int d^3r j^p_\mu(x) A_\mu(x) = -\frac{1}{c}\int d^3r [\mathbf{j}^p(x)\mathbf{A}(x) - \rho_e(x) c\varphi(x)] \tag{5.221}$$

Это гамильтониан взаимодействия с "парамагнитным" 4-вектором (плотности) тока, имеющим вид:

$$j^p_\mu(x) = \begin{cases} \mathbf{j}^p(x) = \frac{e}{2m} i\{\psi^+(x)\nabla\psi(x) - [\nabla\psi^+(x)]\psi(x)\}, & \mu = i = 1,2,3 \\ \rho_e(x) = -e\psi^+(x)\psi(x) = -\rho(x), & \mu = 0 \end{cases} \tag{5.222}$$

Полная плотность тока $j_\mu(x)$ в присутствии вектор – потенциала $\mathbf{A}$ электромагнитного поля является, как мы уже отмечали выше, суммой парамагнитной и "диамагнитной" частей:

$$j_\mu(x) = j^p_\mu(x) + j^d_\mu(x) \tag{5.223}$$

где плотность диамагнитного тока дается выражением:

$$j^d_\mu(x) = \begin{cases} \frac{e}{mc}\rho_e(x)\mathbf{A}(x) & \text{для} \quad \mu = i = 1,2,3 \\ 0 & \text{для} \quad \mu = 0 \end{cases} \tag{5.224}$$

Соответственно, полное взаимодействие электронов с внешним электромагнитным полем имеет вид:

$$H_{int} = H^p + H^d \tag{5.225}$$

где диамагнитная часть взаимодействия определяется выражением:

$$H^d = -\frac{e}{2mc^2}\int d^3r \rho_e(x)\mathbf{A}^2(x) \tag{5.226}$$

Теперь мы можем воспользоваться представлением взаимодействия по $H_{int}$ (предполагая, что $A_\mu \to 0$ при $t \to -\infty$), что определит следующее изменение основного состояния системы со временем [1]:

$$|\Phi(t)> = T\exp\left\{-i\int_{-\infty}^{t} dt' H_{int}(t')\right\}|0> \equiv U(t,-\infty)|0> \tag{5.227}$$

Тогда величина плотности тока в состоянии $|\Phi(t)>$ дается выражением:

$$J_\mu(x) = <\Phi(t)|j_\mu(\mathbf{r}t)|\Phi(t)> = <0|U^+(t,-\infty) j_\mu(\mathbf{r}t) U(t,-\infty)|0> \tag{5.228}$$

Нас интересуют в $J_\mu(x)$ члены первого порядка по $A_\mu$, и после прямых вычислений мы получаем:

$$J_\mu(x) = \frac{e}{mc} < 0|\rho_e(x)|0 > A_\mu(x)[1-\delta_{\mu 0}] - i < 0|[j^p_\mu(\mathbf{r}t), \int_{-\infty}^{\infty} dt' H_{int}(t')]|0 > \quad (5.229)$$

Все члены нулевого порядка в $J_\mu(x)$ равны нулю, кроме $< j_0(x) >$ – средней плотности заряда, но она нас не интересует и потому опущена. Используя (5.221) — (5.226), находим, что линейный отклик системы $J_\mu$ и внешний потенциал $A_\mu$ связаны следующим нелокальным соотношением с помощью интегрального ядра $K_{\mu\nu}$:

$$J_\mu(x) = -\frac{c}{4\pi}\int K_{\mu\nu}(\mathbf{r}t;\mathbf{r}'t')A_\nu(\mathbf{r}'t')d^3r'dt' \quad (5.230)$$

где интеграл по времени берется в бесконечных пределах, а ядро:

$$K_{\mu\nu}(x,x') = -\frac{4\pi i}{c^2} < 0|[j^p_\mu(x), j^p_\nu(x')]|0 > \theta(t-t') - \frac{4\pi e}{mc^2} < 0|\rho_e(x)|0 > \delta(x-x')\delta_{\mu\nu}[1-\delta_{\nu 0}] \quad (5.231)$$

Если система трансляционно инвариантна, то $K_{\mu\nu}$ зависит лишь от разности координат и удобно перейти к фурье – представлению:

$$K_{\mu\nu}(\mathbf{q}, t-t') = \int K_{\mu\nu}(x,x')e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}d^3rd^3r' =$$

$$= -\frac{4\pi i}{c^2} < 0|[j^p_\mu(\mathbf{q}t), j^p_\nu(-\mathbf{q}t')]|0 > \theta(t-t') + \frac{4\pi ne^2}{mc^2}\delta(t-t')\delta_{\mu\nu}(1-\delta_{\nu 0}) \quad (5.232)$$

где $n$ – полная плотность электронов. Поскольку второй член в (5.232) (диамагнитный отклик) известен точно, то фактически нужно вычислить только парамагнитный вклад (первое слагаемое):

$$R_{\mu\nu}(\mathbf{q}t) = -i < 0|[j^p_\mu(\mathbf{q}t), j^p_\nu(-\mathbf{q}0)]|0 > \theta(t) \quad (5.233)$$

Эту величину можно найти с помощью $T$ – упорядоченной функции Грина вида[33]:

$$P_{\mu\nu}(\mathbf{q}t) = -i < 0|Tj^p_\mu(\mathbf{q}t)j^p_\nu(-\mathbf{q}0)|0 > \quad (5.234)$$

Сравнивая спектральные представления для временных фурье – образов (5.233) и (5.234) [1], нетрудно убедиться, что действительные части $R_{\mu\nu}$ и $P_{\mu\nu}$ совпадают, а мнимые части отличаются знаком при $\omega < 0$:

$$ReP_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega) = ReR_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega) \quad (5.235)$$

$$ImP_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega) = sign\omega ImR_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega) \quad (5.236)$$

что и дает нужное нам выражение $R_{\mu\nu}$ через $P_{\mu\nu}$. Поскольку ядро $K_{\mu\nu}$ включает только характеристики системы в отсутствие вектор – потенциала $A_\mu$, операторы $j_\mu$ и $j^p_\mu$ совпадают, и мы опускаем далее индекс $p$.

В итоге, отклик системы на приложенный слабый внешний вектор – потенциал $A_\mu(q) = [\mathbf{A}(q), c\varphi(q)]$ (где $q = [\mathbf{q}, \omega]$) имеет вид:

$$J_\mu(q) = -\frac{c}{4\pi}K_{\mu\nu}(q)A_\nu(q) = -\frac{c}{4\pi}\left[\sum_{i=1}^{3}K_{\mu i}(q)A_i(q) - K_{\mu 0}(q)c\varphi(q)\right] \quad (5.237)$$

[33] Аналогичная функция Грина рассматривалась нами (в мацубаровской) технике в (4.108).

где:

$$K_{\mu\nu}(q) = \frac{4\pi}{c^2}R_{\mu\nu}(q) + \frac{1}{\lambda_L^2}\delta_{\mu\nu}[1-\delta_{\nu 0}] \tag{5.238}$$

причем здесь $\lambda_L^2 = \frac{mc^2}{4\pi ne^2}$ – квадрат лондоновской глубины проникновения при температуре $T = 0$. Два слагаемых в (5.238) отражают вклад парамагнитного и диамагнитного токов.

В дальнейшем мы будем использовать следующее сокращенное обозначение:

$$Q_{\alpha\beta}(q) = -\frac{c}{4\pi}K_{\alpha\beta}(q) \tag{5.239}$$

Рассмотрим сначала идеальный ферми – газ (нормальный металл) [3]. Найдем отклик (ток $\mathbf{j}$), возникающий в результате действия пространственно – неоднородного, но статического, вектор – потенциала[34] $\mathbf{A}$. В импульсном представлении, линейное соотношение между $\mathbf{j}$ и $\mathbf{A}$ записывается как:

$$\mathbf{j_q} = \hat{Q}(\mathbf{q})\mathbf{A_q} \tag{5.240}$$

В предыдущей главе мы уже отмечали, что статический вектор – потенциал не приводит к возникновению электрического тока в нормальном металле (или идеальном ферми – газе) в длинноволновом пределе. Это означает, что $\hat{Q}(\mathbf{q}=0) = 0$, так что при $\mathbf{q} = 0$ происходит полное сокращение диамагнитной и парамагнитной составляющих в (5.238). В тоже время, при $\mathbf{q} \to 0$, но $\omega = 0$, в отклике все же остается малый вклад, описывающий слабый диамагнетизм Ландау. Рассмотрим эту ситуацию подробнее. Вычисления проведем сразу для случая конечных температур, пользуясь мацубаровской техникой. Из рассмотрения, проведенного в предыдущей главе, в связи с (4.108) — (4.120), с очевидными переобозначениями ясно, что для идеального ферми – газа парамагнитное ядро[35]:

$$Q^p_{\alpha\beta}(\mathbf{q}=0) = -\lim_{\tau\to 0} 2\frac{e^2}{m^2c}T\sum_n e^{i\varepsilon_n\tau}\int\frac{p_\alpha p_\beta}{(i\varepsilon_n-\xi(\mathbf{p}))(i\varepsilon_n-\xi(\mathbf{p}))}\frac{d^3p}{(2\pi)^3} \tag{5.241}$$

Воспользуемся очевидным соотношением, справедливым для свободной функции Грина:

$$\mathbf{p}G_0^2(\varepsilon_n\mathbf{p}) = m\nabla_{\mathbf{p}}G_0(\varepsilon_n\mathbf{p}) \tag{5.242}$$

и представим (5.241) в виде:

$$Q^p_{\alpha\beta}(0) = -\frac{e^2}{mc}2T\sum_n\int p_\alpha\nabla_{p_\beta}G_0(\varepsilon_n\mathbf{p})\frac{d^3p}{(2\pi^3)} \tag{5.243}$$

Интеграл по $d^3p$ можно посчитать по частям, перенося действие $\nabla_{p_\beta}$ на $p_\alpha$, так что:

$$Q^p_{\alpha\beta}(0) = \frac{e^2}{mc}\delta_{\alpha\beta}2T\sum_n\int G_0(\varepsilon_n\mathbf{p})\frac{d^3p}{(2\pi)^3} = \frac{ne^2}{mc}\delta_{\alpha\beta} \tag{5.244}$$

что полностью сокращает диамагнитную часть (5.238).

---

[34] Подразумевается калибровка: $div\mathbf{A} = 0, \quad \varphi = 0$

[35] Для металла с примесями все делается точно так же, только нужно учитывать конечное затухание в знаменателях функций Грина за счет рассеяния на примесях. Вершинные поправки от примесного рассеяния к токовым вершинам в модели точечных примесей обращаются в нуль при интегрировании по углам.

Посмотрим теперь случай $\mathbf{q} \neq 0$. Разложение $\hat{Q}(\mathbf{q})$ в ряд по $\mathbf{q}$ начинается с члена второй степени: $Q(\mathbf{q}) = aq^2 + O(q^4)$, в чем можно убедиться непосредственно, проводя такое разложение в диаграмме, показанной на Рис. 5.14. Тогда имеем:

$$\mathbf{j} = \hat{Q}\mathbf{A} = -a\nabla^2\mathbf{A} \tag{5.245}$$

С другой стороны, как известно из электродинамики, ток может быть связан с намагниченностью системы соотношением:

$$\mathbf{j} = c\ rot\mathbf{M} = c\ rot\chi_0\mathbf{B} = \chi_0 c\ rot\ rot\mathbf{A} \tag{5.246}$$

так что, пользуясь $rot\ rot\mathbf{A} = grad\ div\mathbf{A} - \nabla^2\mathbf{A}$ и калибровочным условием $div\mathbf{A} = 0$, можно написать:

$$\mathbf{j} = -\chi_0 c\nabla^2\mathbf{A} \tag{5.247}$$

где $\chi_0$ – магнитная восприимчивость электронного газа. Тогда, сравнивая (5.245) и (5.247), находим: $\chi_0 = \frac{a}{c}$, а величину $a$ можно рассчитать из диаграммы Рис. 5.14.

В самом деле, из этой диаграммы имеем:

$$Q_{xx} = -\lim_{\tau\to 0} 2\frac{e^2}{c}T\sum_n e^{i\varepsilon_n\tau}\int\frac{v_x(\mathbf{p}+\mathbf{q})v_x(\mathbf{p})}{(i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}+\mathbf{q}))(i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}))}\frac{d^3p}{(2\pi)^3} \tag{5.248}$$

где $v_x(\mathbf{p}+\mathbf{q}) = \partial\xi(\mathbf{p}+\mathbf{q})/\partial p_x$ и $v_x(\mathbf{p}) = \partial\xi(\mathbf{p})/\partial p_x$ – соответствующие проекции скорости электрона. Предположим далее, для конкретности, что волновой вектор $\mathbf{q}$ направлен по оси $z$. В отличие от спиновой восприимчивости, орбитальная восприимчивость определяется не только окрестностью поверхности Ферми, но и всеми состояниями под ней, поскольку квантование Ландау затрагивает все состояния с $E < E_F$, так что конечное значение восприимчивости $\chi_0$ возникает из – за отличия суммы квантованных энергий от обычного интеграла по непрерывному спектру. Ограничимся случаем свободных электронов, когда $\xi(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} - E_F$. Разложим $Q_{xx}$ в ряд по $q = q_z$ и, с учетом $v_x(\mathbf{p}+\mathbf{q}) = v_x(\mathbf{p}) = p_x/m$, запишем:

$$Q_{xx} = -\lim_{\tau\to 0}\frac{e^2q^2}{c}T\sum_n e^{i\varepsilon_n\tau}\int\frac{v_x^2}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p})}\frac{\partial^2}{\partial p_z^2}\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p})}\frac{d^3p}{(2\pi)^3} \tag{5.249}$$

Имеем теперь:

$$\frac{\partial^2}{\partial p_z^2}\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p})} = \frac{1}{m}\frac{1}{(i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}))^2} + 2\frac{p_z^2}{m^2}\frac{1}{(i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}))^3} \tag{5.250}$$

и немедленно получаем:

$$\chi_0 = -\lim_{\tau\to 0}\frac{e^2}{c^2}T\sum_n e^{i\varepsilon_n\tau}\int\left\{\frac{1}{m}\frac{v_x^2}{(i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}))^3} + 2\frac{v_x^2v_z^2}{(i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p}))^4}\right\}\frac{d^3p}{(2\pi)^3} \tag{5.251}$$

Теперь нужно провести усреднение по углам, сводящееся к $< v_x^2 >= v^2/3$ и $< v_x^2v_z^2 >= v^4/15$, а затем вычислить двукратным интегрированием по частям интеграл, возникающий в первом слагаемом (5.251):

$$\int_0^\infty\frac{p^4}{(i\varepsilon_n + E_F - p^2/2m)^3}dp = \frac{3m^2}{2}\int_0^\infty\frac{dp}{i\varepsilon_n + E_F - p^2/2m} \tag{5.252}$$

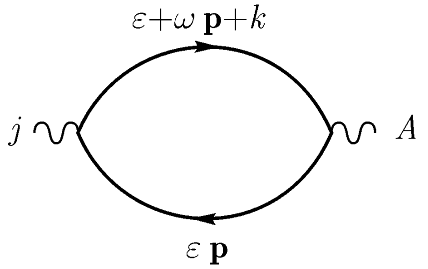



Рис. 5.14: Диаграмма, определяющая отклик идеального ферми – газа на внешний вектор – потенциал.

и троекратным интегрированием по частям интеграл из второго слагаемого,

$$\int_0^\infty dp \frac{p^6}{(i\varepsilon_n + E_F - p^2/2m)^4} = -\frac{5m^3}{2}\int_0^\infty \frac{dp}{i\varepsilon_n + E_F - p^2/2m} \tag{5.253}$$

Тогда суммирование по $n$ в (5.251) дает просто функцию распределения Ферми [1], и мы получаем $-\frac{e^2p_F}{4\pi^2mc^2}$ от первого слагаемого в (5.251) и $+\frac{e^2p_F}{6\pi^2mc^2}$ от второго слагаемого, что в сумме дает окончательный ответ:

$$\chi_0 = -\frac{e^2}{12\pi^2mc^2}\int_0^\infty dpn(\xi(\mathbf{p})) = -\frac{e^2p_F}{12\pi^2mc^2} \tag{5.254}$$

— обычный результат для диамагнитной восприимчивости газа электронов [11]. Если вспомнить аналогичный результат для паулиевской (спиновой) восприимчивости:

$$\chi_p = 2\mu_B^2\nu_F = \frac{e^2}{4m^2c^2}\frac{mp_F}{\pi^2} \tag{5.255}$$

то получаем хорошо известный результат для полной восприимчивости [11]:

$$\chi_0 = -\frac{1}{3}\chi_p \tag{5.256}$$

Вернемся теперь к рассмотрению сверхпроводников. Рассчитаем отклик на статический вектор – потенциал для этого случая. В отличие от нормального металла (свободного ферми – газа), как мы увидим, здесь отсутствует полное сокращение парамагнитного и диамагнитного вкладов в функции отклика. Поэтому, даже полагая $\mathbf{q} = 0$ в соотношении (5.240), мы получим конечный отклик вида:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{n_s e^2}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{r}) \tag{5.257}$$

т.е. уравнение Лондонов — основное уравнение электродинамики сверхпроводников. Величина $n_s$ называется (по определению) плотностью сверхпроводящих (сверхтекучих) электронов. Уравнение (5.257), “с очевидностью”, нарушает калибровочную инвариантность теории. Дело в том, что физическая причина отсутствия сокращения диамагнитного и парамагнитного вкладов в ядре $Q(0)$ как раз и заключается в том, что калибровочная инвариантность (и закон сохранения заряда), как уже отмечалось выше, в сверхпроводниках *спонтанно нарушена*. Именно в этом проявляется понижение симметрии системы, при переходе от нормального к сверхпроводящему основному состоянию. В нормальном металле, зануление $Q(0)$ обеспечивается, фактически, тождеством Уорда, связанным непосредственно с законом сохранения заряда и калибровочной инвариантностью электродинамики [20]. В сверхпроводниках это не так просто и для "восстановления" калибровочно – инвариантной формы отклика (отсутствующей в рамках простого подхода БКШ) требуется специальное рассмотрение.

Перейдем к непосредственному расчету $Q(0)$ для сверхпроводника. Диамагнитный вклад, с очевидностью, сохраняет прежний вид и может быть записан как:

$$Q^{(2)}_{\alpha\beta}(0) = -\frac{ne^2}{mc}\delta_{\alpha\beta} \tag{5.258}$$

А вот при расчете парамагнитного вклада, в отличие от нормального металла, нужно учесть вклад в $Q(0)$ как от нормальных, так и от аномальных функций Грина. В самом деле, парамагнитный вклад $Q^{(1)}_{\alpha\beta}(\omega,\mathbf{q})$, аналогично проведенному выше рассмотрению, получается (для конечных температур, мацубаровская техника) усреднением произведения двух токов и дается следующим выражением ($\sigma,\sigma'$ – спиновые индексы):

$$Q^{(1)}_{\alpha\beta}(\omega_m,\mathbf{q}) = \frac{1}{2c}\sum_{\sigma\sigma'}\int_{-\beta}^{\beta} e^{i\omega_m\tau}\int d^3re^{i\mathbf{qr}} < T_\tau\psi^+_\sigma(\mathbf{r}\tau)\hat{j}_\alpha\psi_\sigma(\mathbf{r}\tau)\psi^+_{\sigma'}(00)\hat{j}_\beta\psi_{\sigma'}(00) > \tag{5.259}$$

где $\hat{j} = -i\frac{e}{m}\nabla_{\mathbf{r}}$. Теперь нужно выполнить все спаривания $\psi$ – операторов, учитывая как нормальные, так и аномальные средние. Таким образом, получаем:

$$\begin{aligned} < T_\tau\psi^+_\sigma(\mathbf{r}\tau)\hat{j}_\alpha\psi_\sigma(\mathbf{r}\tau)\psi^+_{\sigma'}(00)\hat{j}_\beta\psi_{\sigma'}(00) >= -\hat{j}_\alpha G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}\tau)\hat{j}_\beta G_{\sigma'\sigma}(-\mathbf{r},-\tau) - \\ -\hat{j}_\alpha F^+_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}\tau)\hat{j}_\beta F_{\sigma'\sigma}(-\mathbf{r},-\tau) \end{aligned} \tag{5.260}$$

Тогда $Q_{\alpha\beta}(\omega_m\mathbf{q})$ принимает вид:

$$\begin{aligned} Q^{(1)}_{\alpha\beta}(\omega_m,\mathbf{q}) = \frac{1}{2c}\sum_{\sigma\sigma'}\int_{-\beta}^{\beta} e^{i\omega_m\tau}\int d^3re^{i\mathbf{qr}}\{2\hat{j}_\alpha G(\mathbf{r}\tau)\hat{j}_\beta G(-\mathbf{r},-\tau) + \\ +2\hat{j}_\alpha F(\mathbf{r}\tau)\hat{j}_\beta F^*(-\mathbf{r},-\tau)\} \end{aligned} \tag{5.261}$$

Заметим, что знаки петель, содержащих функции $G$ и $F$, оказались одинаковыми[36]. Переписывая (5.261) в импульсном представлении, имеем:

$$\begin{aligned} Q_{\alpha\beta}(\omega_m,\mathbf{q}) = -2\frac{e^2}{c}T\sum_n\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}v_\alpha\left(\mathbf{p}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)v_\beta\left(\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)\times \\ \times\left\{G\left(\varepsilon_n\mathbf{p}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)G\left(\varepsilon_n+\omega_m\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)+F\left(\varepsilon_n\mathbf{p}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)F^*\left(\varepsilon_n+\omega_m\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)\right\} \end{aligned} \tag{5.262}$$

Тогда при $\omega_m = 0$, $\mathbf{q} = 0$ имеем:

$$Q^{(1)}_{\alpha\alpha}(0) = -\frac{2e^2}{3m^2c}T\sum_n\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}p^2\{G^2(\varepsilon_n\mathbf{p}) + |F(\varepsilon_n\mathbf{p})|^2\} \tag{5.263}$$

[36] В следующей главе мы увидим, что это не так для петель со скалярными, а не "токовыми" вершинами.

Объединяя вместе (5.258) и (5.263), учитывая определение $n_s$, следующее из (5.257), а также явный вид функций Горькова (5.111), (5.112), получаем:

$$n - n_s = -\frac{2\nu_F p_F^2}{3m} T \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\Delta^2 + \xi^2 - \varepsilon_n^2}{(\varepsilon_n^2 + \xi^2 + \Delta^2)^2} \tag{5.264}$$

Это выражение не вполне корректно, поскольку полная плотность электронов определяется, в том числе, и состояниями далекими от поверхности Ферми. Поэтому переход к интегрированию по линеаризованному спектру $\xi$, который сделан в (5.264), не является, вообще говоря, оправданным. В тоже время плотность сверхтекучих электронов $n_s$, несомненно, определяется окрестностью поверхности Ферми, поскольку только там и происходит перестройка электронного спектра, связанная с возникновением сверхпроводящего состояния. В глубине же сферы Ферми (т.е. при $\xi \sim E_F$) ничего не происходит. Поэтому, корректный способ действий состоит в следующем. Вычтем из (5.264) это же выражение для нормального металла, т.е. с $\Delta = 0$. Тогда вклад глубоких состояний просто выпадет. При этом будет обеспечено и очевидное требование $n_s = 0$ при $\Delta \to 0$. В результате, получаем:

$$n_s = -\frac{2\nu_F p_F^2}{3m} T \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left[ \frac{\xi^2 - \varepsilon_n^2}{(\xi^2 + \varepsilon_n^2)^2} - \frac{\Delta^2 + \xi^2 - \varepsilon_n^2}{(\varepsilon_n^2 + \xi^2 + \Delta^2)^2} \right] \tag{5.265}$$

Выполним интегрирование по $\xi$, пользуясь стандартными интегралами:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(x^2 + a^2)^2} = \frac{\pi}{2a^3}, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx x^2}{(x^2 + a^2)^2} = \frac{\pi}{2a} \tag{5.266}$$

Тогда получаем:

$$n_s = \frac{2\nu_F p_F^2}{3m} T \sum_n \frac{\pi \Delta^2}{(\varepsilon_n^2 + \Delta^2)^{3/2}} \tag{5.267}$$

Теперь можно проанализировать различные предельные случаи.

- Случай $T \to 0$. Заменяем сумму интегралом и получаем:

  $$n_s = \frac{2\nu_F p_F^2}{3m} \frac{\pi \Delta^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{(\varepsilon^2 + \Delta^2)^{3/2}} = \frac{2\nu_F p_F^2}{3m} = \frac{p_F^2}{3\pi^2} = n \tag{5.268}$$

  Видим, что при $T = 0$ сверхтекучая плотность равно полной плотности электронов, как и должно быть в трансляционно инвариантной системе.

- Случай $T \to T_c$. В этом случае можно пренебречь $\Delta^2$ в знаменателе (5.267). Остающаяся сумма по частотам, фактически, нам уже встречалась, она выражается через $\zeta$ – функцию, что дает:

  $$\frac{n_s}{n} = \frac{7\zeta(3)\Delta^2}{4\pi^2 T_c^2} = 2\left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \tag{5.269}$$

  так что при $T \to T_c$ сверхтекучая плотность стремится к нулю.

Рассеяние на примесях уменьшает сверхтекучую плотность $n_s$, однако она остается конечной. Чтобы понять, что при этом происходит, проведем расчет $Q(0)$ с учетом примесей. При этом достаточно вычислить отклик просто рассмотрев петлевые графики, построенные на рассмотренных выше усредненных по примесям функциях

Горькова, которые получаются из соответствующих функций "чистого" сверхпроводника (5.111) и (5.112) с помощью замены (5.146). Вершинные поправки (диаграммы с примесной линией, соединяющей разные функции Грина в петле) можно не учитывать, поскольку они обращаются в нуль из – за интегрирования по углам (векторного характера вершин взаимодействия с внешним электромагнитным полем). Поэтому, формулу для $n_s$ можно сразу записать в виде (ср. (5.264)):

$$\frac{n-n_s}{n} = -T\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\xi^2+\tilde{\Delta}^2-\tilde{\varepsilon}_n^2}{(\xi^2+\tilde{\Delta}^2+\tilde{\varepsilon}_n^2)^2} \tag{5.270}$$

где $\tilde{\varepsilon}_n$ и $\tilde{\Delta}$ были определены в (5.145), (5.146). Снова вычтем из этого выражения его значение при $\Delta = 0$ и в отсутствие примесей, чтобы исключить вклад глубоких уровней внутри сферы Ферми. Тогда, после интегрирования по $\xi$, получаем обобщение (5.267):

$$\frac{n_s}{n} = \pi T\sum_n\frac{\tilde{\Delta}^2}{(\tilde{\varepsilon}_n^2+\tilde{\Delta}^2)^{3/2}} \tag{5.271}$$

или, с учетом (5.145), (5.146):

$$\frac{n_s}{n} = \pi T\sum_n\frac{\Delta^2}{(\varepsilon_n^2+\Delta^2)^{3/2}\left(1+\frac{1}{2\tau\sqrt{\varepsilon_n^2+\Delta^2}}\right)} \tag{5.272}$$

При малой концентрации примесей, в смысле неравенства $\Delta_0\tau \gg 1$, это выражение сводится к (5.267), а в "грязном" пределе $\Delta_0\tau \ll 1$ оно дает:

$$\frac{n_s}{n} = 2\pi\tau T\sum_n\frac{\Delta^2}{(\varepsilon_n^2+\Delta^2)^2} = \pi\tau\Delta th\frac{\Delta}{2T} \tag{5.273}$$

Таким образом, в "грязном" сверхпроводнике уже при $T \to 0$ имеем:

$$\frac{n_s(T\to 0)}{n} = \pi\tau\Delta_0 \ll 1 \tag{5.274}$$

т.е. сверхпроводящей является незначительная часть от полного числа электронов.

Продолжим общую дискуссию, вернувшись к исходным обозначениям (5.230) — (5.238) и полагая далее $c = 1$. В изотропной системе, кроме того, для ядра, описывающего электромагнитный отклик, имеем $K_{\mu\nu} = K\delta_{\mu\nu}$. Итог предыдущего рассмотрения, фактически, сводится к тому, что необходимым и достаточным условием наличия сверхпроводящего отклика системы является выполнение требования[37]:

$$\lim_{q\to 0}\lim_{\omega\to 0}K(\mathbf{q}\omega) = \lim_{\omega\to 0}\lim_{q\to 0}K(\mathbf{q}\omega) = K(0,0) \neq 0 \tag{5.277}$$

[37] Имеется два вклада в $K_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega)$: парамагнитный $K^p_{\mu\nu}$ и диамагнитный $K^d_{\mu\nu}$. Диамагнитный вклад пропорционален полной плотности электронов и не отличается от такового в нормальном состоянии. В нормальном состоянии, полный ток, вызываемый статическим вектор – потенциалом пренебрежимо мал (и определяет только диамагнетизм Ландау). Поэтому, с высокой точностью имеем: $K^n_{\mu\nu}(\mathbf{q}0) = K^{np}_{\mu\nu}(\mathbf{q}0) + K^d_{\mu\nu} \approx 0$, так что $K^{np}_{\mu\nu}(\mathbf{q}0) \approx -K^d_{\mu\nu}$ (точное равенство выполняется здесь при $\mathbf{q} \to 0$). Плотность тока в сверхпроводнике тогда равна:

$$J_\mu(\mathbf{q}\omega) = -\frac{1}{4\pi}\{K^{sp}_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega) - K^{np}_{\mu\nu}(\mathbf{q}0)\}A^\nu_{\mathbf{q}\omega} \tag{5.275}$$

Поэтому, как уже отмечалось выше, считать реально надо только парамагнитный отклик. Разность токов в сверхпроводнике и нормальном металле можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} J^s_\mu(\mathbf{q}\omega) - J^n_\mu(\mathbf{q}\omega) &= \{K^s_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega) - K^n_{\mu\nu}(\mathbf{q}0)\}A^\nu_{\mathbf{q}\omega} = \\ &= \{K^{sp}_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega) - K^{np}_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega)\}A^\nu_{\mathbf{q}\omega} \end{aligned} \tag{5.276}$$

причем, согласно (5.267), имеем:

$$K(0,0)=\frac{1}{\lambda_L^2}\frac{n_s}{n}=\frac{4\pi n_s e^2}{m}=\frac{1}{\lambda_L^2}2\pi T\sum_n\frac{\Delta^2}{(\varepsilon_n^2+\Delta^2)^{3/2}} \tag{5.278}$$

где, как и выше, $\lambda_L^2=\frac{mc^2}{4\pi ne^2}$ – квадрат лондоновской глубины проникновения при температуре $T=0$.

Из (5.230) имеем:

$$J_\mu(\mathbf{q}\omega)=-\frac{1}{4\pi}K_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega)A^\nu_{\mathbf{q}\omega} \tag{5.279}$$

так что, с учетом определения электрического поля:

$$\mathbf{E}=-\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\qquad\text{или}\qquad \mathbf{E}_{\mathbf{q}\omega}=i\omega\mathbf{A}_{\mathbf{q}\omega} \tag{5.280}$$

можно ввести проводимость системы как:

$$\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega)=-\frac{1}{4\pi i\omega}K_{\mu\nu}(\mathbf{q}\omega)\qquad\text{или}\qquad \sigma(\mathbf{q}\omega)=-\frac{1}{4\pi i\omega}K(\mathbf{q}\omega) \tag{5.281}$$

где второе равенство справедливо для изотропного случая. В большинстве случаев интерес представляет предел этих выражений при $\mathbf{q}\to 0$ (отклик на однородное поле), поэтому далее везде имеется в виду только этот предел.

Удобно ввести следующую запись:

$$\sigma(\omega)=\sigma_s(\omega)+\sigma_{exc}(\omega) \tag{5.282}$$

где

$$\sigma_s(\omega)=-\frac{K(0)}{4\pi i\omega} \tag{5.283}$$

– проводимость сверхпроводящего конденсата, а

$$\sigma_{exc}(\omega)=-\frac{1}{4\pi}\frac{K(\omega)-K(0)}{i\omega} \tag{5.284}$$

– проводимость одночастичных возбуждений. Видим, что (5.283), с учетом (5.278), сводится к:

$$\sigma_s(\omega)=\frac{n_s e^2}{m}\frac{i}{\omega+i\delta},\qquad \delta\to+0 \tag{5.285}$$

так что:

$$Re\sigma_s(\omega)=\frac{n_s e^2}{m}\pi\delta(\omega) \tag{5.286}$$

что соответствует бездиссипативному вкладу конденсата в проводимость (т.е. собственно сверхпроводимости).

Перейдем теперь к подробному рассмотрению $\sigma_{exc}(\omega)$ – проводимости от одночастичных возбуждений сверхпроводника, которая определяет, в частности, поглощение электромагнитной энергии в сверхпроводнике на конечных частотах (оптические свойства сверхпроводника). Фактически, мы должны вернуться к (5.261), (5.262) и провести все расчеты для конечной частоты внешнего поля $i\omega_m\to\omega+i\delta$ и $\mathbf{q}\to 0$. Имеем:

$$Q_{\alpha\alpha}(\omega_m,\mathbf{q})=-2\frac{e^2}{3m^2}T\sum_n\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\left(\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)^2\times$$
$$\times\left\{G\left(\varepsilon_n\mathbf{p}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)G\left(\varepsilon_n+\omega_m\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)+F\left(\varepsilon_n\mathbf{p}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)F^*\left(\varepsilon_n+\omega_m\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)\right\} \tag{5.287}$$

Сюда надо подставить явные выражения для горьковских функций, вычислить суммы по частотам и перейти к интегрированию по линеаризованному спектру $\xi_p \equiv \xi(\mathbf{p})$ в окрестности поверхности Ферми, где $p \approx p_F$ и его можно вынести из под знака интеграла. Эти вычисления довольно громоздки, и мы опускаем соответствующие детали[38]. В итоге, после обычного продолжения $i\omega_m \to \omega + i\delta$, мы получим:

$$
\begin{aligned}
Q_{\alpha\alpha}(\omega_m, \mathbf{q}) = -\frac{2e^2}{3m^2}\nu_F p_F^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \left\{ \frac{\varepsilon_p \varepsilon_{p+q} + \xi_p \xi_{p+q} + \Delta^2}{\varepsilon_p \varepsilon_{p+q}} \right\} \{n(\varepsilon_p) - n(\varepsilon_{p+q})\} \times \\
\times \left\{ \frac{1}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} + \omega + i\delta} + \frac{1}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \omega - i\delta} \right\} + \\
+\frac{2e^2}{3m^2}\nu_F p_F^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \left\{ \frac{\varepsilon_p \varepsilon_{p+q} - \xi_p \xi_{p+q} - \Delta^2}{\varepsilon_p \varepsilon_{p+q}} \right\} \{1 - n(\varepsilon_p) - n(\varepsilon_{p+q})\} \times \\
\times \left\{ \frac{1}{\varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} + \omega + i\delta} + \frac{1}{\varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} - \omega - i\delta} \right\}
\end{aligned}
\tag{5.288}
$$

где введено обозначение $\varepsilon_p = \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}$ – для спектра электрона в модели БКШ (5.68), $n(\varepsilon_p)$ – функция Ферми с этим спектром. В пределе $T \to 0$ здесь остается только вклад второго слагаемого, поскольку $n(\varepsilon_p) \to 0$ при $T \to 0$ из – за наличия щели в спектре БКШ. В тоже время, нас интересует предел $\mathbf{q} \to 0$, а тогда, как легко убедиться, обращается в нуль фактор (т.н. фактор когерентности), стоящий в числителе в первых фигурных скобках этого слагаемого. Таким образом, мы получаем нуль, и вся проводимость исчерпывается вкладом (5.283), (5.285). В частности, действительная часть проводимости сосредоточена в $\delta$ – функции на нулевой частоте (5.286), причем $n_s = n$, т.е. в нее дают вклад все электроны.

Чтобы разобраться, что произошло, вспомним, что мы рассматриваем отклик на конечных частотах в сверхпроводнике без примесного (и какого – либо другого) диссипативного рассеяния. Скорость $i$-го электрона во внешнем поле определяется из: $m\mathbf{v}_i = \mathbf{p}_i - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_i)$. Тогда полный ток в системе равен:

$$
\mathbf{J} = e\sum_i < \mathbf{v}_i > = \frac{e}{m}\sum_i < \mathbf{p}_i > -\frac{e^2}{mc}\sum_i \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \tag{5.289}
$$

Первое слагаемое здесь пропорционально приложенному электрическому полю $\mathbf{E}(\mathbf{r}t) = \mathbf{E}e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} - i\omega t}$, так что:

$$
\mathbf{J}(\mathbf{r}t) = \sigma(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}t) - \frac{e^2}{mc}n\mathbf{A}(\mathbf{r}t) \tag{5.290}
$$

где при записи второго слагаемого мы предположили однородность системы. С учетом $\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}t)}{\partial t}$, имеем $\mathbf{A} = \frac{ic}{\omega}\mathbf{E}$. Тогда уравнение Лондонов (5.257) с $n_s = n$ (при $T = 0$) получается из (5.290), если $\sigma(\omega) = 0$. Именно это мы и получили из (5.288).

Поэтому, последовательное рассмотрение проводимости в сверхпроводнике нужно проводить с учетом, например, примесного рассеяния (S.B.Nam, 1967). Соответствующие расчеты также весьма громоздки. Мы воспользуемся упрощенными рассуждениями, которые дают правильный ответ в "грязном" пределе [4]. Воспользуемся (ср. (5.281), (5.239)) определением проводимости в виде:

$$
\sigma(\omega) = \lim_{q \to 0} \frac{Q(q\omega)}{i\omega}, \qquad Re\sigma(\omega) = \frac{1}{\omega} ImQ(0\omega) \tag{5.291}
$$

и выделим мнимую часть (5.288) для случая $\omega > 0$. Кроме того, учтем, что в "грязном" сверхпроводнике импульсы $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p} + \mathbf{q}$ не являются "хорошими" квантовыми

[38] В следующей главе аналогичные вычисления будут проведены (для другой задачи) во всех деталях.

числами электрона. Тогда можно предположить, что в этом пределе $\xi_{\mathbf{p}}$ и $\xi_{\mathbf{p+q}}$ в (5.288) следует считать *независимыми* переменными и записать:

$$Re\sigma(\omega) = \frac{C_0}{\omega}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \int_{-\infty}^{\infty} d\xi'_p \delta(\omega - \varepsilon_p - \varepsilon_{p'})\frac{\varepsilon_p\varepsilon_{p'} - \xi_p\xi_{p'} - \Delta^2}{\varepsilon_p\varepsilon_{p'}} =$$
$$= \frac{C_0}{\omega}\int_{\Delta}^{\infty} d\varepsilon \int_{\Delta}^{\infty} d\varepsilon' N(\varepsilon)N(\varepsilon')\delta(\omega - \varepsilon - \varepsilon')\left(1 - \frac{\Delta^2}{\varepsilon\varepsilon'}\right) \qquad (5.292)$$

где в последней строке перешли от интегрирования по $\xi$ к интегрированию по спектру (5.68) $\varepsilon$ и, соответственно, ввели плотность состояний БКШ, определенную в (5.79). В (5.292 введена также константа $C_0$, которую будем определять из условия "сшивки" с проводимостью в нормальном металле (при $\Delta \to 0$). Из (5.292), снимая одно интегрирование с помощью $\delta$ – функции, получаем:

$$Re\sigma(\omega) = \frac{C_0}{\omega}\theta(\omega - 2\Delta)\int_{\Delta}^{\omega-\Delta} d\varepsilon N(\varepsilon)N(\omega - \varepsilon)\left\{1 - \frac{\Delta^2}{\varepsilon(\omega - \varepsilon)}\right\} =$$
$$= \frac{C_0}{\omega}\theta(\omega - 2\Delta)\int_{\Delta}^{\omega-\Delta} d\varepsilon \frac{\varepsilon(\omega - \varepsilon) - \Delta^2}{(\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2}[(\omega - \varepsilon)^2 - \Delta^2]^{1/2}} \qquad (5.293)$$

Переходя к переменной интегрирования $x$ с помощью соотношения $2\varepsilon = \omega + x(\omega - 2\Delta)$, имеем:

$$Re\sigma(\omega) = \frac{1}{2}\frac{C_0}{\omega}\theta(\omega - 2\Delta)(\omega - 2\Delta)\int_{-1}^{1} dx \frac{1 - \alpha x^2}{[(1 - x^2)(1 - \alpha^2 x^2)]^{1/2}} \qquad (5.294)$$

где $\alpha = \frac{\omega - 2\Delta}{\omega + 2\Delta}$. Интеграл в (5.294) выражается через эллиптические функции как:

$$Re\sigma(\omega) = \frac{C_0}{\omega}[(\omega + 2\Delta)E(\alpha) - 4\Delta K(\alpha)]\theta(\omega - 2\Delta) \qquad (5.295)$$

В нормальном металле ($\Delta = 0$) поглощение определяется величиной $C_0$ (что видно из (5.292), вычисленной при $\Delta = 0$). Соответственно, отношение оптических проводимостей в сверхпроводнике и нормальном металле определяется выражением:

$$\frac{Re\sigma_s(\omega)}{Re\sigma_n(\omega)} \equiv \frac{\sigma_{1s}(\omega)}{\sigma_{1n}(\omega)} = \frac{1}{\omega}[(\omega + 2\Delta)E(\alpha) - 4\Delta K(\alpha)]\theta(\omega - 2\Delta) \qquad (5.296)$$

Это так называемая формула Маттиса – Бардина (D.Mattis, J.Bardeen, 1958), которая дает прекрасное согласие с экспериментом, в чем можно убедиться, посмотрев на Рис. 5.15.

В широком интервале частот внешнего электромагнитного поля качественное поведение действительной части проводимости (оптического поглощения) в сверхпроводниках выглядит как показано на Рис. 5.16, где приведены результаты более подробных расчетов оптической проводимости в модели БКШ, с учетом примесного рассеяния с конкретным значением $\gamma = \frac{1}{2\tau} = \Delta$. В нормальной фазе (при $T \geq T_c$) проводимость, зависящая от частоты, определяется обычной формулой Друде (4.179), с временем свободного пробега, определяемым, например для достаточно низких температур, рассеянием на примесях. Это дает характерное поведение действительной части проводимости, показанное на Рис. 5.16 сплошной кривой. После перехода в сверхпроводящее состояние, в проводимости возникает $\delta(\omega)$ – вклад (5.286), связанный со сверхтекучим откликом конденсата куперовских пар, а конечное поглощение возникает в области $\omega > 2\Delta$, что соответствует возбуждению одиночных электронов через щель БКШ. При $T = 0$ эти электроны возникают в результате "разрыва" куперовских пар внешним полем (что соответствует физическому смыслу величины $\Delta$, как энергии связи электрона в паре). Проводимость любой системы удовлетворяет следующему точному *правилу сумм* [10]:

$$\int_0^{\infty} d\omega Re\sigma(\omega) = \frac{\pi n e^2}{2m} = \frac{\omega_p^2}{8} \qquad (5.297)$$

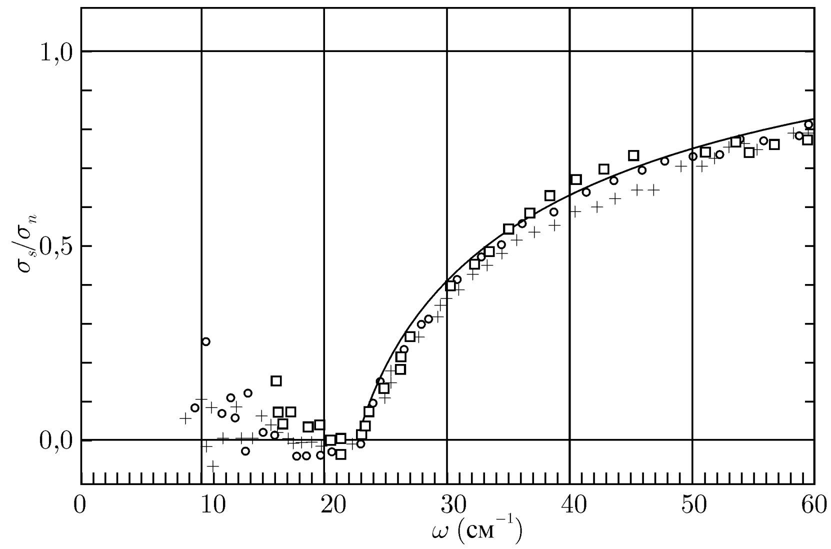



Рис. 5.15: Действительная часть оптической проводимости свинца в сверхпроводящем состоянии при $T = 2K$ (L.Palmer, M.Tinkham, 1968).

где $\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2}{m}$ – квадрат плазменной частоты. Для сверхпроводников это правило сумм означает, что интеграл от всей области, заштрихованной на Рис. 5.16, т.е. заштрихованная площадь под кривой, описывающей друдевское поведение в нормальном металле, после перехода в сверхпроводящее состояние "уходит" в амплитуду $\delta$ – функционного вклада (5.286), а остающаяся незаштрихованной область под кривой поглощения в области $\omega > 2\Delta$ обеспечивает выполнение (5.297) вместе с этим вкладом сверхтекучего конденсата.

Относительно простое рассмотрение, проведенное выше и основанное на модели БКШ, дает правильный ответ для отклика системы на внешние *поперечные* электромагнитные поля, но в общем случае, оно не дает правильного результата для отклика на *продольное* поле[39]. Это связано с калибровочно *не* инвариантной формой отклика в модели БКШ. Физическая природа этой трудности обусловлена тем, что продольный градиентный потенциал связан непосредственно с коллективными возбуждениями (флуктуациями) электронной плотности. В модели без дальнодействующего кулоновского взаимодействия такие возбуждения в сверхпроводниках соответствуют так называемому боголюбовскому звуку, представляющему собой голдстоуновскую моду, связанную со спонтанным нарушением калибровочной инвариантности. Учет дальнодействующих кулоновских сил приводит к тому, что боголюбовский звук переходит в обычные плазмоны в металле. Градиентно инвариантная теория для электромагнитного отклика сверхпроводников может быть получена, если обобщить схему БКШ таким образом, чтобы включить в нее подобные возбуждения [5].

[39]Мы всегда подразумевали выбор калибровки $div\mathbf{A} = 0,\ \phi = 0$.

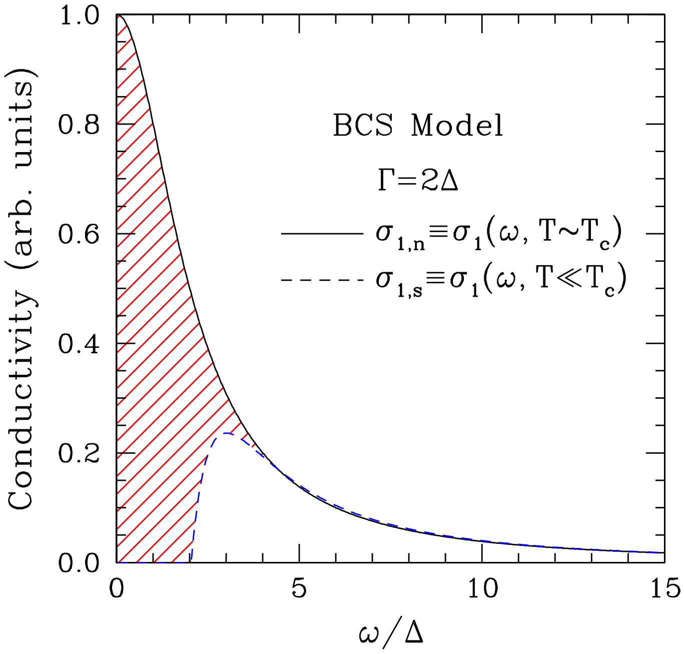



Рис. 5.16: Действительная часть оптической проводимости металла в нормальном и сверхпроводящем состоянии, с учетом конечной частоты рассеяния на примесях $\Gamma = \frac{1}{\tau} = 2\Delta$.

# Глава 6

# ЭЛЕКТРОННЫЕ НЕУСТОЙЧИВОСТИ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

## 6.1 Неустойчивость фононного спектра.

Проведем расчет перенормировки фононного спектра за счет электрон – фононного взаимодействия в *одномерном* металле. При этом мы будем исходить из общей формулировки задачи, описываемой уравнениями (3.16), (3.18) и (3.74). Как мы увидим, эта перенормировка ведет к неустойчивости фононного спектра, кратко уже упоминавшейся выше в главе об электрон – фононном взаимодействии. Теперь наша задача состоит в том, чтобы подробнее разобраться в этом вопросе.

Для $d = 1$ поляризационный оператор газа свободных электронов при $T = 0$ определяется следующим выражением:

$$\Pi(k\omega) = -2i \int \frac{dp}{2\pi} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0(\varepsilon p) G_0(\varepsilon + \omega p + k) \tag{6.1}$$

где множитель 2 учитывает спин. Вычисляя, как это делалось раньше, интеграл по $\varepsilon$, получаем:

$$\Pi(k\omega) = \frac{1}{\pi} \int dp \frac{n(\xi_p) - n(\xi_{p+k})}{\omega - \xi_{p+k} + \xi_p + i\delta(sign\xi_{p+k} - sign\xi_p)} \tag{6.2}$$

где ввели обозначение $\xi_p \equiv \xi(p) = \frac{p^2}{2m} - \mu$ для энергии электронов, отсчитанной от уровня Ферми. Отличный от нуля вклад в интеграл в (6.2) дают две области:

1. $\xi_p > 0, \qquad \xi_{p+k} < 0$
2. $\xi_p < 0, \qquad \xi_{p+k} > 0$

иначе $n(\xi_p) - n(\xi_{p+k}) = 0$. Для конкретности, пусть $k > 0$. Тогда эти области соответствуют:

1. $-p_F - k < p < -p_F$
2. $p_F - k < p < p_F$

Соответственно этим неравенствам определяется и знак $\pm i\delta$ в знаменателе (6.2). Поэтому (6.2) можно переписать как:

$$\Pi(k\omega) = -\frac{1}{\pi}\int_{-p_F-k}^{-p_F}\frac{dp}{\omega-\frac{k^2}{2m}-\frac{pk}{m}-i\delta}+\frac{1}{\pi}\int_{p_F-k}^{p_F}\frac{dp}{\omega-\frac{k^2}{2m}-\frac{pk}{m}+i\delta}=$$
$$=\frac{m}{\pi k}\ln\left[\frac{\left(\frac{k^2}{2m}-\frac{kp_F}{m}-\omega+i\delta\right)\left(\frac{k^2}{2m}-\frac{kp_F}{m}+\omega+i\delta\right)}{\left(\frac{k^2}{2m}+\frac{kp_F}{m}+\omega-i\delta\right)\left(\frac{k^2}{2m}+\frac{kp_F}{m}-\omega-i\delta\right)}\right] \tag{6.3}$$

Рассмотрим поведение $\Pi(k\omega)$ при $\omega=0$ и вблизи $k=2p_F$, полагая $k=2p_F+q$ (т.е. $q=k-2p_F, \quad |q|\ll 2p_F$). Тогда:

$$\Pi(k=2p_F+q,\ \omega=0)=-\frac{m}{\pi p_F}\ln\frac{4p_F}{|q|}=-\frac{m}{\pi p_F}\ln\frac{4p_F}{|k-2p_F|} \tag{6.4}$$

Фактически этот результат уже упоминался нами выше в (3.72), в связи с предварительным обсуждением "гигантской" коновской аномалии.

Теперь перейдем непосредственно к обсуждению перенормировки фононного спектра. Запишем фононную функцию Грина в виде (ср. (3.18) и (3.74)):

$$D^{-1}(k\omega)=D_0^{-1}(\omega k)-g^2\Pi(k\omega) \tag{6.5}$$

вблизи $k=2p_F$, используя (6.4)[1], имеем:

$$\frac{\omega^2-\omega_{2p_F}^2}{\omega_{2p_F}^2}+\frac{mg^2}{\pi p_F}\ln\frac{4p_F}{|k-2p_F|}=0 \tag{6.6}$$

или

$$\omega^2=\omega_{2p_F}^2\left\{1-\frac{mg^2}{\pi p_F}\ln\frac{4p_F}{|k-2p_F|}\right\} \tag{6.7}$$

Отсюда видно, что для $k$, достаточно близких к $2p_F$, второй член превосходит первый, так что частота фонона становится мнимой ($\omega^2<0$). Уменьшение частот фононов с $k\sim 2p_F$ называют возникновением "мягкой" моды ("смягчением" решетки), что показано на Рис. 6.1, а возникновение соответствующей неустойчивости фононного спектра приводит к тому, что решетка стремится спонтанно деформироваться. Оказывается (как мы увидим ниже) термодинамически выгодным возникновение модуляции плотности атомов решетки с периодом $\frac{2\pi}{2p_F}=\frac{\pi}{p_F}$, т.е. возникновение *статической* деформации $\sim Ree^{i2p_Fx}\sim\cos(2p_Fx+\phi)$. В системе происходит так называемый *пайерлсовский* структурный переход. Соответственно таким смещениям атомов возникает и модуляция плотности электронного заряда: $\rho(x)=\rho_0+\rho_1\cos(2p_Fx+\phi)$, или, как говорят, возникает *волна зарядовой плотности* (CDW). Все это иллюстрируется Рис. 6.2.

Реально, рассматриваемая неустойчивость спектра возникает при некоторой конечной температуре $T=T_{p0}$, когда квадрат частоты $\omega^2(k=2p_F)$ впервые обращается в нуль. Чтобы понять как это происходит, рассмотрим подробнее ситуацию при $T\neq 0$. Работаем, как всегда, в мацубаровской технике. Для функции Грина фононов опять пишем уравнение Дайсона:

$$D^{-1}(k\omega_m)=D_0^{-1}(\omega_m k)-g^2\Pi(\omega_m k) \tag{6.8}$$

[1]Строго говоря здесь следовало бы использовать $\Pi(\omega,\ k\approx 2p_F)$ при $\omega\neq 0$, но пренебрежение этой частотной зависимостью не меняет качественных выводов.

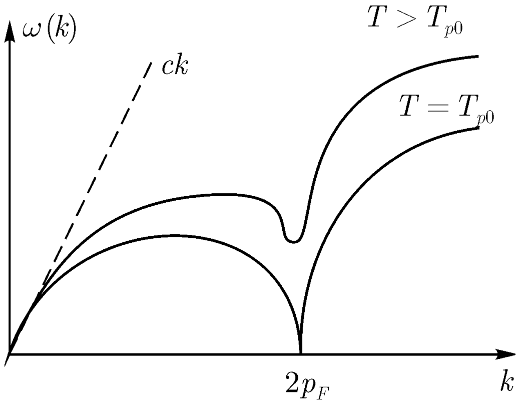



Рис. 6.1: Возникновение неустойчивой (“мягкой”) фононной моды за счет гигантской коновской аномалии.

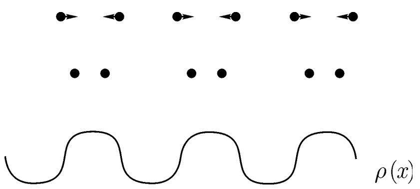



Рис. 6.2: Смещение атомов цепочки при изменении периода и образование волны зарядовой плотности (CDW) при пайерлсовском переходе. Показан случай удвоения периода исходной решетки.

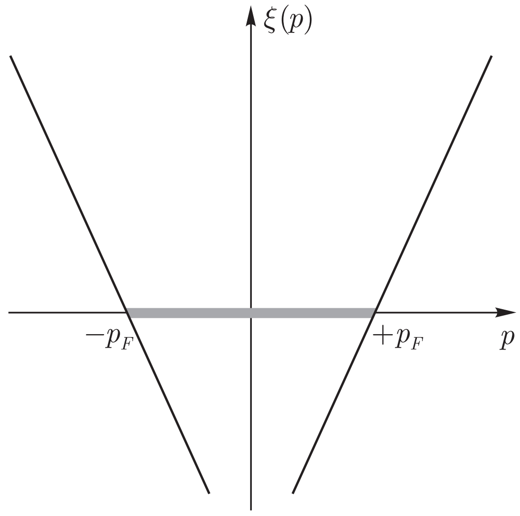



Рис. 6.3: Линеаризованный (вблизи уровня Ферми) спектр электронов в одномерном металле. “Поверхность” Ферми представляет собой прямую линию, заполнены электронные состояния в области $(-p_F,\ p_F)$, которая заштрихована.

где

$$D_0(k\omega_m) = \frac{\omega_k^2}{(i\omega_m)^2 - \omega_k^2}, \qquad \omega_m = 2\pi mT \tag{6.9}$$

Поляризационный оператор:

$$\Pi(k\omega_m) = 2T\sum_n \int \frac{dp}{2\pi} G_0(\varepsilon_n p) G_0(\varepsilon_n - \omega_m,\ p-k) \tag{6.10}$$

Нас интересует область $k \sim 2p_F$, так что запишем:

$$k = 2p_F + q, \qquad |q| \ll 2p_F \tag{6.11}$$

Поскольку интересующие нас эффекты определяются электронами из сравнительно узкой окрестности уровня Ферми, в дальнейшем используем модель линеаризованного спектра, показанную на Рис. 6.3. Тогда имеем:

$$\begin{aligned} \xi_{p-k} &= -\xi_p + v_F q \qquad \text{при} \qquad p \sim +p_F \\ \xi_{p+k} &= -\xi_p + v_F q \qquad \text{при} \qquad p \sim -p_F \end{aligned} \tag{6.12}$$

Фактически, это справедливо для любого вида электронного спектра в одномерном металле вблизи двух “концов” линии Ферми (“точек” Ферми). Соответственно, записываем поляризационный оператор (имея в виду опять $k > 0$) в виде:

$$\begin{aligned} \Pi(q\omega_m) &= TN(E_F)\sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi_p}{2\pi i} 2\pi i \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} \frac{1}{i(\varepsilon_n - \omega_m) + \xi_p - v_F q} = \\ &= -2\pi TN(E_F)\sum_n \theta[\varepsilon_n(\varepsilon_n - \omega_m)] \frac{sign\varepsilon_n}{2\varepsilon_n - \omega_m + iv_F q} \end{aligned} \tag{6.13}$$

где спиновая "двойка" включена в $N(E_F)$. Здесь фактор $\theta[\varepsilon_n(\varepsilon_n-\omega_m)]$ обеспечивает $sign\varepsilon_n = sign(\varepsilon_n-\omega_m)$, что, в свою очередь, помещает полюса по $\xi_p$ в разные полуплоскости соответствующей комплексной переменной, что и обеспечивает отличие от нуля интеграла по $\xi_p$, который тривиально считается по теореме Коши.

Умножая числитель и знаменатель на $sign\varepsilon_n = sign(\varepsilon_n-\omega_m)$, получим:

$$\Pi(q\omega_m) = -2\pi T N(E_F)\sum_n \frac{\theta[\varepsilon_n(\varepsilon_n-\omega_m)]}{|\varepsilon_n|+|\varepsilon_n-\omega_m|+iv_Fq\ sign\varepsilon_n} = \\ = -2\pi T N(E_F)\sum_n \frac{\theta[\varepsilon_n(\varepsilon_n-\omega_m)]}{|2\varepsilon_n-\omega_m|+iv_Fq\ sign\varepsilon_n} \qquad (6.14)$$

где учли $|\varepsilon_n| = \varepsilon_n sign\varepsilon_n$; $|\varepsilon_n-\omega_m| = (\varepsilon_n-\omega_m)sign\varepsilon_n$; $|2\varepsilon_n-\omega_m|>0$. Тогда:

$$\Pi(q\omega_m) = -2\pi T N(E_F)\sum_{n\geq 0}\frac{1}{2\varepsilon_n+\omega_m+iv_Fq} - \\ -2\pi T N(E_F)\sum_{n\geq 0}\frac{1}{2\varepsilon_n+\omega_m-iv_Fq} \qquad (6.15)$$

Входящие сюда суммы расходятся, если не учитывать, что само по себе, электрон – фононное взаимодействие ("константа" взаимодействия $g$) эффективно обрезается на частотах $\sim E_F$, т.е. порядка ширины зоны проводимости[2]. Поэтому суммировать здесь надо до $\varepsilon_n \sim E_F$! Тогда, добавляя и вычитая в суммах (6.15) $2\pi T N(E_F)\sum_{n\geq 0}^{N^*}\frac{1}{2\varepsilon_n}$, где $N^* = \left[\frac{E_F}{2\pi T}\right]$, можем записать:

$$\Pi(\omega_m q) = -4\pi T N(E_F)\sum_{n\geq 0}^{N^*}\frac{1}{2\varepsilon_n} \\ -2\pi T N(E_F)\sum_{n=0}^{\infty}\left[\frac{1}{2\varepsilon_n+\omega_m+iv_Fq}-\frac{1}{2\varepsilon_n}\right] - \\ -2\pi T N(E_F)\sum_{n=0}^{\infty}\left[\frac{1}{2\varepsilon_n+\omega_m-iv_Fq}-\frac{1}{2\varepsilon_n}\right] \qquad (6.16)$$

где в сходящихся суммах верхний предел уже можно взять равным бесконечности. Пользуясь теперь тем, что[3]:

$$4\pi T N(E_F)\sum_{n\geq 0}^{N^*}\frac{1}{2\varepsilon_n} = N(E_F)\ln\frac{2\gamma E_F}{\pi T}, \qquad (6.17)$$

получаем:

$$\Pi(q\omega_m) = -N(E_F)\ln\frac{2\gamma E_F}{\pi T} - \\ -\frac{1}{2}N(E_F)\sum_{n=0}^{\infty}\left[\frac{1}{n+\frac{1}{2}+\frac{\omega_m}{4\pi T}+\frac{iv_Fq}{4\pi T}}-\frac{1}{n+\frac{1}{2}}\right] - \\ -\frac{1}{2}N(E_F)\sum_{n=0}^{\infty}\left[\frac{1}{n+\frac{1}{2}+\frac{\omega_m}{4\pi T}-\frac{iv_Fq}{4\pi T}}-\frac{1}{n+\frac{1}{2}}\right] \qquad (6.18)$$

---

[2] Не путать со *спаривательным* взаимодействием в сверхпроводниках, которое, как мы видели обрезается на частотах $\sim\omega_D$.

[3] Здесь использован известный результат: $2\sum_{n=0}^{N}\frac{1}{2n+1} = \ln(4\gamma N)$.

Пользуясь теперь определением $\psi(x)$ – функции в виде:

$$\psi(x) = -C - \sum_{n=0}^{\infty}\left[\frac{1}{n+x} - \frac{1}{n+1}\right] \tag{6.19}$$

где $C = \ln\gamma = 0.577...$, запишем поляризационный оператор одномерного электронного газа в следующем окончательном виде:

$$\begin{aligned}\Pi(q\omega_m) &= -N(E_F)\ln\frac{2\gamma E_F}{\pi T} + \frac{1}{2}N(E_F)\left[\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\omega_m}{4\pi T} + \frac{iv_Fq}{4\pi T}\right) + \right.\\ &\left. + \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\omega_m}{4\pi T} - \frac{iv_Fq}{4\pi T}\right) - 2\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right] =\\ &= -N(E_F)\ln\frac{E_F}{2\pi T} + \frac{1}{2}N(E_F)\left[\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\omega_m}{4\pi T} + \frac{iv_Fq}{4\pi T}\right) + \right.\\ &\left. + \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\omega_m}{4\pi T} - \frac{iv_Fq}{4\pi T}\right)\right]\end{aligned} \tag{6.20}$$

где учли, что $\psi\left(\frac{1}{2}\right) = -\ln 4\gamma$.

Определим безразмерную константу электрон – фононного взаимодействия как[4]:

$$\lambda = g^2 N(E_F) \tag{6.21}$$

Тогда интересующее нас уравнение для фононной функции Грина (6.8) переписывается в виде:

$$\begin{aligned}\omega_{2p_F}^2 D^{-1}(q\omega_m) &= (i\omega_m)^2 - \omega_{2p_F}^2\left\{1 - \lambda\ln\frac{E_F}{2\pi T} + \right.\\ &\left. + \frac{\lambda}{2}\left[\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\omega_m}{4\pi T} + \frac{iv_Fq}{4\pi T}\right) + \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\omega_m}{4\pi T} - \frac{iv_Fq}{4\pi T}\right)\right]\right\} =\\ &= (i\omega_m)^2 - \omega_{2p_F}^2\left\{1 - \lambda\ln\frac{2\gamma E_F}{\pi T} + \right.\\ &\left. + \frac{\lambda}{2}\left[\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\omega_m}{4\pi T} + \frac{iv_Fq}{4\pi T}\right) + \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\omega_m}{4\pi T} - \frac{iv_Fq}{4\pi T}\right) - 2\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right]\right\}\end{aligned} \tag{6.22}$$

Отсюда легко определить температуру перехода $T_{p0}$, как температуру, при которой обращается в нуль частота фононов с $k = 2p_F$ (т.е. $q = 0$). Полагая в (6.22) $q = 0$ и $\omega_m = 0$, получаем условие:

$$D^{-1}(0,0) = 1 - \lambda\ln\frac{2\gamma E_F}{\pi T_{p0}} = 0 \tag{6.23}$$

что дает формулу типа БКШ для температуры перехода (неустойчивости решетки):

$$T_{p0} = \frac{2\gamma}{\pi}E_F e^{-\frac{1}{\lambda}} \tag{6.24}$$

Записывая (6.23) как:

$$1 - \lambda\ln\frac{E_F}{2\pi T_{p0}} + \lambda\psi\left(\frac{1}{2}\right) = 0 \tag{6.25}$$

[4]Не путать с размерной константой $\lambda$ спаривательного взаимодействия, использовавшейся в предыдущей главе!

и вычитая это выражение из правой части (6.22), получим:

$$\omega_{2p_F}^2 D^{-1}(\omega_m q) = (i\omega_m)^2 - \omega_{2p_F}^2 \lambda \left\{ \ln \frac{T}{T_{p0}} + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2}\left[\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\omega_m}{4\pi T}+\frac{iv_F q}{4\pi T}\right)+\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\omega_m}{4\pi T}-\frac{iv_F q}{4\pi T}\right)-2\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right]\right\} \quad (6.26)$$

Для нахождения дисперсионного уравнения мягкой моды нужно сделать здесь обычное продолжение $i\omega_m \to \omega$ и воспользоваться разложением $\psi$ – функции (которое несложно получить из (6.19)):

$$\psi\left(\frac{1}{2}-\frac{i\omega}{4\pi T}\pm\frac{iv_F q}{4\pi T}\right) \approx -C - \sum_{n=0}^{\infty}\left[\frac{1}{n+1/2}-\frac{1}{n+1}\right] +$$
$$+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n+1/2)^2}\left[-\frac{i\omega}{4\pi T}\pm i\frac{v_F q}{4\pi T}\right] -$$
$$-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n+1/2)^3}\left[-\frac{i\omega}{4\pi T}\pm i\frac{v_F q}{4\pi T}\right]^2 =$$
$$= \psi(1/2) + \frac{\pi}{8}\left(-\frac{i\omega}{T}\pm iv_F q\right) + 7\zeta(3)\left[\frac{\omega^2}{16\pi^2T^2}+\frac{v_F^2 q^2}{16\pi^2T^2}\mp\frac{\omega v_F q}{8\pi^2T^2}\right] \quad (6.27)$$

Тогда получаем уравнение, определяющее спектр мягкой моды в виде:

$$\omega_{2p_F}^2 D^{-1}(q\omega) = \omega^2 - \omega_{2p_F}^2\lambda\left\{\ln\frac{T}{T_{p0}} - \frac{i\pi}{8T}\omega + \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2}\frac{v_F^2}{T^2}q^2 + \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2T^2}\omega^2\right\} = 0 \quad (6.28)$$

Рассматривая $T \sim T_{p0}$ и вводя характерную длину "когерентности" $\xi_0(T)$ как:

$$\xi_0^2(T) = \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2}\frac{v_F^2}{T^2} \quad (6.29)$$

перепишем (6.28) в виде (D.Allender, J.Bray, J.Bardeen, 1974; B.Patton, L.Sham, 1974):

$$\omega^2 - \omega_{2p_F}^2\lambda\left\{\frac{T-T_{p0}}{T_{p0}} - \frac{i\pi}{8T}\omega + \xi_0^2(T)q^2 + \frac{7\zeta(3)\omega^2}{16\pi^2T^2}\right\} = 0 \quad (6.30)$$

Пренебрегая, в первом приближении, затуханием, получаем спектр мягкой моды в виде:

$$\omega^2 \approx \lambda\omega_{2p_F}^2\left\{\frac{T-T_{p0}}{T_{p0}} + \xi_0^2(T)q^2\right\} \quad (6.31)$$

Отсюда и следует описанная выше качественная картина: при $T \to T_{p0}$ (в области $T > T_{p0}$) происходит уменьшение частоты фононов с $k \sim 2p_F$, так что при $T = T_{p0}$ квадрат частоты колебания с $k = 2p_F$ обращается в нуль, становясь отрицательным в области $T < T_{p0}$ (что и соответствует неустойчивости решетки).

Возвращаясь к (6.26), запишем теперь:

$$D(q\omega_m = 0) = -\frac{1}{\lambda}\frac{1}{\frac{T-T_{p0}}{T_{p0}} + \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2}\frac{v_F^2}{T_{p0}^2}q^2} = -\frac{1}{\lambda}\frac{1}{\frac{T-T_{p0}}{T_{p0}} + \xi_0^2(T_{p0})q^2} \quad (6.32)$$

Как отмечалось выше, в связи с (3.101), (3.102), корреляционная функция атомных смещений отличается от функции Грина фонона только знаком и множителем $(\rho\omega_{2p_F}^2)^{-1}$ (где $\rho$ – плотность среды), так что:

$$C(q) = \int dx e^{iqx} < u(x)u(0) > = \frac{T_{p0}}{\lambda\rho\omega_{2p_F}^2}\frac{1}{\frac{T-T_{p0}}{T_{p0}} + \xi_0^2(T_{p0})q^2} \quad (6.33)$$

где множитель $T = T_{p0}$ возник от "суммирования" по мацубаровским частотам (ср. (3.102)), в котором мы оставили только член с $\omega_m = 0$, что соответствует высоким температурам (наиболее сильно флуктуирующий вклад, соответствующий переходу к классической термодинамике). Короче говоря, запишем:

$$C(q) = \frac{A}{(T - T_{p0}) + Bq^2} \qquad \text{где} \qquad A = \frac{T_{p0}^2}{\lambda\rho\omega_{2p_F}^2}, \quad B = T_{p0}\xi_0^2(T_{p0}) \tag{6.34}$$

Тогда в координатном представлении имеем:

$$C(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} C(q) e^{-iqx} = \frac{A}{\pi} \int_0^{\infty} dq \frac{\cos qx}{T - T_{p0} + Bq^2} = = \frac{A}{2\sqrt{B(T - T_{p0})}} \exp\left\{ -\frac{|x|}{\xi(T)} \right\} \tag{6.35}$$

где

$$\xi^2(T) = \xi_0^2(T_{p0}) \frac{T_{p0}}{T - T_{p0}} \tag{6.36}$$

Нетрудно сообразить, что мы получили, таким образом, обычное "среднеполевое" описание фазового перехода II рода при $T = T_{p0}$, а (6.34), (6.35) и (6.36) соответствуют картине невзаимодействующих флуктуаций смещений при $T \sim T_{p0}$, с коррелятором Орнштейна – Цернике [11].

Все что мы сейчас проделали иллюстрирует общий микроскопический метод исследования фазовых переходов II рода с помощью диаграмм. Сначала нужно исследовать флуктуации параметра порядка в квадратичном ("гауссовом") приближении. В данном случае, параметром порядка, фактически, является фурье – компонента смещения атомов решетки с волновым вектором $k = 2p_F$. Если фазовый переход действительно имеет место, то должна существовать температура, при которой система "смягчается" настолько, что статическая ($\omega_m = 0$) корреляционная функция (в импульсном представлении) обращается в бесконечность. Это условие и определяет температуру перехода в картине "среднего поля". Далее нужно изучить длинноволновые флуктуации параметра порядка и их взаимодействие в окрестности точки фазового перехода. Для этого нужно выйти за пределы квадратичного (гауссова) приближения. В рассмотренной модели нужно учесть "ангармонизмы", обусловленные электрон – фононным взаимодействием (например диаграммы для свободной энергии с четырьмя внешними "хвостами" от флуктуаций параметра порядка, которые будут рассмотрены нами в дальнейшем). В результате, фактически, получается соответствующее разложение типа Гинзбурга – Ландау, с помощью которого и проводится исследование термодинамики системы в окрестности температуры перехода. Такая схема рассмотрения уже была реализована выше при рассмотрении сверхпроводимости.

Фактически, для одномерных систем проведенное выше рассмотрение является чрезмерно упрощенным. Мы уже видели (ср. рассуждения в связи с (3.111) и (3.115)), что для $d = 1$ фазовый переход "среднеполевого" типа вообще невозможен. В дальнейшем мы еще вернемся к обсуждению этого вопроса и увидим, что в области температур $T \sim T_{p0}$ в системе возникают развитые флуктуации ближнего порядка, а стабилизация истинного дальнего порядка возникает только при учете трехмерных взаимодействий в системе одномерных цепочек атомов (т.е. в трехмерном анизотропном кристалле).

Пусть теперь в системе есть еще и хаотически распределенные примеси. В этом случае поляризационный оператор определяется графиками, показанными на Рис. 6.4 и записывается как:

$$\Pi(\omega_m k) = 2T \sum_n \int \frac{dp}{2\pi} G(\varepsilon_n p) G(\varepsilon_n - \omega_m p - k) \mathcal{T}(\varepsilon_n, \omega_m, k) \tag{6.37}$$

где

$$G(\varepsilon_n \xi_p) = \frac{1}{i\tilde{\varepsilon}_n - \xi_p}, \qquad \tilde{\varepsilon}_n = \varepsilon_n \left[ 1 + \frac{1}{2\tau|\varepsilon_n|} \right], \quad \frac{1}{2\tau} = \pi\rho v^2 \nu_F \tag{6.38}$$

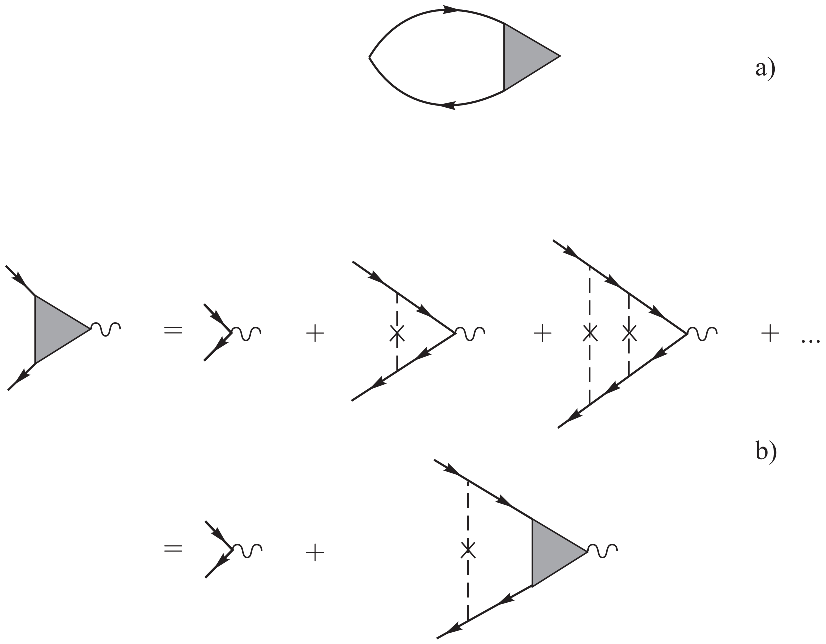



Рис. 6.4: Поляризационный оператор для системы с примесями (a) и соответствующая “треугольная” вершина (b).

а “треугольная” вершина в “лестничном” приближении Рис. 6.4 (b) определяется уравнением:

$$\mathcal{T}(\varepsilon_n, \varepsilon_{n-m}, q) = 1 - \frac{1}{2\pi\tau}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \frac{\mathcal{T}(\varepsilon_n, \varepsilon_{n-m}, q)}{(\xi_p - i\tilde{\varepsilon}_n)(\xi_p - v_F q + i\tilde{\varepsilon}_{n-m})} \tag{6.39}$$

где перешли, как обычно, от интегрирования по $dp$ к интегрированию по $d\xi_p$, ввели обозначение $\varepsilon_{n-m} = \varepsilon_n - \omega_m$ и учли, что $\rho v^2 \nu_F = \frac{1}{2\pi\tau}$. Отсюда сразу же получаем:

$$\mathcal{T}^{-1}(\varepsilon_n, \varepsilon_{n-m}, q) = 1 + \frac{1}{\tau}\theta(\varepsilon_n\varepsilon_{n-m})\frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}\frac{1}{\tilde{\varepsilon}_n + \tilde{\varepsilon}_{n-m} + iv_F q} \tag{6.40}$$

Для упрощения расчетов, мы предполагаем, что примесные линии в “лестнице” на Рис. 6.4 (b) не перебрасывают электрон с одного конца линии Ферми на другой. В противном случае в (6.40) возникает симметризованная сумма членов с $\pm q$.

В результате, поляризационный оператор записывается как[5]:

$$\begin{aligned}\Pi(q\omega_m) &= TN(E_F)\sum_n \int d\xi_p \frac{\mathcal{T}(\varepsilon_n, \varepsilon_{n-m}, q)}{(i\tilde{\varepsilon}_n - \xi_p)(i\tilde{\varepsilon}_{n-m} + \xi_p - v_F q)} = \\ &= -2\pi TN(E_F)\sum_n \theta(\varepsilon_n\varepsilon_{n-m})\frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}\frac{1}{\tilde{\varepsilon}_n + \tilde{\varepsilon}_{n-m} + iv_F q} \times \\ &\times \left\{1 + \frac{1}{\tau}\theta(\varepsilon_n\varepsilon_{n-m})\frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}\frac{1}{\tilde{\varepsilon}_n + \tilde{\varepsilon}_{n-m} + iv_F q}\right\}^{-1}\end{aligned} \tag{6.41}$$

[5] В отличие от аналогичных расчетов, проводившихся в предыдущих главах, здесь нам удобнее сначала вычислить интеграл по $\xi_p$.

что сводится к:

$$\Pi(q\omega_m) = -2\pi T N(E_F)\sum_n \theta[\varepsilon_n(\varepsilon_n-\omega_m)]\frac{sign\varepsilon_n}{2\varepsilon_n-\omega_m+iv_Fq+\frac{2}{\tau}sign\varepsilon_n} \tag{6.42}$$

Далее все преобразования можно провести аналогично тем, которые делались выше при переходе от (6.13) к (6.22), так что получим:

$$\begin{aligned}\Pi(q\omega_m) &= -2\pi T N(E_F)\sum_n \frac{1}{|2\varepsilon_n-\omega_m|+\frac{2}{\tau}-iv_Fq sign\varepsilon_n} = \\ &= -2\pi T N(E_F)\sum_{n>0}\frac{1}{2\varepsilon_n+\omega_m+\frac{2}{\tau}-iv_Fq} - \\ &\quad -2\pi T N(E_F)\sum_{n>0}\frac{1}{2\varepsilon_n+\omega_m+\frac{2}{\tau}+iv_Fq} = \\ &= N(E_F)\ln\frac{2\gamma E_F}{\pi T}+\frac{1}{2}N(E_F)\left\{\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\omega_m}{4\pi T}+\frac{1}{2\pi T\tau}+\frac{iv_Fq}{4\pi T}\right)+\right. \\ &\quad \left.+\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\omega_m}{4\pi T}+\frac{1}{2\pi T\tau}-\frac{iv_Fq}{4\pi T}\right)-2\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right\}\end{aligned} \tag{6.43}$$

Отсюда имеем уравнение для фононной функции Грина:

$$\begin{aligned}\omega_{2p_F}^2 D^{-1}(q\omega_m) &= (i\omega_m)^2-\omega_{2p_F}^2\left\{1-\lambda\ln\frac{2\gamma E_F}{\pi T}+\right. \\ &\quad +\frac{\lambda}{2}\left[\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\omega_m}{4\pi T}+\frac{1}{2\pi T\tau}+\frac{iv_Fq}{4\pi T}\right)+\right. \\ &\quad \left.\left.+\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\omega_m}{4\pi T}+\frac{1}{2\pi T\tau}-\frac{iv_Fq}{4\pi T}\right)-2\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right]\right\} = \\ &= (i\omega_m)^2-\omega_{2p_F}^2\lambda\left\{\ln\frac{T}{T_{p0}}+\right. \\ &\quad +\frac{1}{2}\left[\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\omega_m}{4\pi T}+\frac{1}{2\pi T\tau}+\frac{iv_Fq}{4\pi T}\right)+\right. \\ &\quad \left.\left.+\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\omega_m}{4\pi T}+\frac{1}{2\pi T\tau}-\frac{iv_Fq}{4\pi T}\right)-2\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right]\right\}\end{aligned} \tag{6.44}$$

Отсюда, аналогично (6.23), т.е. из условия $D^{-1}(0,0)=0$, находим уравнение, определяющее температуру $T_p$ пайерлсовского перехода в системе с примесями (Л.Н.Булаевский, М.В.Садовский, 1974):

$$\ln\frac{T_p}{T_{p0}}+\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2\pi T_p\tau}\right)-\psi\left(\frac{1}{2}\right)=0 \tag{6.45}$$

которое по форме идентично с обсуждавшимся выше уравнением (5.157), определяющим критическую температуру сверхпроводящего перехода в системе с магнитными примесями. Таким образом, обычные (немагнитные) примеси (разупорядочение) сильно подавляют температуру пайерлсовского структурного перехода.

## 6.2 Пайерлсовский диэлектрик.

Как уже отмечалось выше, пайерлсовская неустойчивость фононного спектра приводит к возникновению спонтанной деформации решетки (цепочки) с волновым вектором $Q = 2p_F$. Посмотрим, как описывается "конденсированная" фаза, существующая при температурах $T < T_{p0}$. Запишем гамильтониан системы в виде:

$$H = \sum_p \xi_p a_p^+ a_p + \sum_l \omega_k b_k^+ b_k + \sum_{pk} g_k a_{p+k}^+ a_p (b_k + b_{-k}^+) \tag{6.46}$$

где определили константу связи как:

$$g_k = g\sqrt{\frac{\omega_k}{2}} \tag{6.47}$$

поскольку мы здесь используем обозначения [1].

Возникновение пайерлсовской сверхструктуры описывается введением следующего аномального среднего [25], нарушающего трансляционную симметрию исходной решетки:

$$\Delta = g_{2p_F} < b_{2p_F} + b_{-2p_F}^+ > \neq 0 \tag{6.48}$$

где угловые скобки обозначают статистическое среднее. Возникновение такого аномального среднего можно трактовать как бозе – конденсацию фононов в состоянии с квазиимпульсом $Q = 2p_F$. В координатном представлении (6.48) описывает потенциальное поле волны пайерлсовской деформации:

$$V(x) = \Delta e^{i2p_F x} + \Delta^* e^{-i2p_F x} = 2|\Delta|\cos(2p_F x + \phi) \tag{6.49}$$

где $|\Delta|$ представляет собой модуль, а $\phi$ – фазу соответствующего параметра порядка: $\Delta = |\Delta|e^{i\phi}$.

Чтобы найти спектр электрона, движущегося в поле (6.49) нужно, фактически, решить задачу о движении электрона в одномерном периодическом поле. Как это делается хорошо известно из любого курса теории твердого тела. Но посмотрим, как это можно сделать в рамках метода функций Грина. Для некоторой общности рассмотрим движение электрона в периодическом поле с произвольным волновым вектором $Q$:

$$V(x) = \Delta e^{iQx} + \Delta^* e^{-iQx} = 2|\Delta|\cos(Qx + \phi) \tag{6.50}$$

Тогда, ограничиваясь первым порядком по $V$, все можно описать системой уравнений для функций Грина типа уравнений Горькова, показанной графически на Рис. 6.5. В частности, в технике $T = 0$ мы можем записать эту систему в следующем виде:

$$G(\varepsilon p) = G_0(\varepsilon p) + G_0(\varepsilon p)\Delta F(\varepsilon p) \tag{6.51}$$

$$F(\varepsilon p) = G_0(\varepsilon p - Q)\Delta^* G(\varepsilon p) \tag{6.52}$$

где нормальная и аномальная функции Грина (в импульсно – временном представлении) определяются как:

$$G(tp) = -i < T a_p(t) a_p^+(0) > \tag{6.53}$$

$$F(tp) = -i < T a_p(t) a_{p-Q}^+(0) > \tag{6.54}$$

Аномальная функция Грина $F$ (6.54) описывает здесь элементарный процесс переброса $p - Q \to p$, который возникает в периодическом поле (6.50). Система уравнений (6.51), (6.52) легко переписывается в виде:

$$(\varepsilon - \xi_p)G(\varepsilon p) - \Delta F(\varepsilon p) = 1 \tag{6.55}$$

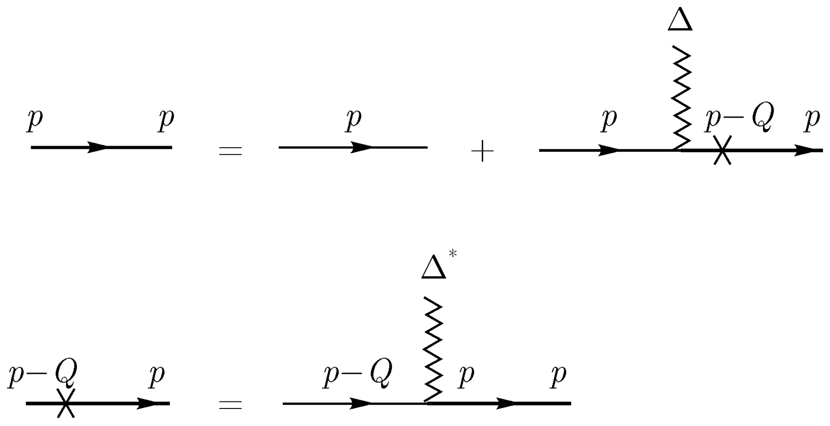



Рис. 6.5: Диаграммное представление “уравнений Горькова” для электрона, движущегося в периодическом поле.

$$(\varepsilon - \xi_{p-Q})F(\varepsilon p) - \Delta^* G(\varepsilon p) = 0 \tag{6.56}$$

решение которой дает:

$$G(\varepsilon p) = \frac{\varepsilon - \xi_{p-Q}}{(\varepsilon - \xi_p)(\varepsilon - \xi_{p-Q}) - |\Delta|^2} \tag{6.57}$$

$$F(\varepsilon p) = \frac{\Delta^*}{(\varepsilon - \xi_p)(\varepsilon - \xi_{p-Q}) - |\Delta|^2} \tag{6.58}$$

Нуль знаменателей (полюс) определяется здесь уравнением:

$$(\varepsilon - \xi_p)(\varepsilon - \xi_{p-Q}) - |\Delta|^2 = 0 \tag{6.59}$$

которое определяет стандартный ответ для спектра “новых” квазичастиц:

$$\varepsilon_{1,2}(p) = \frac{1}{2}(\xi_p + \xi_{p-Q}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\xi_p - \xi_{p-Q})^2 + |\Delta|^2}, \qquad \xi_p = \frac{p^2}{2m} - \mu \tag{6.60}$$

т.е. “зонный” спектр в “двухволновом” приближении [27], который показан на Рис. 6.6. Естественно, что все рассмотрение симметрично относительно $Q \to -Q$.

Для $Q = 2p_F$ уровень Ферми $\mu$ оказывается в точности в центре запрещенной зоны (щели) шириной $2\Delta$, так что система становится *диэлектриком*. При этом в одномерных системах для спектра свободных электронов всегда выполняется условие “нестинга”:

$$\xi_{p-Q} = \xi_{p-2p_F} = -\xi_p \tag{6.61}$$

в чем легко убедиться, взглянув на Рис. 6.7. Тогда спектр (6.60) сводится к виду БКШ:

$$\varepsilon_{1,2}(p) = \pm\sqrt{\xi_p^2 + |\Delta|^2} \tag{6.62}$$

а под $\xi_p$ мы можем, как обычно, понимать спектр, линеаризованный вблизи уровня Ферми.

Часто представляет интерес рассмотрение электронного спектра в приближении сильной связи [27]. Например в модели с интегралом переноса $J$, отличным от нуля только для ближайших соседей (в цепочке), имеем спектр вида:

$$\varepsilon_p = -2J\cos pa, \qquad \xi_p = \varepsilon_p - \mu = -2J\cos pa \tag{6.63}$$

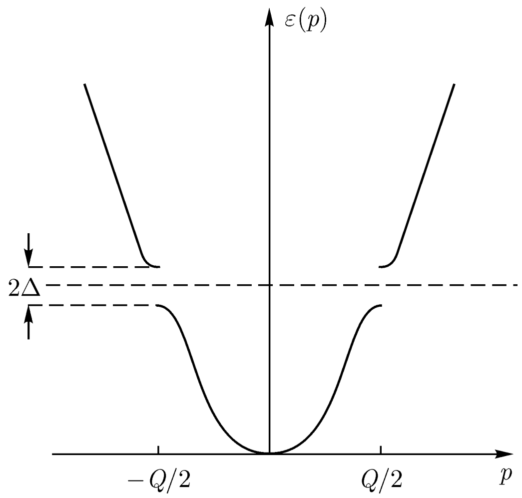



Рис. 6.6: Спектр электрона, движущегося в периодическом поле с волновым вектором $Q$ (“двухволновое” приближение).

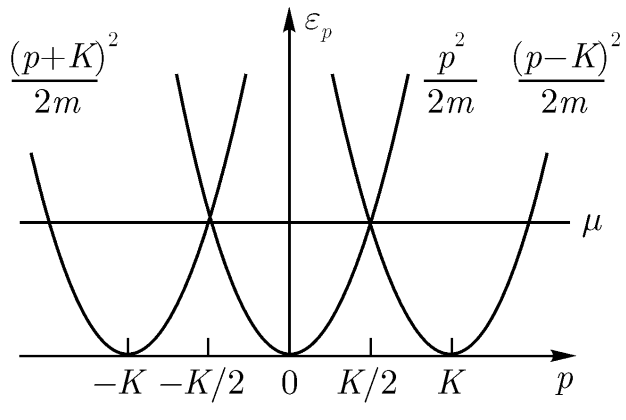



Рис. 6.7: Графическая иллюстрация выполнения условия “нестинга” для одномерного спектра свободных электронов: $K = Q = 2p_F$.

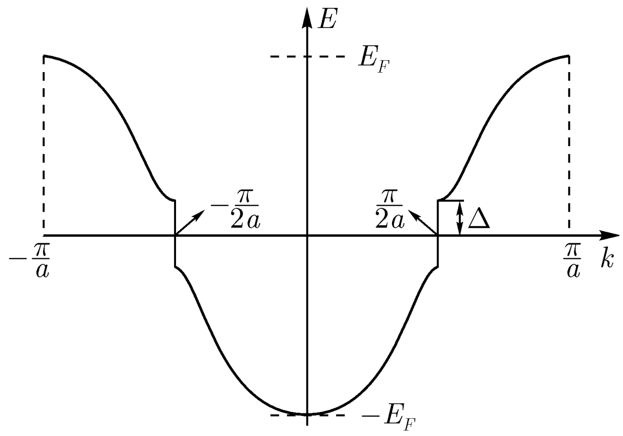



Рис. 6.8: Спектр электронов в пайерлсовском диэлектрике в случае исходного спектра модели сильной связи, для случая удвоения периода.

где $a$ – постоянная решетки (расстояние между атомами в цепочке), а второе равенство справедливо для наполовину заполненной зоны (один электрон проводимости на атом), когда $p_F = \frac{\pi}{2a}$, и уровень Ферми проходит в точности в центре зоны ($E_F = 2J$, если отсчитывать энергии от дна зоны, но $E_F = \mu = 0$, если отсчитывать энергии от уровня Ферми). В этом случае $Q = 2p_F = \frac{\pi}{a}$, что соответствует пайерлсовскому переходу с удвоением периода исходной цепочки. При этом опять выполняется условие “нестинга” в виде:

$$\xi_{p-Q} = -\xi_p, \qquad \varepsilon_{p-\frac{\pi}{a}} = -\varepsilon_p \tag{6.64}$$

Вид спектра после пайерлсовского перехода для этого случая показан на Рис. 6.8. Данный пример типичен для случая *соизмеримого* перехода Пайерлса, когда период возникающей сверхструктуры составляет рациональное отношение с периодом исходной цепочки (в частности, равен целому числу исходных периодов). Случай, когда исходный спектр электронов в цепочке берется, как это делалось выше, в приближении свободных электронов (Рис. 6.7), является хорошей моделью для *несоизмеримого* перехода Пайерлса, когда период новой сверхструктуры никак не связан с периодом исходной цепочки (несоизмерим с ним). В частности, это связано с тем, что в модели свободных электронов уровень Ферми определяется только концентрацией электронов проводимости и никак не связан с периодом исходной решетки. В дальнейшем мы всегда будем рассматривать именно этот последний случай.

Перепишем систему уравнений (6.51), (6.52) в мацубаровской технике:

$$G(\varepsilon_n p) = G_0(\varepsilon_n p) + G_0(\varepsilon_n p)\Delta F(\varepsilon_n p) \tag{6.65}$$

$$F(\varepsilon_n p) = G_0(\varepsilon_n p - Q)\Delta^* G(\varepsilon_n p) \tag{6.66}$$

или (при выполнении условия “нестинга”):

$$G(\varepsilon_n p) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} + \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p}\Delta F(\varepsilon_n p) \tag{6.67}$$

$$F(\varepsilon_n p) = \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p}\Delta^* G(\varepsilon_n p) \tag{6.68}$$

что еще можно переписать и так:

$$(i\varepsilon_n - \xi_p)G(\varepsilon_n p) - \Delta F(\varepsilon_n p) = 1 \tag{6.69}$$

$$(i\varepsilon_n + \xi_p)F(\varepsilon_n) - \Delta^* G(\varepsilon_n p) = 0 \tag{6.70}$$

что по форме (почти!) совпадает с (5.108) и (5.109). Решение этой системы дает:

$$G(\varepsilon_n p) = \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2} \tag{6.71}$$

$$F(\varepsilon_n p) = \frac{\Delta^*}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2} \tag{6.72}$$

что, опять – таки, почти совпадает с (5.111) и (5.112). Отличие только в знаках (5.112) и (6.72).

Как и в теории сверхпроводимости, для пайерлсовского диэлектрика можно ввести матричную функцию Грина вида:

$$\hat{G}^{-1}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \begin{pmatrix} i\varepsilon_n + \xi_p & -\Delta^* \\ -\Delta & i\varepsilon_n - \xi_p \end{pmatrix} \tag{6.73}$$

или ($F^- \equiv F$)

$$\hat{G}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \begin{pmatrix} G & F^- \\ F^+ & \tilde{G} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{++} & G_{+-} \\ G_{-+} & G_{--} \end{pmatrix} \tag{6.74}$$

где обозначения $\pm$ соответствуют "концам" поверхности (линии) Ферми ($\pm p_F$) и очевидным переходам электрона в рассматриваемой системе. Часто говорят о $\pm$ ("правых" или "левых") электронах. В дополнение к (6.69) и (6.70) здесь еще возникают очевидные уравнения:

$$(i\varepsilon_n + \xi_p)\tilde{G}(\varepsilon_n p) - \Delta^* F(\varepsilon_n p) = 1 \tag{6.75}$$

$$(i\varepsilon_n - \xi_p)F^+(\varepsilon_n) - \Delta\tilde{G}(\varepsilon_n p) = 0 \tag{6.76}$$

Из (6.71), после аналитического продолжения $i\varepsilon_n \to \varepsilon + i\delta$, нетрудно (аналогично (5.78)) посчитать плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми, которая имеет тот же вид, что и (5.79) теории БКШ:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N(E_F)} = \begin{cases} \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta^2|}} & \text{при} \quad |\varepsilon| > |\Delta| \\ 0 \quad \text{при} & |\varepsilon| < |\Delta| \end{cases} \tag{6.77}$$

Характерный вид плотности состояний показан на Рис. 6.9. Несмотря на почти полное совпадение полученных здесь выражений с теорией БКШ, из всего предыдущего рассмотрения ясно, что возникающая здесь энергетическая щель $|\Delta|$ имеет *диэлектрическую* природу.

Пока мы еще сделали "полдела" — нужно еще написать уравнения для самосогласованного определения величины $\Delta$, которая пока что введена "руками". Поскольку $\Delta$ определяется аномальным средним (6.48), мы должны выписать (мацубаровские) уравнения движения для операторов $b_Q$ и $b_Q^+$ и усреднить их по Гиббсу. С помощью гамильтониана (6.46), стандартным образом получаем:

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau} - \omega_Q\right) < b_{\pm Q}(\tau) >= -g_Q \sum_p < a^+_{p\mp Q} a_p >= -g_Q \sum_p F^{\mp}(p\tau = -0) \tag{6.78}$$

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \omega_Q\right) < b^+_{\pm Q}(\tau) >= g_Q \sum_p < a^+_{p\pm Q} a_p >= -g_Q \sum_p F^{\pm}(p\tau = -0) \tag{6.79}$$

Отсюда, кстати, сразу же видно, что "фононное" аномальное среднее (6.48) пропорционально "электронным" аномальным средним типа $< a^+_{p\pm Q} a_p >$[6]. В связи с этим иногда говорят, что здесь мы имеем дело с *электрон – дырочным* спариванием.

---

[6]Отсюда же ясно, что в системе возникает CDW — ее параметр порядка есть $< a^+_{p\pm Q} a_p >$. Для фурье – компоненты плотности заряда имеем ($Q = 2p_F$):

$$< \rho_q >= \rho_0 \delta(q) + \rho_1 \delta(q \pm Q), \qquad \rho_1 \sim \sum_p < a^+_{p\pm Q} a_p > \tag{6.80}$$

что и дает $< \rho(x) >= \rho_0 + \rho_1 \cos(2p_F x + \phi)$.

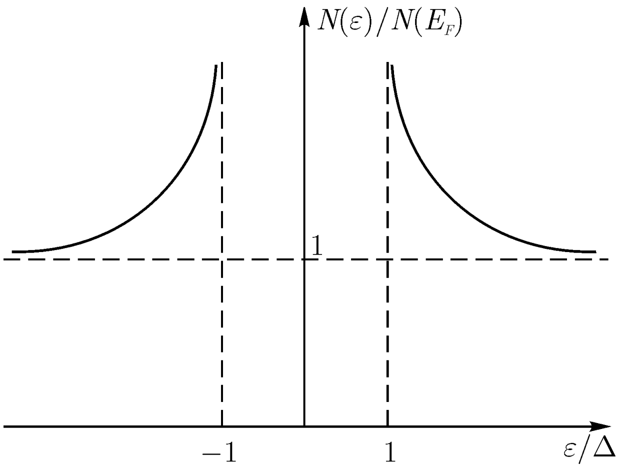



Рис. 6.9: Плотность электронных состояний БКШ – типа в пайерлсовском диэлектрике.

После перехода к фурье – компонентам по мацубаровскому "времени", система (6.78), (6.79) сводится к:

$$(i\omega_m - \omega_Q) < b_{\pm Q} >_{\omega_m} = -g_Q \sum_p \sum_n F^{\mp}(p\varepsilon_n) \tag{6.81}$$

$$(i\omega_m + \omega_Q) < b^+_{\pm Q} >_{\omega_m} = g_Q \sum_p \sum_n F^{\pm}(p\varepsilon_n) \tag{6.82}$$

Отсюда имеем:

$$< b_Q + b^+_{-Q} >_{\omega_m} = -\frac{g_Q}{\omega_m^2 + \omega_Q^2} 2\omega_Q T \sum_p \sum_n F^-(\varepsilon_n p) \tag{6.83}$$

Для $\omega_m = 0$ (бозе – конденсат!) отсюда имеем:

$$< b_Q + b^+_{-Q} >_{\omega_m=0} = -\frac{\lambda\omega_Q}{g_Q} \int d\xi_p T \sum_n F^-(\varepsilon_n p) \tag{6.84}$$

где перешли, как обычно, от суммирования по $p$ к интегрированию по $\xi_p$ и учли определение (6.21). Тогда из (6.48) и (6.84) получаем:

$$\Delta = g_Q < b_Q + b^+_{-Q} >_{\omega_m=0} = -\frac{\lambda}{\omega_Q} \int_{-E_F}^{E_F} d\xi_p T \sum_n F^-(\varepsilon_n p) \tag{6.85}$$

где еще ввели обрезание расходящегося интеграла на энергиях порядка $\pm E_F$, аналогичное обсуждавшемуся выше обрезанию по частотам. Подставляя сюда (6.72) и проводя обычные вычисления, аналогичные выполнявшимся выше в теории сверхпроводимости, получаем уравнение для щели $\Delta$ типа БКШ:

$$1 = \lambda \int_0^{E_F} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}} th \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}}{2T} \tag{6.86}$$

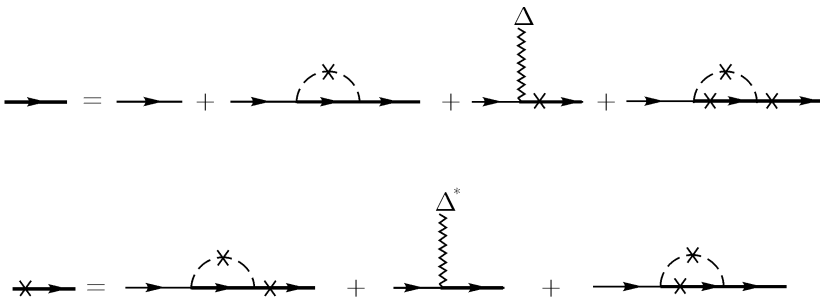



Рис. 6.10: Уравнения Горькова для пайерлсовского диэлектрика с учетом примесного рассеяния.

из которого немедленно следует, что температура пайерлсовского перехода и величина щели при $T = 0$ определяются стандартными выражениями:

$$T_{p0} = \frac{2\gamma}{\pi} E_F e^{-\frac{1}{\lambda}}, \qquad \Delta_0 = \frac{\pi}{\gamma} T_{p0} \tag{6.87}$$

В частности, величина температуры перехода $T_{p0}$, естественно, совпадает с (6.24), полученной из рассмотрения неустойчивости "нормальной" фазы.

Поучительно рассмотреть конденсированную фазу пайерлсовского диэлектрика с учетом рассеяния на немагнитных примесях[7]. Действуем стандартным образом и выписываем систему уравнений Горькова с учетом примесного рассеяния (для случая слабого беспорядка $p_F l \gg 1$), показанную графически на Рис. 6.10 (ср. Рис. 5.8 и последующее рассмотрение для сверхпроводников):

$$\begin{aligned} G(\varepsilon_n p) = G_0(\varepsilon_n p) + G_0(\varepsilon_n p)\Sigma(\varepsilon_n pp)G(\varepsilon_n p) + G_0(\varepsilon_n p)\Delta F(\varepsilon_n p) + \\ + G_0(\varepsilon_n p)\Sigma(\varepsilon_n pp - Q)F(\varepsilon_n p) \end{aligned} \tag{6.88}$$

$$\begin{aligned} F(\varepsilon_n p) = G_0(\varepsilon_n p - Q)\Sigma(\varepsilon_n p - Qp - Q)F(\varepsilon_n p) + G_0(\varepsilon_n p - Q)\Delta^* G(\varepsilon_n p) + \\ + G_0(\varepsilon_n p - Q)\Sigma(\varepsilon_n p - Qp)G(\varepsilon_n p) \end{aligned} \tag{6.89}$$

Все обозначения здесь самоочевидны. Решение этой системы уравнений, с учетом условия "нестинга" $\xi_{p-Q} = -\xi_p$ (при $Q = 2p_F$) имеет следующий вид (ср. (5.137), (5.138), (5.139), (5.140)):

$$G(\varepsilon_n p) = [i\tilde{\varepsilon}_n + \xi_p]Det^{-1} \tag{6.90}$$

$$F(\varepsilon_n p) = \tilde{\Delta}^* Det^{-1} \tag{6.91}$$

где

$$i\tilde{\varepsilon}_n = i\varepsilon_n - \Sigma(\varepsilon_n pp) \equiv i\varepsilon_n - \Sigma_n(\varepsilon_n) \tag{6.92}$$

$$\tilde{\Delta}_n = \Delta + \Sigma(\varepsilon_n p - Qp) \equiv \Delta + \Sigma_a(\varepsilon_n) \tag{6.93}$$

$$Det = (i\tilde{\varepsilon}_n)^2 - \xi_p^2 - |\tilde{\Delta}_n|^2 \tag{6.94}$$

[7] Заодно мы достаточно подробно проведем все вычисления, практически тождественные тем, которые были опущены выше при рассмотрении сверхпроводников с магнитными примесями.

причем, аналогично тому, что получалось в задаче о примесях в сверхпроводнике, и здесь имеем:

$$\Sigma_n(\varepsilon_n) = \rho v^2 \nu_F \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p G(\varepsilon_n \xi_p) = -\frac{\Gamma}{2} \frac{i\tilde{\varepsilon}_n}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_n^2 + |\tilde{\Delta}_n|^2}} \tag{6.95}$$

$$\Sigma_a(\varepsilon_n) = \rho v^2 \nu_F \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p F(\varepsilon_n \xi_p) = -\frac{\Gamma}{2} \frac{\tilde{\Delta}_n}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_n^2 + |\tilde{\Delta}_n|^2}} \tag{6.96}$$

где $\Gamma = \frac{1}{\tau} = 2\pi\rho v^2 \nu_F$. Тогда из (6.92) – (6.96) имеем:

$$i\tilde{\varepsilon}_n = i\varepsilon_n + \frac{\Gamma}{2} \frac{i\tilde{\varepsilon}_n}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_n^2 + |\tilde{\Delta}_n|^2}} \tag{6.97}$$

$$\tilde{\Delta}_n = \Delta_n - \frac{\Gamma}{2} \frac{\tilde{\Delta}_n}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_n^2 + |\tilde{\Delta}_n|^2}} \tag{6.98}$$

Обратите внимание на разные знаки в (6.97) и (6.98), что отличает этот результат от (5.142), (5.143) и (5.145) и делает его аналогичным (5.152), (5.153) (магнитные примеси в сверхпроводниках). Это есть прямое следствие отмеченного выше отличия (6.71), (6.72) от (5.111), (5.112).

Вводя

$$u_n = \frac{\tilde{\varepsilon}_n}{\tilde{\Delta}_n} \tag{6.99}$$

из (6.97) и (6.98) находим:

$$\frac{\varepsilon_n}{\Delta} = u_n \left\{ 1 - \frac{\Gamma}{\Delta} \frac{1}{\sqrt{u_n^2 + 1}} \right\} \tag{6.100}$$

Это уравнение определяет $u_n$ как функцию отношений $\varepsilon_n/\Delta$ и $\Gamma/\Delta$. Зная $u_n$, можно найти:

$$\tilde{\varepsilon}_n = \varepsilon_n + \frac{1}{2}\Gamma \frac{u_n}{\sqrt{u_n^2 + 1}} \tag{6.101}$$

$$\tilde{\Delta}_n = \Delta + \frac{1}{2}\Gamma \frac{1}{\sqrt{u_n^2 + 1}} \tag{6.102}$$

Аналогично (6.85), параметр порядка (щель) $\Delta$ определяется теперь уравнением:

$$\Delta = -\lambda T \sum_n \int d\xi_p F^+(\varepsilon_n \xi_p) \tag{6.103}$$

или

$$1 = -\lambda T \sum_n \int d\xi_p \frac{\frac{\tilde{\Delta}_n}{\Delta}}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\tilde{\Delta}_n|^2} \tag{6.104}$$

Пределы интегрирования пока не пишем умышленно! Вычтем теперь справа и слева выражение, стоящее в правой части при $\Delta \to 0$ и в отсутствие примесей. Тогда получим:

$$1+\lambda T\sum_n\int_{-\infty}^{\infty}d\xi_p\frac{1}{(i\varepsilon_n)^2-\xi_p^2}=$$

$$=-\lambda T\sum_n\int_{-\infty}^{\infty}d\xi_p\left\{\frac{\frac{\tilde{\Delta}_n}{\Delta}}{(i\varepsilon_n)^2-\xi_p^2-|\tilde{\Delta}_n|^2}-\frac{1}{(i\varepsilon_n)^2-\xi_p^2}\right\} \tag{6.105}$$

Пределы тут уже можно взять бесконечными ввиду быстрой сходимости интегралов.

Вычисляя элементарные интегралы, получаем:

$$1-\lambda T\sum_n\frac{\pi}{|\varepsilon_n|}=1-\lambda\ln\frac{2\gamma E_F}{\pi T}=\lambda\ln\frac{T_{p0}}{T}=$$

$$=-\lambda T\sum_n\left\{\frac{\frac{\tilde{\Delta}_n}{\Delta}}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_n^2+|\tilde{\Delta}_n|^2}}-\frac{1}{|\varepsilon_n|}\right\} \tag{6.106}$$

где при вычислении суммы по $n$ в левой части ввели обрезание на $|\varepsilon_n|\sim E_F$, как это было сделано выше в (6.16), а в правой части можно вести суммирование по всем $n$ до бесконечности. В результате, используя (6.99), сразу же получаем:

$$\ln\frac{T_{p0}}{T}=\pi T\sum_n\left\{\frac{1}{|\varepsilon_n|}-\frac{\Delta^{-1}}{\sqrt{1+u_n^2}}\right\} \tag{6.107}$$

где $u_n$ определяется уравнением (6.100). При $\Delta\to 0$ из (6.100) имеем:

$$u_n\Delta\to\varepsilon_n+\Gamma\frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|} \tag{6.108}$$

так что

$$u_n=\Delta^{-1}(\varepsilon_n+\Gamma sign\varepsilon_n) \tag{6.109}$$

Тогда

$$\sqrt{1+u_n^2}\to|u_n|=\frac{1}{\Delta}[|\varepsilon_n|+\Gamma] \tag{6.110}$$

и из (6.107) получаем следующее уравнение для температуры перехода:

$$\ln\frac{T_{p0}}{T_p}=2\pi T_p\sum_{n\geq 0}\left\{\frac{1}{\varepsilon_n}-\frac{1}{\varepsilon_n+\Gamma}\right\} \tag{6.111}$$

что, с использованием (6.19), сводится опять к уже знакомому нам уравнению (5.157), (6.45):

$$\ln\frac{T_{p0}}{T_p}=\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\Gamma}{2\pi T_p}\right)-\psi\left(\frac{1}{2}\right) \tag{6.112}$$

При малых $\Gamma$ отсюда, аналогично (5.160), имеем:

$$T_p\approx T_{p0}-\frac{\pi}{4}\Gamma=T_{p0}-\frac{\pi}{4\tau} \tag{6.113}$$

Для критического значения $\Gamma_c$, при достижении которого $T_p$ обращается в нуль, получаем:

$$\Gamma_c=\frac{1}{\tau_c}=\frac{\pi}{2\gamma}T_{p0}=\frac{\Delta_{00}}{2} \tag{6.114}$$

где $\Delta_{00}$ обозначает здесь щель при $T=0$ и в отсутствие примесей (6.87).

Рассмотрим теперь случай $T=0$. Введем обозначения:

$$\Delta_0 = \Delta(T=0;\Gamma), \qquad \Delta_{00} = \Delta(T=0;\Gamma=0) \tag{6.115}$$

В рассмотренных выше уравнениях, при $T\to 0$, нужно провести замену: $T\sum_n ... \to \int \frac{d\varepsilon}{2\pi}....$ В частности, (6.104) сводится при этом к:

$$1 = -\lambda \int \frac{d\varepsilon}{2\pi}\int d\xi_p \frac{\frac{\tilde{\Delta}_\varepsilon}{\Delta}}{\tilde{\varepsilon}_\varepsilon^2 - \xi_p^2 - |\tilde{\Delta}_\varepsilon|^2} \tag{6.116}$$

где $\tilde{\varepsilon}_\varepsilon$ и $\tilde{\Delta}_\varepsilon$ определяются аналитическим продолжением (6.97) – (6.107):

$$\tilde{\varepsilon}_\varepsilon = \varepsilon + \frac{\Gamma}{2}\frac{u}{\sqrt{1-u^2}} \tag{6.117}$$

$$\tilde{\Delta}_\varepsilon = \Delta_0 - \frac{\Gamma}{2}\frac{1}{\sqrt{1-u^2}} \tag{6.118}$$

$$\frac{\varepsilon}{\Delta_0} = u\left\{1 - \frac{\Gamma}{\Delta}\frac{1}{\sqrt{1-u^2}}\right\} \tag{6.119}$$

Вычитая из правой и левой частей (6.116) выражение, стоящее в правой части его же, взятое при $\tilde{\Delta}_\varepsilon \to \Delta_0$ и $\tilde{\varepsilon}\to\varepsilon$, получим (устремляя к бесконечности пределы интегрирования в быстро сходящихся интегралах):

$$\begin{aligned} 1 + \lambda\int_0^\infty \frac{d\xi_p}{\sqrt{\xi_p^2+\Delta_0^2}} = 1 + \lambda \ln\frac{2E_F}{\Delta_0} = -\lambda\ln\frac{\Delta_{00}}{\Delta_0} = \\ = -\lambda\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{\frac{\tilde{\Delta}_\varepsilon}{\Delta_0}}{\tilde{\varepsilon}^2-\xi_p^2-\tilde{\Delta}_\varepsilon^2} - \frac{1}{\varepsilon^2-\xi_p^2-\Delta_0^2}\right\} = \\ = \frac{\lambda}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\left\{\frac{\frac{\tilde{\Delta}_\varepsilon}{\Delta_0}}{\sqrt{\tilde{\Delta}_\varepsilon^2-\tilde{\varepsilon}^2}} - \frac{1}{\sqrt{\Delta_0^2-\varepsilon^2}}\right\} \end{aligned} \tag{6.120}$$

так что для щели при $T=0$ имеем следующее уравнение:

$$\ln\frac{\Delta_0}{\Delta_{00}} = \int_0^\infty d\varepsilon\left\{\frac{\Delta_0^{-1}}{\sqrt{1-u^2}} - \frac{1}{\sqrt{\Delta_0^2-\varepsilon^2}}\right\} = \int_0^\infty dx\left\{\frac{1}{\sqrt{1-u^2(x)}} - \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\right\} \tag{6.121}$$

В первом интеграле в (6.121) переходим от интегрирования по $x$ к интегрированию по $u$, определяемому уравнением (6.119), что, с учетом $x=\infty \leftrightarrow u_\infty = \infty$, $x = 0 \leftrightarrow u_0 = 0$ при $\frac{\Gamma}{\Delta_0} \leq 1$, и $x = 0 \leftrightarrow u_0 = \sqrt{\frac{\Gamma^2}{\Delta_0^2}-1}$ при $\frac{\Gamma}{\Delta_0} > 1$, приводит (после вычисления элементарных интегралов) к:

$$\ln\frac{\Delta_0}{\Delta_{00}} = \begin{cases} -\frac{\pi}{4}\frac{\Gamma}{\Delta_0} \qquad \text{при} \qquad \frac{\Gamma}{\Delta_0}\leq 1 \\ -\frac{1}{2}arctg\left(\frac{\Gamma^2}{\Delta_0^2}\right)^{-1/2} + \frac{\Delta_0}{\Gamma}\left(\frac{\Gamma^2}{\Delta_0^2}\right)^{1/2} - \ln\left[\frac{\Gamma}{\Delta_0}+\left(\frac{\Gamma^2}{\Delta_0^2}\right)^{1/2}\right] \quad \text{при} \quad \frac{\Gamma}{\Delta_0}\geq 1 \end{cases} \tag{6.122}$$

Отсюда, например, следует, что $\Delta = 0$ для $\Gamma > \Gamma_c = \Delta_{00}/2 = \pi T_{p0}/2\gamma$ (ср. (6.114)).

Плотность электронных состояний определяется как:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N(E_F)} = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p Im \frac{\tilde{\varepsilon}_\varepsilon + \xi_p}{\tilde{\varepsilon}_\varepsilon^2 - \xi_p^2 - \tilde{\Delta}_\varepsilon^2} =$$
$$= Im \frac{\tilde{\varepsilon}_\varepsilon}{\sqrt{\tilde{\Delta}_\varepsilon^2 - \tilde{\varepsilon}_\varepsilon^2}} = Im \frac{u}{\sqrt{1-u^2}} \qquad (6.123)$$

где $u = u\left(\frac{\varepsilon}{\Delta_0}, \frac{\Gamma}{\Delta_0}\right)$ определяется из (6.119). Ясно, что величина (6.123) не равна нулю при $|u| > 1$. Величина же щели в спектре определяется областью $\varepsilon$, в которой (6.123) равна нулю. Тогда из (6.123) нетрудно видеть, что полуширина щели определяется как $Max\varepsilon = \varepsilon_g$, при котором (6.119) еще имеет действительное решение для $u\left(\frac{\varepsilon}{\Delta_0}\right)$, причем такое, что $|u| < 1$. Очевидно, что так определенная величина $\varepsilon_g$ зависит от отношения $\frac{\Gamma}{\Delta_0}$. При $\Gamma = 0$, очевидно, имеем $\varepsilon_g = \Delta_{00}$. Максимизируя правую часть (6.119) находим $u_g\left(\frac{\Gamma}{\Delta_0}\right) = u\left(\frac{\Gamma}{\Delta_0}, \frac{\varepsilon_g}{\Delta_0}\right)$:

$$Max\ u\left[1 - \frac{\Gamma}{\Delta_0}\frac{1}{\sqrt{1-u^2}}\right] \equiv Max\mathcal{F}(u) = Max\frac{\varepsilon}{\Delta_0} = \frac{\varepsilon_g}{\Delta_0} \qquad (6.124)$$

Из условия $\mathcal{F}'(u_g) = 0$ имеем:

$$1 - \frac{\Gamma}{\Delta_0}\frac{1}{\sqrt{1-u_g^2}} - \frac{u_g^2}{(1-u_g)^{3/2}}\frac{\Gamma}{\Delta_0} = 0 \qquad (6.125)$$

так что

$$(1-u_g^2)^{3/2} = \frac{\Gamma}{\Delta_0}, \qquad u_g^2 < 1 \qquad (6.126)$$

откуда следует:

$$u_g = \sqrt{1 - \left(\frac{\Gamma}{\Delta_0}\right)^{2/3}} \qquad (6.127)$$

Подставляя (6.127) в (6.119), получаем окончательно:

$$\varepsilon_g = \Delta_0\left\{1 - \left(\frac{\Gamma}{\Delta_0}\right)^{2/3}\right\}^{3/2} \qquad (6.128)$$

Таким образом, имеем $\varepsilon_g = 0$ при $\frac{\Gamma}{\Delta_0} \geq 1$, когда плотность состояний становится “бесщелевой”, несмотря на то, что (параметр порядка) $\Delta_0 \neq 0$. Соответствующая область определяется (при $T = 0$) неравенством:

$$\Delta_0 \leq \Gamma \leq \frac{\Delta_{00}}{2} \qquad (6.129)$$

При $\Gamma = \Delta_0$ из (6.122) следует $\Delta_0 = \exp\left(-\frac{\pi}{4}\right)\Delta_{00}$, так что соответствующее $\Gamma = 2\exp\left(-\frac{\pi}{4}\right)\Gamma_c \approx 0.91\Gamma_c$, что и определяет узость бесщелевой области на фазовой диаграмме[8].

[8]Все эти результаты и метод их получения непосредственно переносятся на задачу о магнитных примесях в сверхпроводниках, обсуждавшуюся в предыдущей главе. Фактически впервые они возникли при рассмотрении именно этой задачи теории сверхпроводимости (А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, 1960)

## 6.3 Разложение Гинзбурга – Ландау для пайерлсовского перехода.

Для области температур $T > T_{p0}$, аналогично тому, как это было сделано для сверхпроводников, можно провести разложение свободной энергии системы, испытывающей пайерлсовский структурный переход, в ряд по степеням параметра порядка:

$$\Delta_Q = g_Q < b_Q + b_Q^+ >, \qquad Q \sim 2p_F \tag{6.130}$$

Сразу будем работать в статическом приближении $\omega_m = 0$.

Нашей целью является получение микроскопических значений коэффициентов в разложении для разности свободных энергий “конденсированной” и “нормальной” фаз следующего вида:

$$F(\Delta_Q;\ T) - F(0;\ T) = a(Q)|\Delta_Q|^2 + b|\Delta_Q|^4 + \cdots \tag{6.131}$$

Сам вид разложения (6.131) следует из общей теории Ландау фазовых переходов II рода [11].

Вклады от (6.130) возникают из фононной части гамильтониана (6.46):

$$H_{ph} = \sum_Q \omega_Q b_Q^+ b_Q \tag{6.132}$$

и части электрон – фононного взаимодействия:

$$H_{int} = \sum_{pQ} \Delta_Q a_{p+Q}^+ a_p \tag{6.133}$$

Оставляя вклад только от одной моды с фиксированным $Q$, имеем:

$$< H_{ph} >= \omega_Q < b_Q^+ b_Q + b_{-Q}^+ b_{-Q} >= \omega_Q \frac{|\Delta_Q|^2}{2g_Q^2} = \frac{N(E_F)}{\lambda}|\Delta_Q|^2 \tag{6.134}$$

Тогда, пользуясь стандартным петлевым разложением свободной энергии [1] в ряд по степеням $H_{int}$, немедленно получим разложение, показанное на Рис. 6.11. Ясно, что вклад Рис. 6.11 (a) определяют вклад $a(Q)|\Delta_Q|^2$, а график Рис. 6.11 (b) дает $b|\Delta_Q|^4$. При вычислениях следует помнить [1], что вклад графика Рис. 6.11 (a) нужно умножить на дополнительный фактор 1/2, вклад Рис. 6.11 (b) на 1/4 соответственно. Кроме того, при вычислении петель нужно учесть вклады от обоих “концов” поверхности (линии) Ферми, что дает дополнительный фактор 2.

Фактически, все расчеты, связанные с вычислением $a(Q)$ уже были проведены в связи с (6.10) – (6.32). Поэтому сразу можем написать (с учетом $Q = 2p_F + q$, $\omega_m = 0$ и $\xi_{p-2p_F} = -\xi_p$):

$$\frac{1}{2}[\text{Рис. 6.11 (a)}] = -T\sum_n \int \frac{dp}{2\pi} G_0(\varepsilon_n \xi_p) G_0(\varepsilon_n,\ -\xi_p + v_F q) =$$

$$= N(E_F)\left\{-\ln\frac{2\gamma E_F}{\pi T} + \frac{1}{2}\left[\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{iv_F q}{4\pi T}\right) + \psi\left(\frac{1}{2} - \frac{iv_F q}{4\pi T}\right) - 2\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right]\right\} \tag{6.135}$$

Тогда имеем:

$$a(q) = N(E_F)\left\{\frac{1}{\lambda} - \ln\frac{2\gamma E_F}{\pi T} + \frac{1}{2}\left[\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{iv_F q}{4\pi T}\right) + \psi\left(\frac{1}{2} - \frac{iv_F q}{4\pi T}\right) - 2\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right]\right\} \tag{6.136}$$

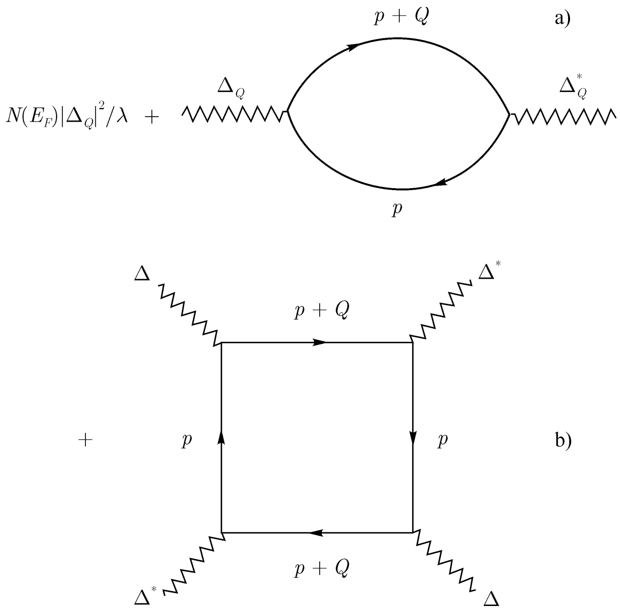



Рис. 6.11: Графическое представление разложения Гинзбурга – Ландау для пайерлсовского перехода.

При вычислении коэффициента $b$ сразу пренебрегаем его зависимостью от $q$, так что имеем:

$$b = \frac{1}{4}[\text{Рис. 6.11 (b)}] = \frac{1}{2}T\sum_n \int \frac{dp}{2\pi} G_0^2(\varepsilon_n \xi_p) G_0^2(\varepsilon_n,\ -\xi_p) \tag{6.137}$$

или

$$b = \frac{1}{2}TN(E_F)\int \frac{d\xi_p}{2\pi i}2\pi i \sum_n \frac{1}{(i\varepsilon_n - \xi_p)^2}\frac{1}{(i\varepsilon_n + \xi_p)^2} = -TN(E_F)2\pi i \sum_n \frac{sign\varepsilon_n}{(2i\varepsilon_n)^3} =$$
$$= \frac{N(E_F)}{16\pi^2T^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n+1/2)^3} = \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2T^2}N(E_F) \tag{6.138}$$

Вернемся к анализу $a(q)$, задаваемому (6.136). Проводя разложение по степеням $q$ (как при выводе (6.28)), получаем:

$$a(q) = N(E_F)\left\{\ln\frac{T}{T_{p0}} + \frac{1}{2}\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{iv_Fq}{4\pi T}\right) + \frac{1}{2}\psi\left(\frac{1}{2} - \frac{iv_Fq}{4\pi T}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right)\right\} \approx$$
$$\approx N(E_F)\left\{\frac{T - T_{p0}}{T_{p0}} + \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2T^2}v_F^2q^2\right\} =$$
$$= N(E_F)\left\{\frac{T - T_{p0}}{T_{p0}} + \xi_0^2(T)q^2\right\} \tag{6.139}$$

где воспользовались также обозначением (6.29) для длины “когерентности”.

В итоге, разложение Гинзбурга – Ландау для пайерлсовского перехода имеет вид:

$$F(\Delta_Q;\ T) - F(0;\ T) = N(E_F)\frac{T-T_{p0}}{T_{p0}}|\Delta_Q|^2 + N(E_F)\xi_0^2(T_{p0})|\Delta_Q|^2(Q-2p_F)^2 + \\ + \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2T^2}N(E_F)|\Delta_Q|^4 \tag{6.140}$$

Отсюда, кстати, ясно, что введенная выше корреляционная длина (6.36), действительно является корреляционной длиной флуктуаций параметра порядка при $T \sim T_{p0}$ в гауссовом приближении.

При наличии примесей все вычисления для $a(q)$ вполне аналогичны проделанным выше при выводе (6.43) (достаточно взять частный случай $\omega_m = 0$). В результате получаем:

$$a(q) = N(E_F)\left\{\ln\frac{T}{T_{p0}} + \frac{1}{2}\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2\pi T\tau}+\frac{iv_Fq}{4\pi T}\right) + \frac{1}{2}\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2\pi T\tau}-\frac{iv_Fq}{4\pi T}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right)\right\} \tag{6.141}$$

Соответственно, при $v_Fq \ll 4\pi T$ имеем:

$$a(q) \approx N(E_F)\left\{\frac{T-T_p}{T_p} + \frac{B}{16\pi^2T^2}v_F^2q^2\right\} \tag{6.142}$$

где $T_p$ определяется уже хорошо известным нам уравнением (6.45)

$$\ln\frac{T_p}{T_{p0}} + \psi\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2\pi T_p\tau}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) = 0 \tag{6.143}$$

При этом константа $B$ в (6.142) определяется как:

$$B = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\left(n+\frac{1}{2}+\frac{1}{2\pi T\tau}\right)^3} = -\frac{1}{2}\psi^{(2)}\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2\pi T\tau}\right) \tag{6.144}$$

Соответственно, с учетом примесей, можно получить следующие асимптотики для "длины когерентности":

$$\xi_0^2(T) = -\frac{v_F^2}{32\pi^2T^2}\psi^{(2)}\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2\pi T\tau}\right) \approx \\ \approx \begin{cases} \frac{7\zeta(3)v_F^2}{16\pi^2T^2} & \text{при} \quad \frac{1}{\tau} \ll 4\pi T \\ v_F^2\tau^2 & \text{при} \quad \frac{1}{\tau} \gg 4\pi T \end{cases} \tag{6.145}$$

Естественно, что везде предполагается, что $\tau > \tau_c = \frac{\gamma}{\pi T_{p0}} = 2\Delta_{00}^{-1}$. Что касается ГЛ коэффициента $b$ в системе с примесями, то его вычисление является достаточно громоздким и мы его опускаем.

## 6.4 Волны зарядовой и спиновой плотности в многомерных системах, экситонный изолятор.

Может возникнуть вопрос — зачем мы столь подробно рассматривали задачу о пайерлсовском переходе? Задача рассматривалась одномерная, а в одномерных системах, как мы убедились выше, фазовый переход (упорядочение), строго говоря, невозможен. В этом смысле, рассматривавшийся выше подход, основанный на описании фазового перехода в приближении самосогласованного поля (в пренебрежении флуктуациями параметра порядка), кажется совершенно необоснованным. Дело, однако, в том, что в "реальной жизни" пайерлсовский переход экспериментально наблюдается в целом ряде *квазиодномерных* систем, где даже слабое взаимодействие электронов (или параметра порядка) на соседних "цепочках" атомов (эффекты трехмерности) приводят к стабилизации этого перехода[9].

Более важно сейчас для нас другое — теоретическая схема, столь подробно описанная выше, почти целиком (или с небольшими изменениями) переносится на описание структурных и магнитных фазовых переходов в двумерных и трехмерных системах, обладающих свойством "нестинга" поверхностей Ферми (или их конечных участков) [6]. Аналогичным образом описывается и фазовый переход в модели так называемого "экситонного изолятора" — одной из базовых моделей в теории переходов металл – диэлектрик. Дело в том, что в условиях, когда электронный спектр $\varepsilon(\mathbf{p})$ удовлетворяет условию "нестинга" вида:

$$\varepsilon(\mathbf{p}+\mathbf{Q}) = -\varepsilon(\mathbf{p}) \tag{6.146}$$

где $\mathbf{Q}$ – некоторый вектор (нестинга) в обратном пространстве, функции отклика в соответствующей (многомерной) системе (поляризационный оператор, петля и.т.п.) описываются практически теми же формулами, что и в одномерном случае. Соответственно, такие системы оказываются неустойчивыми к образованию волн зарядовой (CDW) плотности (деформации решетки) с волновым вектором $\mathbf{Q}$, если доминирующую роль играет электрон – фононное взаимодействие. Если доминирует электрон – электронное взаимодействие (отталкивание), то, как правило, в таких системах аналогичная неустойчивость, как мы увидим ниже, возникает в "спиновом канале" и в системе возникает волна спиновой плотности (SDW).

Условие (6.146) выполняется на всей поверхности Ферми, например, в простейшей модели электронного спектра в приближении сильной связи с интегралом переноса $J$, отличным от нуля, только для ближайших соседей в квадратной решетки:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = -2J(\cos p_x a + \cos p_y a) \tag{6.147}$$

Условие (6.146) в этом случае выполняется для $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ ($a$ – постоянная решетки), а поверхность Ферми, для случая полузаполненной зоны (один электрон проводимости на атом), представляет собой квадрат, показанный на Рис. 6.12 (a). Видим, что при "переносе" на вектор $\mathbf{Q}$ противоположные участки поверхности Ферми полностью совмещаются, что и приводит к появлению логарифмических особенностей "одномерного" типа в функциях отклика, а вся поверхность Ферми оказывается "закрытой" диэлектрической щелью.

Может встретиться ситуация, когда при переносе на вектор $\mathbf{Q}$ совмещаются только некоторые участки поверхности Ферми, как это показано на Рис. 6.12 (b). Тогда неустойчивость спектра все равно возникает, но энергетическая щель в спектре "открывается" только на этих участках поверхности Ферми, а остальные ее части оказываются незатронутыми. Подобные явления наблюдаются в некоторых "слоистых" соединениях переходных металлов ($NbSe_2$, $TaS_2$ и др.) [28]. В некоторых из них (например для $T-TaS_2$) происходит практически полный переход металл – диэлектрик (из – за сильного "нестинга"), так что щель "закрывает" почти всю поверхность Ферми. В других ($H-NbSe_2$) поверхность Ферми "закрывается" только частично, так что система остается металлом за счет "открытых" участков поверхности Ферми. Однако, переход с образованием CDW проявляется в особенностях температурного поведения электросопротивления, также как и в термодинамических характеристиках (например в теплоемкости).

[9] С основными результатами ранних экспериментальных и теоретических исследований таких систем можно ознакомиться по обзору: Л.Н.Булаевский. УФН **115**, 263 (1975).

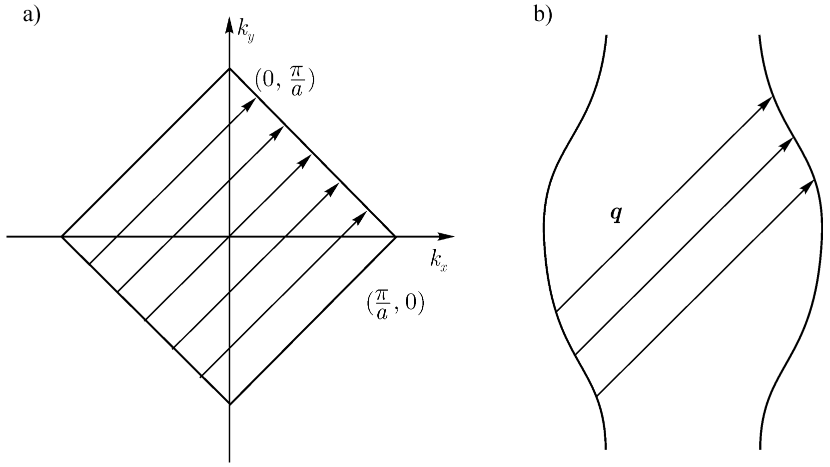



Рис. 6.12: "Нестинг" поверхностей Ферми в двумерной системе: (a) – полузаполненная зона приближения сильной связи с $Q = (\pi/a, \pi/a)$, (b) – общий случай.

Аналогичные явления происходят и в замечательной модели "экситонного изолятора" (Л.В.Келдыш, Ю.В.Копаев, 1964). Эта модель основана на картине электронного спектра, показанной на Рис. 6.13. Суть дела здесь в наличии перекрывающихся зон электронов и дырок. Такая зонная структура (при достаточно малом перекрытии зон) характерна для так называемых полуметаллов. Из Рис. 6.13 видно, что в обоих случаях (a) и (b) существуют электронные и дырочные "карманы" на поверхности Ферми и выполняется условие "нестинга" вида:

$$\varepsilon_1(\mathbf{p}) = -\varepsilon_2(\mathbf{p}) \qquad \text{для спектра (a)} \tag{6.148}$$

$$\varepsilon_1(\mathbf{p}) = -\varepsilon_2(\mathbf{p}+\mathbf{Q}) \qquad \text{для спектра (b)} \tag{6.149}$$

Тогда в системе возникает неустойчивость на нулевом волновом векторе для случая (a) или на конечном векторе $\mathbf{Q}$ для случая (b), связанная с образованием *электрон – дырочных* пар, возникающих за счет всегда существующего притяжения противоположно заряженных электронов и дырок (как для обычных экситонов Ванье – Мотта), с последующей их "бозе – конденсацией"(иногда говорят о бозе – конденсации "экситонов"). Качественно, ситуация очень похожа на образование куперовских пар в сверхпроводниках, только электрон – дырочные пары, естественно, электронейтральны (незаряжены), но в спектре опять образуется энергетическая щель на уровне Ферми, связанная с таким фазовым переходом, как это показано (для случая (a)) на Рис. 6.14.В результате, система становится экситонным диэлектриком. В случае неустойчивости на конечном волновом векторе $\mathbf{Q}$, определяемом зонной структурой типа Рис. 6.13 (b), в системе образуется и волна зарядовой (CDW) или спиновой плотности (SDW).

Математический анализ этой модели вполне аналогичен задаче БКШ или, еще в большей степени, проведенному выше рассмотрению пайерлсовского перехода. Поэтому здесь мы ограничимся только схематическим рассмотрением[10]. Для конкретности обсудим случай спектра Рис. 6.13 (a), когда спектр электронов и дырок имеет

[10]Детальное рассмотрение экситонной неустойчивости и различных ее следствий можно найти в обзоре: Ю.В.Копаев. Труды ФИАН **86**, 3 (1975) и в книге [14]

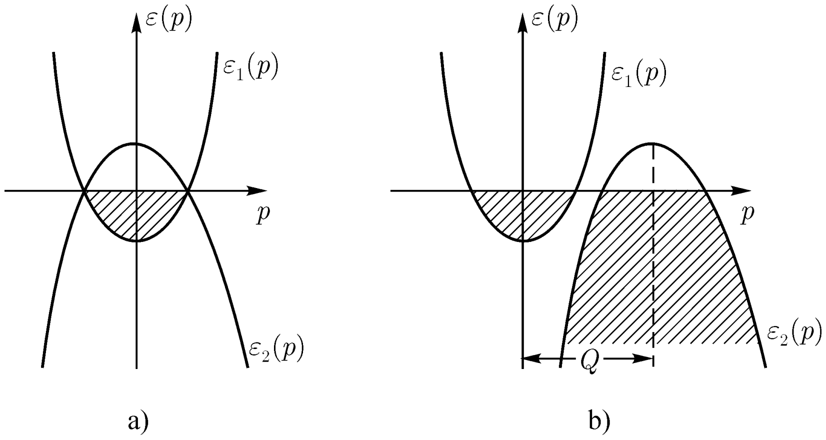



Рис. 6.13: Электронный спектр исходного полуметалла в модели экситонного изолятора: (a) – прямое перекрытие зон, (b) – общий случай, экстремумы перекрывающихся зон раздвинуты на вектор **Q**.

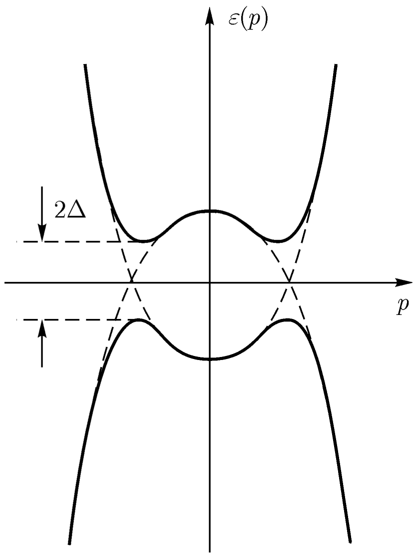
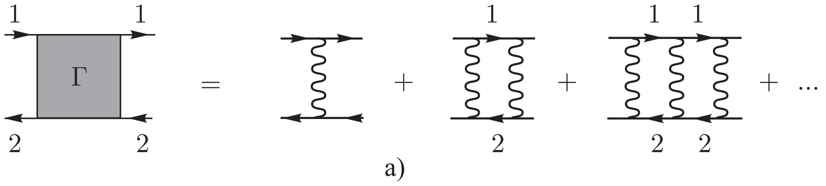



Рис. 6.14: Электронный спектр экситонного изолятора в модели с прямым перекрытием электронной и дырочной зон.



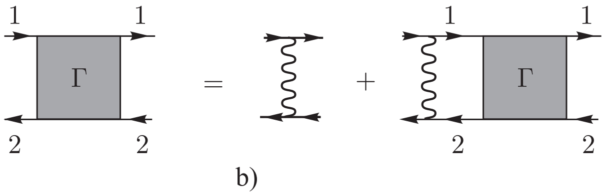


Рис. 6.15: Вершинная часть, описывающая "экситонную" неустойчивость: (a) – лестничное приближение для взаимодействия частицы и дырки, (b) – интегральное уравнение для вершины.

простейший вид:

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{p}) = \pm\left(\frac{p^2}{2m_{1,2}} - \frac{p_F^2}{2m_{1,2}}\right) \tag{6.150}$$

Экситонная неустойчивость определяется (аналогично куперовской неустойчивости) суммой лестничных диаграмм в канале частица – дырка, показанной на Рис. 6.15 (a). Все вычисления вполне аналогичны проведенным выше в связи с выводом (5.15) – (5.17), и мы получаем для вершины, определяемой интегральным уравнением Рис. 6.15 (b), выражение типа (5.17):

$$\Gamma(q=0,\omega) = \frac{\lambda}{1+\lambda\left(\ln\left|\frac{2\omega_c}{\omega}\right| - i\frac{\pi}{2}\right)} \tag{6.151}$$

Здесь $\omega_c$ – частота обрезания логарифмической расходимости $\sim E_F$, $q$ и $\omega$ – суммарные импульс и энергия в системе $e-h$. Безразмерная константа связи $\lambda < 0$ (притяжение!). Для модели экранированного кулоновского $e-h$ – взаимодействия, можно показать, что:

$$\lambda = \frac{me^2}{2\pi p_F}\ln\frac{\kappa_D^2}{2p_F^2} \tag{6.152}$$

Притяжение в канале частица – дырка приводит к возникновению в (6.151) полюса на мнимой частоте $\omega = i\Omega$, где (ср. (5.19)):

$$\Omega = 2\omega_c e^{-\frac{1}{|\lambda|}} \tag{6.153}$$

что и указывает на неустойчивость системы к образованию $e-h$ пар ("экситонов") из электронов и дырок разных зон вблизи их (накладывающихся друг на друга!) поверхностей Ферми.

Чтобы найти спектр возбуждений системы в "конденсированной" фазе, нужно действовать аналогично теории БКШ или пайерлсовского диэлектрика. Запишем взаимодействие частиц из разных зон как:

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{pp}\mathbf{q}'} V(\mathbf{q})a^+_{1\sigma}(\mathbf{p}+\mathbf{q})a^+_{2\sigma'}(\mathbf{p}'-\mathbf{q})a_{2\sigma'}(\mathbf{p}')a_{1\sigma}(\mathbf{p}) \tag{6.154}$$

где явно выписаны спиновые и зонные индексы. Выделяя "наиболее расходящиеся" вклады в амплитуду рассеяния (вершинную часть), соответствующие рассеянию электронов из зоны 1 на дырках из зоны 2, можно привести этот гамильтониан к квадратичному виду, вводя соответствующие аномальные средние:

$$H_{int} \sim a^{+}_{1\sigma}(\mathbf{p}')a^{+}_{2\sigma'}(\mathbf{p})a_{2\sigma'}(\mathbf{p}')a_{1\sigma}(\mathbf{p}) \rightarrow < a^{+}_{2\sigma'}(\mathbf{p})a_{1\sigma}(\mathbf{p}) > a^{+}_{1\sigma}(\mathbf{p}')a_{2\sigma'}(\mathbf{p}') \qquad (6.155)$$

Тогда его можно диагонализовать $u - v$ преобразованием Боголюбова, аналогично тому, как это делается в теории БКШ [11]. Но можно написать и соответствующие уравнения Горькова для гриновских функций обеих зон $G_1(\varepsilon\mathbf{p})$ и $G_2(\varepsilon\mathbf{p})$, вводя также аномальные функции Грина $F$ и $F^+$, "перемешивающие" зоны:

$$F(\mathbf{r}_1t_1;\mathbf{r}_2t_2) = -i < T\psi_2(\mathbf{r}_2t_2)\psi_1^+(\mathbf{r}_1t_1) > \qquad (6.156)$$

$$F^+(\mathbf{r}_1t_1;\mathbf{r}_2t_2) = -i < T\psi_1(\mathbf{r}_1t_1)\psi_2^+(\mathbf{r}_2t_2) > \qquad (6.157)$$

Далее можно выписать уравнения движения, например для $G_1$, и оставить в "правой части" только вклады типа (6.155). Аналогично нужно поступить и с $F$. В итоге возникают уравнения Горькова вида:

$$(\varepsilon - \varepsilon_1(\mathbf{p}))G_1(\varepsilon\mathbf{p}) - \Delta F(\varepsilon\mathbf{p}) = 1 \qquad (6.158)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_2(\mathbf{p}))F(\varepsilon\mathbf{p}) - \Delta^* G_1(\varepsilon\mathbf{p}) = 0 \qquad (6.159)$$

где

$$\Delta(\mathbf{p}) = i\int\frac{d\mathbf{p}'d\varepsilon}{(2\pi)^4}V(\mathbf{p}-\mathbf{p}')F(\mathbf{p}'\varepsilon) \qquad (6.160)$$

Решение системы уравнений (6.158) и (6.159) имеет вид:

$$G_1(\varepsilon\mathbf{p}) = \frac{\varepsilon - \varepsilon_2(\mathbf{p})}{\varepsilon^2 - (\varepsilon_1(\mathbf{p}) + \varepsilon_2(\mathbf{p}))\varepsilon + \varepsilon_1(\mathbf{p})\varepsilon_2(\mathbf{p}) - |\Delta(\mathbf{p})|^2} \qquad (6.161)$$

$$F(\varepsilon\mathbf{p}) = \frac{\Delta^*(\mathbf{p})}{\varepsilon^2 - (\varepsilon_1(\mathbf{p}) + \varepsilon_2(\mathbf{p}))\varepsilon + \varepsilon_1(\mathbf{p})\varepsilon_2(\mathbf{p}) - |\Delta(\mathbf{p})|^2} \qquad (6.162)$$

откуда возникает спектр элементарных возбуждений:

$$E_{1,2}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}[\varepsilon_1(\mathbf{p}) + \varepsilon_2(\mathbf{p})] \pm \sqrt{\frac{1}{4}[\varepsilon_1(\mathbf{p}) - \varepsilon_2(\mathbf{p})]^2 + |\Delta(\mathbf{p})|^2} \qquad (6.163)$$

Решение уравнения для щели дает, как и выше в теории БКШ, $\Delta = \Omega$, где $\Omega$ определено в (6.153).

Таким образом мы получаем *диэлектрический* спектр, показанный на Рис. 6.14, а рассмотренный механизм его образования, как уже отмечалось выше, рассматривается в качестве одного из "базовых" в теории переходов металл – диэлектрик. Каковы основные физические свойства экситонного изолятора? На первый взгляд здесь существует прямая аналогия с БКШ сверхпроводником — в системе возникают нейтральные электрон – дырочные пары, которые образуют бозе – конденсат. Поэтому изначально считалось, что такой диэлектрик может обладать аномальными свойствами, связанными с возможной сверхтекучестью $e-h$ пар (что могло – бы проявиться, например, в явлении "сверхтеплопроводности"). Однако, специальные исследования показали, что никаких "сверхсвойств" в данной модели не возникает, и мы имеем дело с более или менее обычным диэлектриком. К сожалению, в "чистом виде" состояние экситонного диэлектрика наблюдается довольно редко. Повидимому, это связано с тем, что точные свойства "нестинга" типа (6.148), (6.149) с полным "наложением" электронной и дырочной поверхностей Ферми, трудно достижимы, а отклонения от точного выполнения этих условий приводят к подавлению экситонной неустойчивости. Кроме того, аналогично случаю пайерлсовского перехода, нормальные примеси (беспорядок) также приводят к подавлению этой неустойчивости. В тоже время, с переходами в состояние типа экситонного изолятора в ряде работ связывается возникновение различных типов (зарядового и магнитного упорядочения) в некоторых реальных системах.

До сих пор рассматривалось взаимодействие типа притяжения. Оказывается, что даже в случае отталкивательного взаимодействия, в системах с "нестингом" поверхностей Ферми возникают неустойчивости, но в "спиновом канале", ведущие не к CDW, но к переходу в состояние с SDW (A.W.Overhauser, 1965). Для того, чтобы понять это явление, вернемся к полученным выше формулам (2.13), (2.14) для магнитной восприимчивости в системе с "хаббардовским" взаимодействием:

$$\chi(\mathbf{q}\omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}\omega)}{1 + U\Pi_0(\mathbf{q}\omega)} = \frac{\chi_0(\mathbf{q}\omega)}{1 - \frac{4U}{g^2\mu_B^2}\chi_0(\mathbf{q}\omega)} \tag{6.164}$$

Напомним, что в соответствии с принятыми нами определениями $\Pi_0(\mathbf{q}0) < 0$, а с учетом $g = 2$, можно написать $\chi_0 = -\mu_B^2\Pi_0$.

В одномерных, а также в двумерных и трехмерных системах с "нестингом", магнитная восприимчивость $\chi_0 \sim \Pi_0(\mathbf{q})$ имеет логарифмическую особенность при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$, где $\mathbf{Q}$ – вектор нестинга. Соответственно, в случае отталкивания ($U > 0$), полная восприимчивость (6.164) имеет полюс (расходимость), того же типа, что имеется в зарядовой функции отклика (диэлектрической проницаемости) в случае притяжения (экситонный изолятор). Здесь эта особенность указывает на тенденцию к магнитному упорядочению — образованию SDW с волновым вектором $\mathbf{Q}$. Неустойчивость опять возникает даже для сколь угодно слабого отталкивания $U$. Конечно, при неполном "нестинге" (или даже в его отсутствие) может оказаться, что для возникновения такой неустойчивости требуется достаточно сильное взаимодействие, так чтобы выполнялось условие:

$$U|\Pi_0(\mathbf{Q}, 0)| > 1 \tag{6.165}$$

Это условие применимо и в теории коллективизированного ферромагнетизма, когда $\mathbf{Q} = 0$. Тогда имеем $\Pi_0(\mathbf{q} \to 0, 0) = -N(E_F)$, так что (6.165) сводится к:

$$UN(E_F) > 1 \tag{6.166}$$

что дает известный критерий Стонера для возникновения ферромагнитного упорядочения.

Формальная сторона дела здесь также аналогична рассмотренному выше случаю пайерлсовского перехода. Для простоты рассмотрим опять одномерный случай и хаббардовское взаимодействие $Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$. В импульсном представлении гамильтониан Хаббарда можно записать как ($L$ – длина системы):

$$H = \sum_{k\sigma}(\varepsilon_k - \mu)a^+_{k\sigma}a_{k\sigma} + \frac{U}{L}\sum_{kk'q} a^+_{k\uparrow}a_{k+q\uparrow}a^+_{k'\downarrow}a_{k'-q\downarrow} \tag{6.167}$$

Спиновая плотность в точке $x$ определяется как:

$$S^z(x) = \frac{1}{2}[c^+_\uparrow(x)c_\uparrow(x) - c^+_\downarrow(x)c_\downarrow(x)] =$$

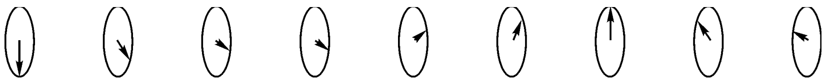


Рис. 6.16: "Геликоидальная" волна спиновой плотности.

$$= \frac{1}{2L}\sum_{kk'}[c^+_{k\uparrow}c_{k'\uparrow} - c^+_{k\downarrow}c_{k'\downarrow}]e^{-i(k-k')x} \tag{6.168}$$

Поскольку восприимчивость (6.164) расходится, в данном случае, при $q = 2p_F$, оставим в (6.168) только $k - k' = \pm 2p_F$. Тогда имеем[11]:

$$S^z(x) = \frac{1}{2L}\sum_k [< c^+_{k\uparrow}c_{k+2p_F\uparrow} > - < c^+_{k\downarrow}c_{k+2p_F\downarrow} >]e^{i2p_Fx} + c.c. \tag{6.169}$$

Введем обозначение:

$$< S >= |S|e^{i\phi} = \frac{1}{L}\sum_k [< c^+_{k\uparrow}c_{k+2p_F\uparrow} > - < c^+_{k\downarrow}c_{k+2p_F\downarrow} >] \tag{6.170}$$

и выделив соответствующие аномальные средние в гамильтониане (6.167) (оставляя только члены с $q = \pm 2p_F$), получим:

$$H = \sum_{k\sigma}\{\varepsilon_k a^+_{k\sigma}a_{k\sigma} + (\Delta a^+_{k+2p_F\sigma}a_{k\sigma} + h.c.)\} \tag{6.171}$$

где ($N$ – число атомов в цепочке)

$$\Delta = \frac{U}{N} < S^z >= \frac{U}{N}\frac{1}{2}Re(< S > e^{i2p_Fx}) = \frac{U}{N}|S|\cos(2p_Fx + \phi) \tag{6.172}$$

Все эти соотношения являются прямым аналогом (6.46) – (6.50), так что и структура решения совершенно ясна. В частности спектр электронов в такой системе имеет вид:

$$E_k = \mu \pm \sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + |\Delta|^2} \tag{6.173}$$

и изображается тем же Рис. 6.6.

Возникающую здесь магнитную структуру (SDW) можно представить себе как образованную двумя волнами плотности электронов со спинами $\uparrow$ и $\downarrow$, находящимися в противофазе, так что плотность заряда остается однородной, а спиновая плотность осциллирует с периодом $2\pi/2p_F$ (параметр порядка (6.172)). Такая ситуация называется синусоидальной SDW. В принципе, возможны и другие решения – например, так называемая геликоидальная SDW, в которой величина спина остается неизменной, но его направление вращается в плоскости $xy$, как это показано на Рис. 6.16:

$$< S^x >= |S|\cos(2p_Fx + \phi), \qquad < S^y >= |S|\sin(2p_Fx + \phi) \tag{6.174}$$

Обычно такая структура несколько более выгодна по энергии.

---

[11] Член с $k' = k - 2p_F$ оказывается комплексно сопряженным первому члену в (6.169) после замены индекса суммирования $k \to k + 2p_F$.

Разумеется, стандартным образом можно исследовать и термодинамику таких переходов. В приближении самосогласованного поля возникает критическая температура, при которой SDW исчезает и пропадает щель в электронном спектре. Соответствующие формулы очень похожи на аналогичные выражения в теории БКШ или пайерлсовского перехода. В частности, для температуры перехода получится нечто типа (6.24), с безразмерной константой связи $\lambda = UN(E_F)$.

Аналогичное рассмотрение может быть проведено и для многомерных (двумерных или трехмерных) систем с "нестингом". Экспериментально SDW такого типа наблюдались в ряде квазиодномерных органических соединений. Однако, наиболее известным примером такой магнитной структуры является SDW в $Cr$. Магнетизм $Cr$ получает свое объяснение в подобной модели (точнее в ее двухзонном аналоге – типа модели экситонного изолятора), поскольку в $Cr$ имеется поверхность Ферми, состоящая из электронных и дырочных "карманов", обладающих свойством почти полного "нестинга".

В качестве другого поучительного примера можно рассмотреть двумерную систему с "нестингом" — квадратную решетку с электронами, описываемыми приближением сильной связи (6.147). Мы уже отмечали, что в случае полузаполненной зоны поверхность Ферми в такой системе представляет собой квадрат, показанный на Рис. 6.12 (a), так что имеется полный "нестинг" с вектором $Q = (\pi/a, \pi/a)$. Соответственно, в случае межэлектронного отталкивания здесь появится SDW с $Q = (\pi/a, \pi/a)$, которая "закроет" всю поверхность Ферми энергетической щелью $\Delta$, а система станет диэлектриком. В тоже время, нетрудно сообразить, что SDW с таким волновым вектором соответствует "обычному" двухподрешеточному антиферромагнетику (с "шахматным" расположением противоположно направленных спинов на квадратной решетке). Один пример такой системы хорошо известен – это диэлектрическое состояние $La_2CuO_4$, где именно таким образом расположены спины в плоскости $CuO_2$. Эта система особенно интересна, поскольку при незначительном дырочном легировании она превращается в типичный высокотемпературный сверхпроводник. Поэтому модели рассмотренного типа могут играть существенную роль в построении теории таких систем.

## 6.5 Псевдощель.

### 6.5.1 Флуктуации пайерлсовского ближнего порядка.

Вернемся к рассмотрению одномерной системы с пайерлсовской CDW. Уже не раз отмечалось, что в чисто одномерном случае установление дальнего порядка невозможно. Обсудим на качественном уровне вопрос о том, что же происходит в области температур $T < T_{p0}$, при учете флуктуаций, разрушающих дальний порядок. Запишем снова одномерное разложение ГЛ (6.140) в виде:

$$F(\Delta_Q;\ T) - F(0;\ T) = a(T)|\Delta_Q|^2 + c(T)(Q - 2p_F)^2|\Delta_Q|^2 + b(T)|\Delta_Q|^4 \qquad (6.175)$$

где коэффициенты $a(T),\ c(T)$ имеют вид:

$$a(T) = N(E_F)\frac{T - T_{p0}}{T_{p0}}, \quad T_{p0} = \frac{2\gamma}{\pi}E_F e^{-\frac{1}{\lambda}} \qquad (6.176)$$

$$c(T) = N(E_F)\xi_0^2(T), \qquad \xi_0^2(T) = \frac{7\zeta(3)v_F^2}{16\pi^2 T^2} \qquad (6.177)$$

а для коэффициента $b(T)$ напишем следующую интерполяционную формулу (P.A.Lee, T.M.Rice, P.W.Anderson, 1973):

$$b(T)=\left\{b_0+(b_1-b_0)\frac{T}{T_{p0}}\right\}\frac{N(E_F)}{T_{p0}^2},\qquad b_0=\frac{\gamma^2}{2\pi^2},\qquad b_1=\frac{7\zeta(3)}{16\pi^2}\tag{6.178}$$

Тогда разложение ГЛ (6.175), формально полученное выше для области $T\sim T_{p0}$, можно применить для качественного анализа при любых температурах. В частности, для $T\to 0$ получаем:

$$F(\Delta\sim\Delta_0)\approx-\frac{1}{2}N(E_F)\Delta_0^2+2N(E_F)(|\Delta|-\Delta_0)^2+\cdots\tag{6.179}$$

где $\Delta_0=\frac{\pi}{\gamma}T_{p0}=2E_Fe^{-\frac{1}{\lambda}}$ — щель при $T=0$, полученная в приближении самосогласованного поля. Для температурной зависимости параметра порядка, стандартным образом [11] получаем:

$$\Delta(T)=\begin{cases}0 \qquad \text{при} \qquad T>T_{p0}\\ \left(-\frac{a}{2b}\right)^{1/2}=\left(\frac{N(E_F)}{2b}\right)^{1/2}\left(\frac{T_{p0}-T}{T_{p0}}\right)^{1/2} \qquad \text{при} \qquad T\leq T_{p0}\\ \Delta_0=\frac{\pi}{\gamma}T_{p0} \qquad \text{при} \qquad T\ll T_{p0}\end{cases}\tag{6.180}$$

Таким образом, разложение (6.175) – (6.178) качественно воспроизводит результаты приближения самосогласованного поля (микроскопической теории) во всем интервале температур. Но это приближение, как известно, не учитывает флуктуаций, которые играют решающую роль в разрушении дальнего порядка в одномерных системах.

В принципе, в системе могут возникать множество произвольных флуктуаций параметра $\{\Delta_Q\}$. Вероятность конкретной флуктуации $\Delta_Q$ определяется как [11]:

$$\mathcal{P}(\Delta_Q)\sim\exp\left\{-\frac{1}{T}[F(\Delta_Q,T)-F(0,T)]\right\}\tag{6.181}$$

Тогда статсумма системы флуктуаций описывается функциональным интегралом [20] вида:

$$Z=\int\{\delta\Delta_Q\}\exp\left\{-\frac{1}{T}[F(\Delta_Q,T)-F(0,T)]\right\}\tag{6.182}$$

Соответственно, полная свободная энергия системы есть $F=-T\ln Z$.

Для одномерной модели ГЛ типа (6.175) можно провести практически точное рассмотрение (D.J.Scalapino, M.Sears, R.A.Ferrell, 1972). Мы этим заниматься не будем, а приведем только наиболее интересные для нас качественные результаты. Отсутствие дальнего порядка означает равенство нулю термодинамического среднего:

$$<\Delta_Q>=\frac{1}{Z}\int\{\delta\Delta_Q\}\Delta_Q\exp\left\{-\frac{1}{T}[F(\Delta_Q,T)-F(0,T)]\right\}=0\tag{6.183}$$

В тоже время среднеквадратичная флуктуация параметра порядка, очевидно, нулю не равна: $<|\Delta_Q|^2>\neq 0$. Соответственно, корреляционная функция флуктуаций параметра порядка, в рассматриваемой модели, равна:

$$<\Delta(x)\Delta(x')>=2<|\Delta|^2>\exp\left\{-\frac{|x-x'|}{\xi(T)}\right\}\cos 2p_F(x-x')\tag{6.184}$$

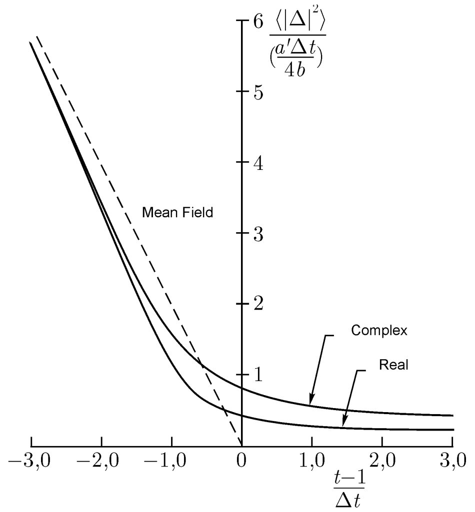



Рис. 6.17: Температурное поведение среднеквадратичной флуктуации параметра порядка в одномерной модели ГЛ. Показаны случаи действительного и комплексного параметров порядка. Пунктир — результат приближения самосогласованного поля для квадрата параметра порядка.

Поведение параметров, определяющих (6.184), показано[12] на Рис. 6.17, 6.18, где $t = \frac{T}{T_{p0}}$, а величина $\Delta t$ определяет ширину “гинзбурговской” критической области [11], которая в данной модели равна:

$$\Delta t = \frac{\Delta T}{T_{p0}} = 2\left(\frac{bT_{p0}}{a'^2\xi_0}\right)^{2/3} \sim 2\left(\frac{N(E_F)}{T_{p0}^2}\frac{T_{p0}}{v_F}\frac{1}{N(E_F)}\right)^{2/3} \sim \left(\frac{1}{N(E_F)v_F}\right)^{2/3} \sim 1 \tag{6.185}$$

где $a'$ определено соотношением $a(T) = a'(t-1)$, а в последней оценке учтено, что $N(E_F) = \frac{1}{\pi v_F}$. Кстати, то обстоятельство, что ширина гинзбурговской области порядка единицы и соответствует, фактически, отсутствию в системе фазового перехода (дальнего порядка).

Основные качественные выводы из картины, представленной на Рис. 6.17, 6.18 следующие. Грубо можно оценить, что $< |\Delta|^2 >\sim \Delta(T) \sim T_{p0}$ в весьма широкой области температур. Корреляционная длина $\xi(T) \sim \xi_0\sqrt{\frac{T_{p0}}{T-T_{p0}}}$ при $T \gg T_{p0}$, но $\xi(T) \to \infty$ только при $T \to 0$. В тоже время, при температурах $T < T_{p0}$, корреляционная длина становится весьма большой — в системе возникают большие области *ближнего порядка*, в которых можно говорить о существовании (флуктуационной) пайерлсовской CDW с волновым вектором $Q \sim 2p_F$.

Реальные системы, в которых наблюдают пайерлсовский переход, практически всегда являются *квазиодномерными*, и одномерные цепочки атомов в них связаны достаточно слабыми межцепочечными взаимодействиями, которые приводят к стабилизации пайерлсовского дальнего порядка при некоторой конечной температуре и к вполне реальному фазовому переходу. Межцепочечное взаимодействие может быть обусловлено туннелированием электронов с цепочки на цепочку, т.е. тем обсто-

[12] Пайерлсовскому переходу с CDW с периодом несоизмеримым с периодом исходной цепочки соответствует комплексный параметр порядка, соизмеримому случаю – действительный.

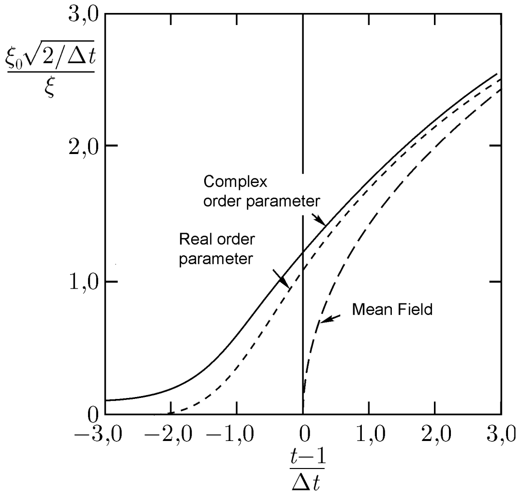



Рис. 6.18: Температурное поведение обратной корреляционной длины в одномерной модели ГЛ. Показаны случаи действительного и комплексного параметров порядка. Пунктир — результат приближения самосогласованного поля для квадрата параметра порядка.

ятельством, что электронный спектр все же трехмерен (хотя и сильно анизотропен). Может играть роль и "прямое" взаимодействие параметров порядка на соседних цепочках. Например учтем, что пайерлсовская CDW создает реальную модуляцию плотности электрического заряда вдоль цепочки:

$$\rho(x) = ne\frac{\Delta}{\lambda E_F}\cos(Qx+\phi) \tag{6.186}$$

которая, в свою очередь, создает вокруг цепочки электростатический потенциал вида:

$$\varphi(r_\perp, x) = 2ne\frac{\Delta}{\lambda E_F}\cos(Qx+\phi)K_0(Qr_\perp) \tag{6.187}$$

где $K_0(r)$ – функция Бесселя от мнимого аргумента (в асимптотике спадающая по экспоненте). Таким образом, возникает энергия электростатического взаимодействия CDW (на единицу длины цепочки) следующего вида:

$$U = U_0\sum_n\sum_{<m>}\cos(\phi_n - \phi_m) \tag{6.188}$$

где вторая сумма берется по номерам цепочек – ближайших соседей цепочки $n$. Видим, что CDW соседних цепочек энергетически выгодно выстроиться в противофазе, как это показано на Рис. 6.19. В результате возникает трехмерное упорядочение и в системе происходит реальный фазовый переход. Качественно, температура такого перехода определяется очевидным условием $U_0\xi(T) \sim T$, что дает уравнение для определения соответствующей критической температуры типа:

$$1 \sim \frac{1}{T_c}U_0\xi(T_c) \tag{6.189}$$

С понижением $T$ величина $\xi(T)$, как мы видели в одномерной модели, растет ($\xi(T) \to \infty$ при $T \to 0$), так что решение (6.189) существует даже для сколь угодно малых

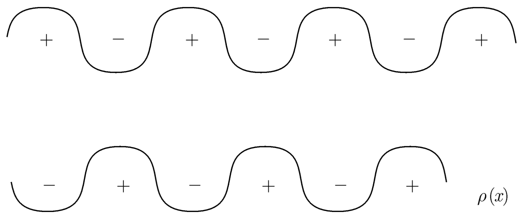



Рис. 6.19: Упорядочение CDW на соседних цепочках в противофазе, обусловленное их электростатическим взаимодействием.

$U_0$. Ну а в реальности все зависит от конкретных значений параметров. Вполне может быть $T_c \sim T_{p0}$, а может быть и $T_c \ll T_{p0}$. Поэтому, в квазиодномерных системах может существовать достаточно широкая область температур $T_c \ll T \ll T_{p0}$, в которой дальний порядок отсутствует, но существуют развитые флуктуации ближнего порядка, характеризуемые корреляционной функцией (6.184). При достаточно высоких температурах $T \sim T_{p0}$ эти флуктуации можно рассматривать как гауссовы, при $T \ll T_{p0}$ это заведомо не так. Корреляционная длина флуктуаций ближнего порядка $\xi(T)$ может существенно превышать межатомное расстояние.

Рассмотрим вопрос о возникновении трехмерного упорядочения в системе слабо взаимодействующих параметров порядка соседних цепочек несколько подробнее. Для системы взаимодействующих параметров порядка на цепочках (нумеруемых индексами $i, j$), из чисто феноменологических соображений, можно написать разложение ГЛ следующего вида:

$$F\{\Delta_i\} = \int \frac{dx}{\xi_0} \left\{ \sum_i \left[ a|\Delta_i(x)|^2 + b|\Delta_i(x)|^4 + c\left|\frac{d\Delta_i}{dx}\right|^2 \right] + \frac{1}{2}\sum_{<ij>} \lambda_{ij}\Delta_i(x)\Delta_j(x) \right\} \qquad (6.190)$$

где подразумевается учет взаимодействия только ближайших соседей.

Запишем среднее значение параметра порядка в виде:

$$< \Delta_i >= Z^{-1}\int\{\delta\Delta\}\Delta_i(x)\exp\left\{ -\frac{1}{T}\int\frac{dx'}{\xi_0}\left[\sum_i F_i(\Delta_i(x')) + \frac{1}{2}\sum_{ij}\lambda_{ij}\Delta_i(x')\Delta_j(x')\right]\right\} \to$$
$$\to Z^{-1}\int\{\delta\Delta\}\Delta_i(x)\exp\left\{ -\frac{1}{T}\int\frac{dx'}{\xi_0}\left[\sum_i F_i(\Delta_i(x')) + \sum_{ij}\lambda_{ij}\Delta_i(x') < \Delta_j >\right]\right\} \qquad (6.191)$$

где во второй строке сделано приближение "молекулярного" (самосогласованного) поля по межцепочечному взаимодействию. При $T \to T_c$ имеем $< \Delta_i > \to 0$, тогда можно написать:

$$< \Delta_i > \approx Z^{-1}\int\{\delta\Delta\}\Delta_i(x)\exp\left\{-\frac{1}{T}\int\frac{dx'}{\xi_0}\sum_i F_i\right\}\left\{1 + \frac{1}{T}\int\frac{dx'}{\xi_0}\sum_{ij}\Delta_i(x') < \Delta_j >\right\} =$$
$$= \frac{1}{T}\int\frac{dx'}{\xi_0}\sum_j \lambda_{ij} < \Delta_i(x)\Delta_i(x') >< \Delta_j > \qquad (6.192)$$

так что критическая температура $T_c$ определяется уравнением:

$$1 = \frac{\lambda}{T}\int\frac{dx'}{\xi_0} < \Delta_i(x)\Delta_i(x') >, \qquad \lambda = \sum_{<j>}\lambda_{ij} \qquad (6.193)$$

или, используя

$$< \Delta_i(x)\Delta_i(x') >=< \Delta^2 > \exp\left\{-|x - x'|\xi^{-1}(T)\right\} \qquad (6.194)$$

получаем прямой аналог (6.189):

$$1 = \frac{\lambda}{T} < \Delta^2 > \frac{\xi(T)}{\xi_0} \qquad (6.195)$$

с теми же выводами, что и выше.

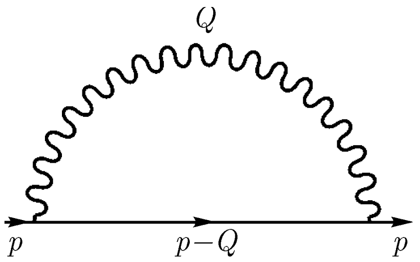



Рис. 6.20: Простейший график для собственно – энергетической части электрона. Волнистая линия изображает коррелятор $S(Q)$.

### 6.5.2 Электрон в случайном поле флуктуаций.

Рассмотрим электрон, распространяющийся в случайном поле флуктуаций $\Delta(x)$, которые будем считать гауссовыми. Тогда задачу можно решать, пользуясь обычной "примесной" диаграммной техникой, причем линии взаимодействия (рассеяния) сопоставляется коррелятор (6.184). В импульсном представлении линии взаимодействия следует сопоставить фурье – образ (6.184):

$$S(Q) = 2\Delta^2 \left\{ \frac{\kappa}{(Q-2p_F)^2+\kappa^2} + \frac{\kappa}{(Q+2p_F)^2+\kappa^2} \right\} \tag{6.196}$$

где $\kappa = \xi^{-1}(T)$, а $<|\Delta|^2>$ для краткости обозначено как $\Delta^2$. В дальнейшем мы рассмотрим чрезвычайно упрощенный, но весьма поучительный, вариант такой модели, соответствующий пределу $\xi \to \infty$ $(\kappa \to 0)$, т.е. в асимптотике очень больших корреляционных длин флуктуаций ближнего порядка[13]. Оказывается, что такая задача допускает точное решение, мы можем просуммировать *все* фейнмановские графики теории возмущений с "взаимодействием" вида (6.196), которое переходит в рассматриваемом пределе в[14]:

$$S(Q) = 2\pi\Delta^2\{\delta(Q-2p_F) + \delta(Q+2p_F)\} \tag{6.197}$$

Рассмотрим простейший вклад в собственно – энергетическую часть электрона, изображаемый диаграммой Рис. 6.20, который пишем в мацубаровской технике:

$$\begin{aligned}\Sigma(\varepsilon_n p) = \int \frac{dQ}{2\pi} S(Q) \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{p-Q}} \approx 2\Delta^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} \frac{\kappa}{x^2+\kappa^2} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p - v_F x} = \\ = 2\Delta^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} \frac{\kappa}{(x-i\kappa)(x+i\kappa)} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p - v_F x} = \\ = \frac{\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa}\end{aligned} \tag{6.198}$$

где, для определенности, полагали $p \sim +p_F$, $\varepsilon_n > 0$ и и определили новую переменную интегрирования $x$ с помощью $Q = 2p_F + x$ (полезно еще раз взглянуть на Рис. 6.3!).

[13] Во избежание недоразумений, сразу заметим, что в данном случае, переход к такому пределу не означает возникновения дальнего порядка! Электрон движется в гауссовом случайном поле со специфическим парным коррелятором, а не в периодической системе. В деталях это будет видно из последующего рассмотрения.

[14] Отметим очевидную аналогию этой модели с рассмотренной выше моделью Келдыша.

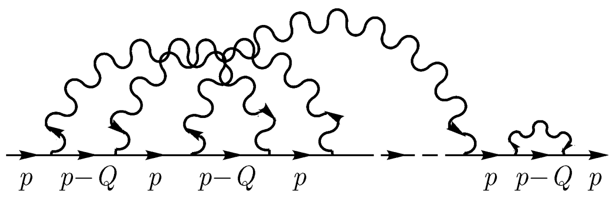



Рис. 6.21: График произвольного порядка для одноэлектронной функции Грина.

Интересующий нас предел $\xi(T) \to \infty$ $(\kappa \to 0)$ следует понимать в смысле:

$$v_F\kappa = v_F\xi^{-1} \ll Max\{2\pi T, \xi_p\} \tag{6.199}$$

или

$$v_F\kappa = v_F\xi^{-1} \ll 2\pi T, \qquad \xi(T) \gg |p - p_F|^{-1} \tag{6.200}$$

Тогда (6.198) переходит в:

$$\Sigma(\varepsilon_n p) \approx \frac{\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p} \tag{6.201}$$

Теперь для "взаимодействия" (6.197) нет проблем выписать вклад графика любого порядка для функции Грина, типа показанного на Рис. 6.21. В таком графике $n$ – го порядка по $S(Q)$ имеется всего $2n$ вершин, соединенных между собой линиями взаимодействия всеми возможными способами. При этом эти линии поочередно "уносят" и "приносят" импульсы $Q = 2p_F$[15]. В результате, в соответствующем аналитическом выражении для такого графика возникает последовательность чередующихся функций Грина вида $\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p}$ ($n$ штук) и $\frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p}$ (тоже $n$ штук), плюс еще одна (начальная) $\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p}$[16]. Кроме того, есть еще множитель $\Delta^{2n}$. В итоге, вклады всех графиков в данном порядке просто совпадают, а их суммарный вклад определяется их полным числом, которое легко подсчитать из комбинаторных соображений – оно равно $n!$. В самом деле, имеется $2n$ точек (вершин), куда "входят" или "выходят" линии взаимодействия. Из них $n$ точек имеют "выходящую" линию, которая любым из $n!$ способов может "войти" в оставшиеся "свободными" $n$ вершин. Используем теперь тождество[17]:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n! z^n = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta}(\zeta z)^n = \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} \frac{1}{1 - \zeta z} \tag{6.202}$$

Тогда легко суммируем *весь* ряд для функции Грина и получаем точное решение

[15]Эта поочередность важна, чтобы электрон "не уходил" далеко от уровня Ферми (точек $\pm p_F$) на Рис. 6.3 или Рис. 6.7 (что привело – бы к появлению больших энергий в знаменателях соответствующих вкладов теории возмущений). Это не так для случая соизмеримых флуктуаций, типа удвоения периода, когда работаем со спектром, показанным на Рис. 6.8 и "приход" или "уход" любого числа импульсов $Q = (\pi/a, \pi/a)$ оставляет электрон вблизи уровня Ферми. Соответственно, для этого частного случая возникает несколько иная комбинаторика диаграмм, которую мы не будем рассматривать из соображений экономии времени и места.

[16]Разумеется точно также решается задача и с произвольным фиксированным вектором рассеяния $Q$, когда просто чередуются $\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p}$ и $\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{p-Q}}$. Мы берем $Q = 2p_F$ для компактности записи и в связи с физикой пайерлсовского перехода.

[17]Как уже отмечалось, в математике это называется суммированием по Борелю.

рассматриваемой задачи (М.В.Садовский, 1974)[18]:

$$G(\varepsilon_l p) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Delta^{2n} n!}{(i\varepsilon_l - \xi_p)^n (i\varepsilon_l + \xi_p)^n (i\varepsilon_l - \xi_p)} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} n! z^n(\varepsilon_l, \xi_p) G_0(\varepsilon_l \xi_p) =$$
$$= \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} \frac{i\varepsilon_l + \xi_p}{(i\varepsilon_l)^2 - \xi_p^2 - \zeta\Delta^2} \equiv < G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_l \xi_p) >, \qquad \varepsilon_l = (2l+1)\pi T \quad (6.203)$$

где использовали обозначение:

$$z(\varepsilon_l, \xi_p) = \Delta^2 G_0(\varepsilon_l, \xi_p) G_0(\varepsilon_l, -\xi_p) \quad (6.204)$$

и у нас возникла "нормальная" функция Грина пайерлсовского диэлектрика:

$$G_{\Delta^2}(\varepsilon_l p) = \frac{i\varepsilon_l + \xi_p}{(i\varepsilon_l)^2 - \xi_p^2 - \Delta^2} \quad (6.205)$$

под знаком "усреднения":

$$< ... >_{\zeta} = \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} ... \quad (6.206)$$

Нетрудно сообразить (формальное доказательство приведено в Приложении Б), что (6.203) представляет собой функцию Грина электрона, движущегося во внешнем поле вида $2W\cos(2p_F x + \phi)$, амплитуда которого "флуктуирует" с так называемым распределением Рэлея[19]:

$$\mathcal{P}(W) = \frac{2W}{\Delta^2} e^{-\frac{W^2}{\Delta^2}} \quad (6.207)$$

а фаза $\phi$ распределена однородно на интервале от 0 до $2\pi$.

Выполняя аналитическое продолжение $i\varepsilon_l \to \varepsilon \pm i\delta$ из (6.203) получаем для $\varepsilon > 0$:

$$ImG^{R,A}(\varepsilon\xi_p) = \mp\pi(\varepsilon + \xi_p) \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} \delta(\varepsilon^2 - \xi_p^2 - \zeta\Delta^2) =$$
$$= \mp \frac{\pi}{\Delta^2} (\varepsilon + \xi_p) \theta(\varepsilon^2 - \xi_p^2) e^{-\frac{\varepsilon^2 - \xi_p^2}{\Delta^2}} \quad (6.208)$$

так что спектральная плотность

$$A(\varepsilon\xi_p) = -\frac{1}{\pi} ImG^R(\varepsilon\xi_p) \quad (6.209)$$

имеет "нефермижидкостный" вид, показанный на Рис. 6.22.

Приведем для полноты также и аналитические выражения для $ReG^{R,A}(\varepsilon\xi_p)$:

$$ReG^{R,A}(\varepsilon\xi_p) = \begin{cases} \frac{\varepsilon+\xi_p}{\Delta^2} e^{-\frac{\varepsilon^2-\xi_p^2}{\Delta^2}} \overline{Ei}\left(\frac{\varepsilon^2-\xi_p^2}{\Delta^2}\right) & \text{при} \quad \varepsilon^2 - \xi_p^2 \geq 0 \\ \frac{\varepsilon+\xi_p}{\Delta^2} e^{\frac{|\varepsilon^2-\xi_p^2|}{\Delta^2}} Ei\left(-\frac{|\varepsilon^2-\xi_p^2|}{\Delta^2}\right) & \text{при} \quad \varepsilon^2 - \xi_p^2 < 0 \end{cases} \quad (6.210)$$

где $Ei(x)$ и $\overline{Ei}(x)$ – интегральные показательные функции. Подчеркнем, что полученная нами функция Грина (6.203) не обладает особенностями полюсного типа в окрестности уровня Ферми и, в этом смысле, не описывает спектр "элементарных возбуждений" (квазичастиц), демонстрируя, таким образом, "нефермижидкостное" поведение.

---

[18] Следует подчеркнуть принципиальное отличие данной задачи от задачи о движении электрона в когерентном периодическом поле, которая рассматривалась выше в связи с (6.57), (6.58).

[19] Это распределение широко используется в статистической радиофизике: С.М.Рытов. Введение в статистическую радиофизику. Часть I. "Наука", М, 1976.

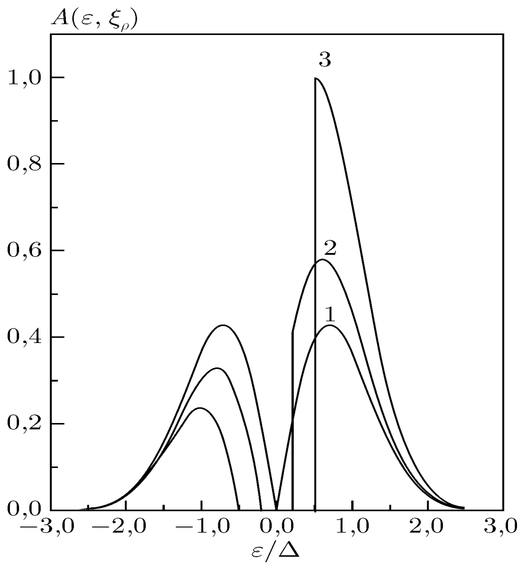



Рис. 6.22: Спектральная плотность в модели псевдощелевого состояния: (1)—$\xi_p = 0$; (2)—$\xi_p = 0.1\Delta$; (3)—$\xi_p = 0.5\Delta$.

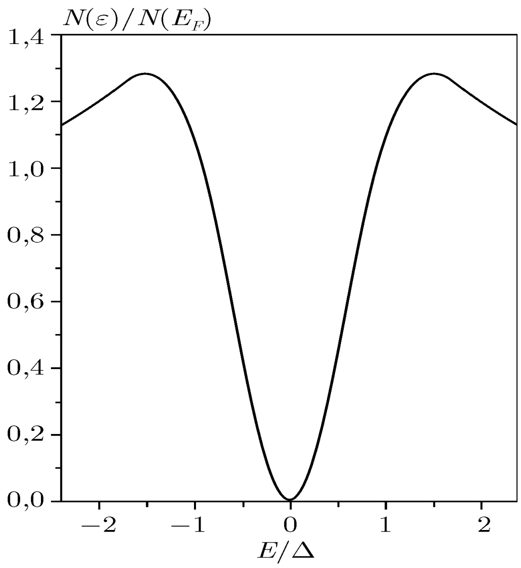



Рис. 6.23: Плотность состояний с псевдощелью.

Плотность состояний электронов имеет вид:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0(E_F)} = \left|\frac{\varepsilon}{\Delta}\right| \int_0^{\frac{\varepsilon^2}{\Delta^2}} d\zeta \frac{e^{-\zeta}}{\sqrt{\frac{\varepsilon^2}{\Delta^2} - \zeta}} = 2\left|\frac{\varepsilon}{\Delta}\right| \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{\Delta^2}\right) Erfi\left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right) = \\ = \begin{cases} 1 & \text{при} \quad |\varepsilon| \to \infty \\ \frac{2\varepsilon^2}{\Delta^2} & \text{при} \quad |\varepsilon| \to 0 \end{cases} \tag{6.211}$$

где $N_0(E_F)$ – плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми, а $Erfi(x) = \int_0^x dx e^{x^2}$ – интеграл вероятностей от мнимого аргумента. Характерный вид этой плотности состояний показан на Рис. 6.23 и демонстрирует наличие размытой (“мягкой”) ***псевдощели*** в окрестности уровня Ферми. По сути дела, это есть плотность состояний пайерлсовского диэлектрика (6.77), показанная выше на Рис. 6.9, усредненная по флуктуациям щели, определяемым распределением (6.207).

Обобщение этих результатов на случай конечных корреляционных длин $\xi(T)$ (или конечных $\kappa$) существенно сложнее (М.В.Садовский, 1979). Прежде всего, попробуем разобраться как вычисляется вклад диаграммы произвольного порядка. К сожалению, эту задачу нельзя решить точно, поскольку интегрирования становятся все более громоздкими с ростом порядка диаграммы. Однако оказывается, что можно сформулировать некоторый весьма эффективный приближенный *Ansatz*, позволяющий выписать явное выражение для любой диаграммы произвольного порядка. На Рис. 6.24 приведены все существенные диаграммы третьего порядка. Предположим, что мы имеем дело с линеаризованным спектром свободных электронов, показанным на Рис. 6.3, и рассмотрим случай, когда вектор рассеяния $Q < p_F$, так что рассеяние электронов происходит только на одной (“правой” или “левой”) ветви спектра. В этом случае мы ***можем*** рассчитать вклад ***произвольной*** диаграммы, типа показанных на Рис. 6.24, поскольку в этом случае мы можем гарантировать что ненулевой вклад в интегралы возникает только от полюсов лорентцианов $S(Q)$, как в (6.198). Это связано с тем, что для электрона, рассеивающегося в пределах одной ветви спектра, скорость не меняет знак. Например, элементарные вычисления показывают, что вклад диаграммы Рис. 6.24 (d) имеет вид:

$$\Delta^6 \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{p-Q} + iv_F\kappa} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_F\kappa} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{p-Q} + 3iv_F\kappa} \times \\ \times \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_F\kappa} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{p-Q} + iv_F\kappa} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} \tag{6.212}$$

Предположим теперь, что $\xi_p$ и $\xi_{p-Q}$ в (6.212) представляют собой “реальный” спектр электрона, который, конечно, является непрерывной функцией импульса $p$. Тогда мы можем просто ***продолжить*** (6.212) на ***любые*** значения $Q$, включая $Q = 2p_F$. В этом случае, вместо (6.212) мы немедленно получаем (вспоминая условие “нестинга” (6.61)!):

$$\Delta^6 \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_F\kappa} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + 3iv_F\kappa} \times \\ \times \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_F\kappa} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} \tag{6.213}$$

В этом и состоит смысл нашего *Ansatz*'а! Фактически, он является точным в пределе $\xi \to \infty$ (или $\kappa \to 0$), что очевидно из прямого сравнения с результатами рассмотрения этого предела, проведенного выше. Таким образом, для $Q = 2p_F$ мы точно учитываем рассеяние назад (с одной ветви спектра на другую) на вектор $Q$, а приближенно учитываются только малые (при больших $\xi$, или малых $\kappa$) “отклонения” от вектора рассеяния $Q = 2p_F$.

Теперь легко видеть, что вклады всех диаграмм (посчитанные описанным методом) аналогичны: числа, выписанные над электронными линиями на Рис. 6.24, указывают сколько раз член типа $iv_F\kappa$ возникает в соответствующем знаменателе. Заметим, что вклад диаграммы с перекрещивающимися линиями взаимодействия на Рис. 6.24 (d) в точности равен вкладу диаграммы без пересечений, показанной на Рис. 6.24 (e). Подчеркнем, что простота выражений для вкладов различных диаграмм возникает только при использовании нашего *Ansatz*'а, но, как мы увидим ниже, это, по – видимому, неплохое приближение.

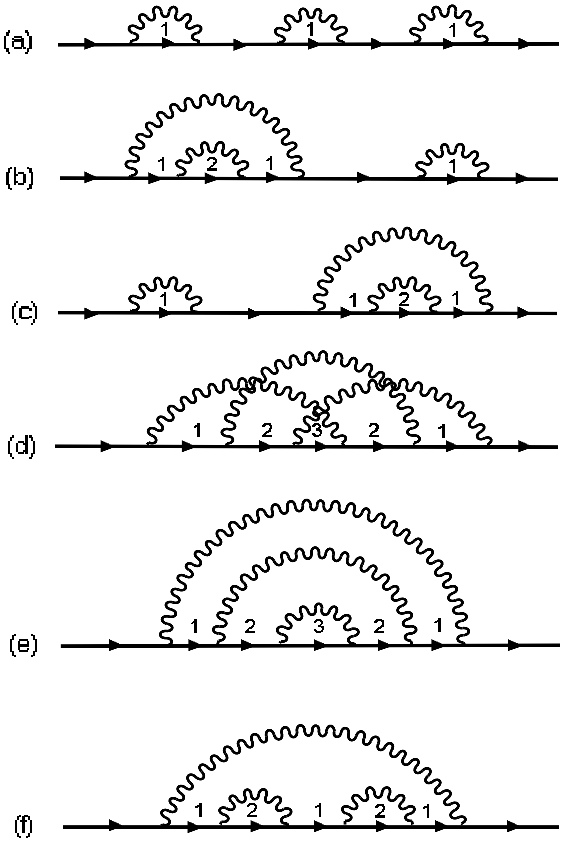



Рис. 6.24: Существенные диаграммы третьего порядка.

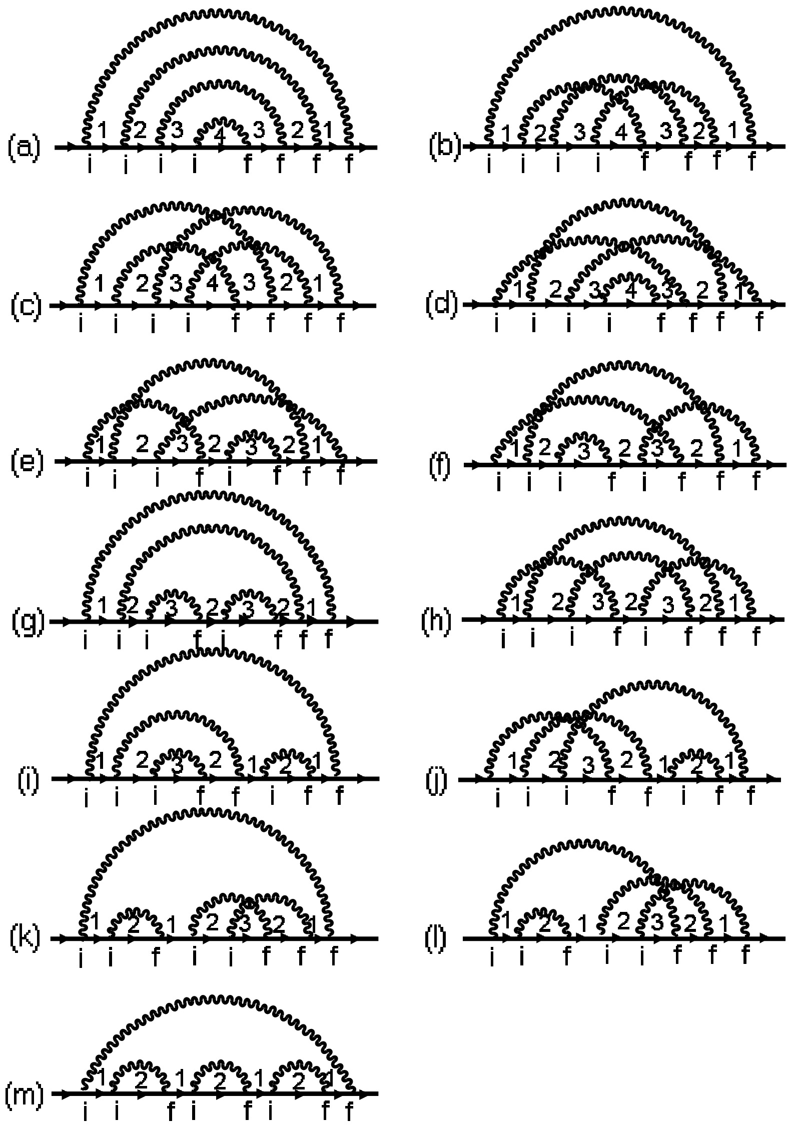



Рис. 6.25: Все существенные диаграммы для неприводимой собственно – энергетической части в четвертом порядке теории возмущений.

В четвертом порядке имеется $4! = 24$ существенных диаграмм, из них все неприводимые диаграммы для собственно – энергетической части показаны на Рис. 6.25. Соответствующие вклады легко находятся и аналогичны по форме вкладам третьего порядка, причем цифры над электронными линиями здесь имеют тот же смысл, что и на Рис. 6.24. Более того, снова вклады целого ряда диаграмм равны между собой: (a)=(b)=(c)=(d); (e)=(f)=(g)=(h); (i)=(j); (k)=(l).

Теперь становится ясным общее правило, пользуясь которым можно выписать вклад произвольной диаграммы. Фактически, он определяется расстановкой "начальных" и "конечных" вершин (на Рис. 6.25 они обозначены буквами $i$ и $f$). Каждая электронная линия, следующая за вершиной типа $i$ приобретает дополнительный вклад $iv_F\kappa$ в знаменатель, а в знаменателе электронной линии, следующей за вершиной типа $f$, такой вклад вычитается.

Более того, любая диаграмма с перекрещивающимися линиями взаимодействия может быть однозначно представлена некоторой диаграммой без пересечений. Рецепт построения такой диаграммы (без пересечений) для данной последовательности $i$ и $f$ вершин может быть сформулирован следующим образом: начиная слева, первая конечная вершина соединяется линией взаимодействия с ближайшей к ней слева начальной вершиной, и так далее для оставшихся несоединенными вершин. Например, диаграммы Рис. 6.25 (b), (c), (d) сводятся к диаграмме Рис. 6.25 (a), а диаграммы Рис. 6.25 (e), (f) сводятся к диаграмме Рис. 6.25 (g), и т.д. Для фиксированного расположения начальных вершин, конечные вершины выбираются из точек с (номерами) противоположной четности (поскольку мы сейчас ограничиваемся рассмотрением несоизмеримого случая). Числа, приписанные электронным линиям на Рис. 6.24 и 6.25 могут быть перенесены на вершины, если мы припишем им число вкладов $iv_F\kappa$, появляющихся в знаменателе, соответствующем линии, следующей за рассматриваемой вершиной. Общее правило выглядит так: начальной вершине приписывается число $N_n = N_{n-1} + 1$, где $N_{n-1}$ есть число, приписанное ближайшей вершине слева. Конечной вершине приписывается число $N_n - 1$. При этом $N_0 = 0$, а $n$ – порядковый номер вершины.

Определим:

$$v(k) = \begin{cases} \frac{k+1}{2} & \text{для нечетных } k \\ \frac{k}{2} & \text{для четных } k. \end{cases} \tag{6.214}$$

Тогда можно убедиться, что число неприводимых диаграмм для собственно – энергетической части равных заданной диаграмме без пересечений линий взаимодействия равно произведению множителей $v(N_n)$, сопоставляемых всем начальным вершинам данной диаграммы (П.В.Елютин, 1977)[20]. Соответственно, все дальнейшие рассуждения можно вести в терминах диаграмм без пересечений линий взаимодействия, начальным вершинам которых приписаны дополнительные множители $v(N_n)$.

Любая диаграмма для неприводимосй собственно – энергетической части, будучи перестроена описанным выше образом, содержит линию взаимодействия, охватывающую все остальные, т.е. сводящуюся к форме, показанной на Рис. 6.26 (a). Теперь мы можем вывести рекуррентное уравнение, определяющее неприводимую собственно – энергетическую часть, включающую *все* диаграммы соответствующего фейнмановского ряда. По определению неприводимой собственно – энергетической части, мы можем записать уравнение Дайсона для гриновской функции в виде:

$$G^{-1}(\varepsilon_n, \xi_p) = G_0^{-1}(\varepsilon_n, \xi_p) - \Sigma_1(\varepsilon_n, \xi_p) \tag{6.215}$$

где

$$\Sigma_1(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{\Delta^2}{(i\varepsilon_n + \xi_p - iv_F\kappa)^2}\Xi_1(\varepsilon_n, \xi_p) = \Delta^2 G_0^2(\varepsilon_n, -\xi_p - iv_F\kappa)\Xi_1(\varepsilon_n, \xi_p), \tag{6.216}$$

а для $\Xi_1(\varepsilon_n, \xi_p)$ имеем разложение, показанное графически на Рис. 6.26 (b) в терминах диаграмм без пересечений линий взаимодействия, с дополнительными множителями $v(N_n)$, приписанными к вершинам. Это разложение может быть обычным образом выражено через соответствующие неприводимые диаграммы:

$$\Xi_1(\varepsilon_n, \xi_p) = G_0^{-2}(\varepsilon_n, -\xi_p - iv_F\kappa)\{G_0^{-1}(\varepsilon_n, -\xi_p - iv_F\kappa) - \Sigma_2(\varepsilon_n, \xi_p)\}^{-1} \tag{6.217}$$

где $G_0(\varepsilon_n, \xi_p)$ обозначает функцию Грина свободного электрона, а $\Sigma_2(\varepsilon_n, \xi_p)$ выражается суммой неприводимых диаграмм, показанной на Рис. 6.26 (c):

$$\Sigma_2(\varepsilon_n, \xi_p) = \Delta^2 v(2) G_0^2(\varepsilon_n, \xi_p - 2iv_F\kappa)\Xi_2(\varepsilon_n, \xi_p) \tag{6.218}$$

$$\Xi_2(\varepsilon_n, \xi_p) = G_0^{-2}(\varepsilon_n, \xi_p - 2iv_F\kappa)\{G_0^{-1}(\varepsilon_n, \xi_p - 2iv_F\kappa) - \Sigma_3(\varepsilon_n, \xi_p)\}^{-1} \tag{6.219}$$

и т.д. Окончательно имеем:

$$\Sigma_k(\varepsilon_n, \xi_p) = \Delta^2 v(k) G_0^2(\varepsilon_n, (-1)^k\xi_p - ikv_F\kappa)\Xi_k(\varepsilon_n, \xi_p) \tag{6.220}$$

[20] Единственное изменение, которое нужно сделать для случая соизмеримых флуктуаций состоит в том, что множители $v(k) = k$ для всех $k$.

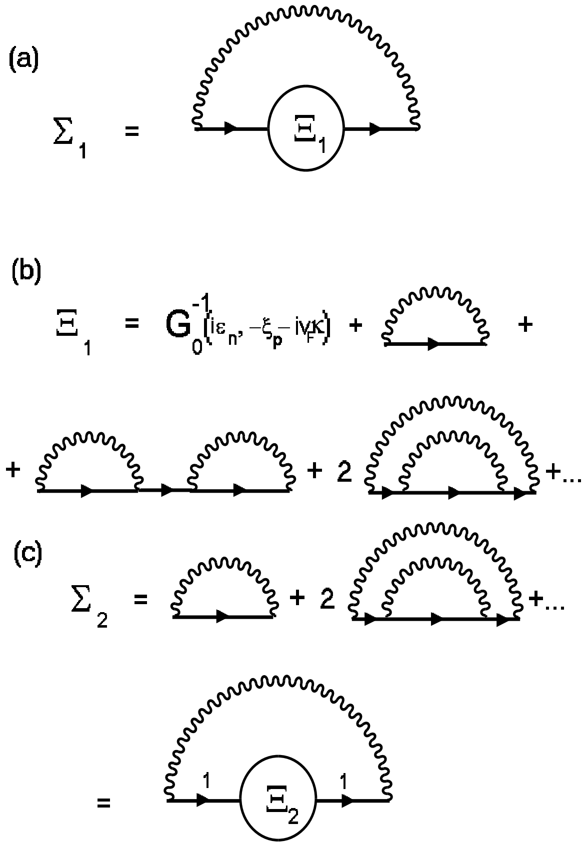



Рис. 6.26: Представление неприводимой собственно – энергетической части через диаграммы без пересечения линий взаимодействия.

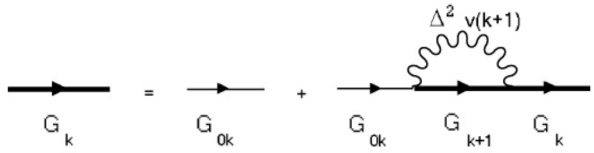



Рис. 6.27: Представление рекуррентного уравнения для функции Грина в виде "уравнения Дайсона".

$$\Xi_k(\varepsilon_n,\xi_p) = G_0^{-2}(\varepsilon_n,(-1)\xi_p - ikv_F\kappa)\{G_0^{-1}(\varepsilon_n,(-1)^k\xi_p - ikv_F\kappa) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n,\xi_p)\}^{-1} \tag{6.221}$$

и мы получаем фундаментальное рекуррентное соотношение для собственно – энергетической части (М.В.Садовский, 1979):

$$\Sigma_k(\varepsilon_n,\xi_p) = \frac{\Delta^2 v(k)}{G_0^{-1}(\varepsilon_n,(-1)^k\xi_p - ikv_F\kappa) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n,\xi_p)} \tag{6.222}$$

Отсюда сразу же получается рекуррентное уравнение и для самой функции Грина:

$$G_k(\varepsilon_n,\xi_p) = \{i\varepsilon_n - (-1)^k\xi_p + ikv_F\kappa - \Delta^2 v(k+1)G_{k+1}(\varepsilon_n,\xi_p)\}^{-1}, \tag{6.223}$$

причем *физическая* функция Грина определяется как $G(\varepsilon_n,\xi_p) \equiv G_{k=0}(\varepsilon_n,\xi_p)$, что эквивалентно полной сумме всего фейнмановского диаграммного ряда для рассматриваемой модели. Фактически, эти рекуррентные уравнения дают представление одноэлектронной функции Грина в виде следующей *цепной дроби*:

$$G(\varepsilon_n,\xi_p) =$$

$$= \cfrac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p - \cfrac{\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa - \cfrac{\Delta^2}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_F\kappa - \cfrac{2\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + 3iv_F\kappa - \ldots}}}} \tag{6.224}$$

Символически, наше рекуррентное уравнение может быть представлено в виде "уравнения Дайсона", показанного графически на Рис. 6.27.

При $\kappa = 0$ мы можем воспользоваться известным представлением неполной $\Gamma$ – функции в виде цепной дроби:

$$\Gamma(\alpha,x) = \int_x^\infty dt e^{-t} t^{\alpha-1} = \cfrac{x^\alpha}{x + \cfrac{1-\alpha}{1 + \cfrac{1}{x + \cfrac{2-\alpha}{1+\ldots}}}} \tag{6.225}$$

и соотношением $\Gamma(0,x) = -Ei(-x)$, чтобы убедиться, что (6.224), после обычного аналитического продолжения $i\varepsilon_n \to \varepsilon + i\delta$, сводится к (6.210), (6.208), воспроизводя полученный выше точный результат (6.203).

Пользуясь фундаментальным рекуррентным соотношением (6.222), после аналитического продолжения $i\varepsilon_n \to \varepsilon + i\delta$, получаем систему рекуррентных соотношений для действительной и мнимой частей собственно – энергетической части:

$$Re\Sigma_k(\varepsilon,\xi_p) = \frac{\Delta^2 v(k)[\varepsilon - (-1)^k\xi_p - Re\Sigma_{k+1}(\varepsilon,\xi_p)]}{[\varepsilon - (-1)^k\xi_p - Re\Sigma_{k+1}(\varepsilon,\xi_p)]^2 + [kv_F\kappa - Im\Sigma_{k+1}(\varepsilon,\xi_p)]^2} \tag{6.226}$$

$$Im\Sigma_k(\varepsilon,\xi_p) = \frac{-\Delta^2 v(k)[kv_F\kappa - Im\Sigma_{k+1}(\varepsilon,\xi_p)]}{[\varepsilon - (-1)^k\xi_p - Re\Sigma_{k+1}(\varepsilon,\xi_p)]^2 + [kv_F\kappa - Im\Sigma_{k+1}(\varepsilon,\xi_p)]^2} \tag{6.227}$$

Эти соотношения удобны для численного счета — начинаем с какого – либо достаточно большого (чтобы обеспечить сходимость!) значения $k$ (т.е. достаточно далекого "этажа" цепной дроби), полагая, например $Re\Sigma_{k+1} = Im\Sigma_{k+1} = 0$, и "поднимаемся вверх по этажам" до $k = 1$. Фактически, сходимость здесь очень хорошая и расчеты занимают секунды на любом современном компьютере (PC).

Обсуждение начнем со спектральной плотности:

$$A(\varepsilon,\xi_p) = -\frac{1}{\pi} ImG^R(\varepsilon,\xi_p) = \frac{Im\Sigma_1(\varepsilon,\xi_p)}{[\varepsilon - \xi_p - Re\Sigma_1(\varepsilon,\xi_p)]^2 + [Im\Sigma_1(\varepsilon,\xi_p)]^2} \tag{6.228}$$

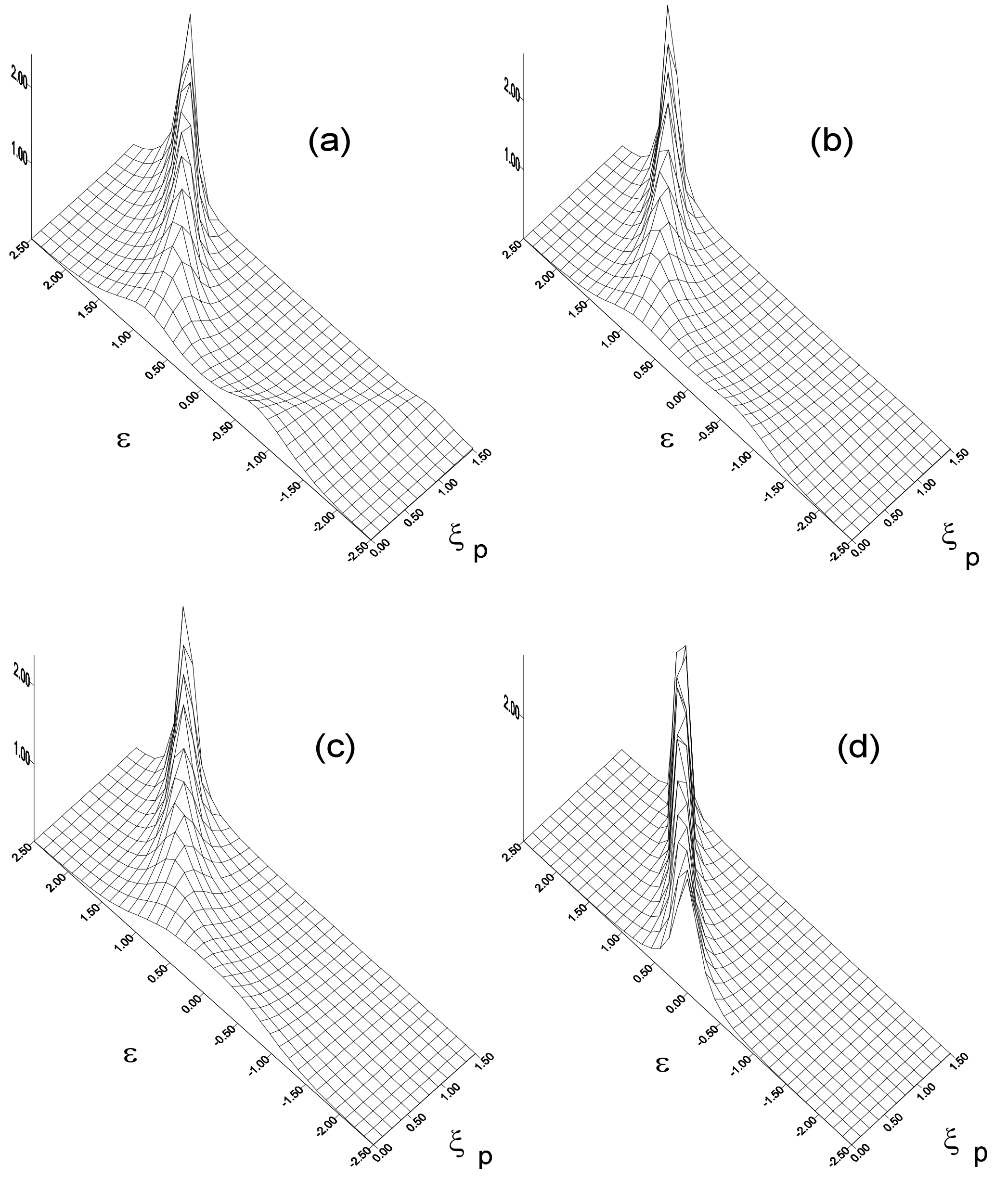



Рис. 6.28: Двумерные поверхности спектральной плотности $A(\varepsilon, \xi_p)$ для: (a) — $\Gamma = 0.1$; (b) — $\Gamma = 0.5$; (c) — $\Gamma = 1.0$; (d) — $\Gamma = 5.0$. Все энергии приведены в единицах $\Delta$.

Результаты расчетов показаны на Рис. 6.28 для различных значений безразмерного параметра $\Gamma = v_F\kappa/\Delta = v_F\xi^{-1}/\Delta$. Как мы знаем, в случае хорошо определенных квазичастиц спектральная плотность дается $\delta(\varepsilon - \xi_p)$ или аналогичным узким пиком, слегка размытым вокруг значения энергии квазичастицы $\xi_p$. Однако в данной модели, при малых значениях $\Gamma$, т.е. при достаточно больших корреляционных длинах $\xi \gg v_F/\Delta$, наше решение для спектральной плотности не имеет квазичастичного вида. Напротив, спектральная плотность имеет характерную двухпиковую (псевдощелевую) структуру, обусловленную сильной перенормировкой флуктуациями ближнего порядка (в пределе $\xi \to \infty$ ($\kappa \to 0$) она сводится к Рис. 6.22), и непрерывно переходит в один пик по мере того, как мы удаляемся от уровня Ферми (для больших $\varepsilon, \xi_p \gg \Delta$). Второй пик в спектральной плотности обычно связывается с так называемой "теневой зоной". Аналогичным образом, при достаточно больших значениях $\Gamma$ (малых корреляционных длинах $\xi \ll v_F/\Delta$), мы снова получаем квазисвободное однопиковое поведение при $\epsilon \sim \xi_p$, соответствующее слабо затухающим квазичастицам.

Физическая причина для квазисвободного поведения при малых $\xi$ (больших $\kappa$) вполне ясна. В пределе $\xi = \kappa^{-1} \to 0$ эффективное взаимодействие с флуктуациями (6.196) становится короткодействующим, но не сводится к обычному пределу типа "белого шума". Хотя в этом пределе в интегралах по $Q$ (в собственно – энергетической части) становятся существенными все импульсы, амплитуда рассеяния становится порядка $\Delta^2/\kappa$, так что частота рассеяния, оцененная по "золотому правилу" Ферми, $2\pi N_0(E_F)\Delta^2/\kappa = \Delta^2/v_F\kappa = \Delta/\Gamma \to 0$, при $\kappa \to \infty$ (здесь мы использовали $N_0(E_F) = 1/2\pi v_F$ для плотности состояний на уровне Ферми в одномерном случае). Соответственно, в пределе $\kappa \to \infty$ электроны становятся эффективно "свободными" (также, как и при существенном удалении от уровня Ферми).

Обсудим теперь плотность состояний:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0(E_F)} = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p A(\varepsilon, \xi_p) \tag{6.229}$$

Результаты расчетов для различных значений $\Gamma = v_F\kappa/\Delta = v_F\xi^{-1}/\Delta$ показаны на Рис. 6.29 сплошными кривыми. Видим, что при конечных значениях $\kappa = \xi^{-1}$ плотность состояний на уровне Ферми становится конечной (ср. Рис. 6.23). Псевдощель постепенно "замывается"(или "заполняется") из–за дополнительного рассеяния, вызванного конечностью корреляционной длины[21] и полностью исчезает при $v_F\kappa \gg \Delta$.

Пунктирные кривые на Рис. 6.29 показывают результаты практически *точного* численного моделирования плотности состояний в нашей (одномерной) модели, полученные "грубой силой", т.е. прямым численным решением уравнения Шредингера для множества конфигураций гауссова случайного поля (с коррелятором (6.196)) с последующим усреднением (L.Bartosch, P.Kopietz, 1999). Ясно видно, что наше приближение (основанное на *Ansatz*'е (6.213) для вкладов диаграмм высших порядков), фактически, дает очень хорошие результаты в *количественном* согласии с численным моделированием, кроме, может быть, непосредственной окрестности уровня Ферми (центра псевдощели)[22] (ср. (6.199), (6.200)). В тоже время очевидно, что наш метод имеет много преимуществ, по сравнению с "прямым" численным моделированием, псокольку он гораздо более экономен с точки зрения машинного времени, а также допускает обощение на более сложные ситуации. Например, он непосредственно обобщается на двумерный случай (весьма важный, с точки зрения описания псевдощелевого поведения в высокотемпературных сверхпроводниках на основе оксидов меди)[23].

### 6.5.3 Электромагнитный отклик.

Замечательной особенностью рассматриваемой модели является также возможность получить точное решение (просуммировать *все* диаграммы) и для функции отклика на внешнее электромагнитное поле (поляризационного оператора) (М.В.Садовский, 1974).

[21] Физически, мы имеем здесь дело с электроном, распространяющемся в системе случайных одномерных "кластеров" с размерами порядка $\xi$, с "периодическим" полем $2W\cos(Qx+\phi)$ в $Q \sim 2p_F$ внутри каждого такого "кластера", амплитуда которого $W$ случайна и распределена "почти" по Рэлею (6.207).

[22] В случае соизмеримых флуктуаций аналогичное сравнение показывает, что наш *Ansatz* менее точен — он не описывает появление так называемой дайсоновской сингулярности плотности состояний в центре псевдощели (L.Bartosch, P.Kopietz, 1999).

[23] Дальнейшие подробности можно найти в обзоре автора: М.В.Садовский. УФН **171**, 539 (2001).

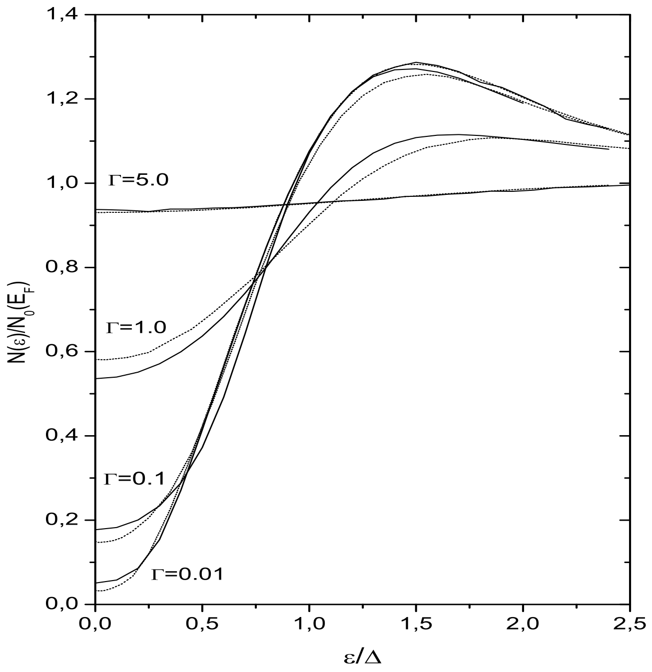



Рис. 6.29: Плотность состояний с псевдощелью для различных значений $\Gamma = v_F\kappa/\Delta$. Сплошные линии — наше приближение. Пунктирные линии – результаты точного численного моделирования (L.Bartosch, P.Kopietz, 1999).

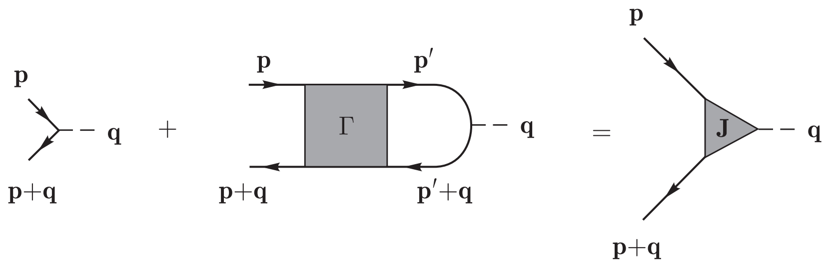



Рис. 6.30: Изменение функции Грина во внешнем электромагнитном поле.

Выпишем сначала некоторые соотношения общего характера в технике $T = 0$. Подвергнем систему воздействию слабого внешнего вектор – потенциала:

$$\delta H_{int} = -\frac{e}{mc}\int d^3r\psi^+(\mathbf{r})\mathbf{p}\cdot\delta\mathbf{A}(\mathbf{r}t)\psi(\mathbf{r}) \tag{6.230}$$

где $\delta\mathbf{A}(\mathbf{r}t) = \delta\mathbf{A}_{\mathbf{q}\omega}e^{i\mathbf{qr}-i\omega t}$. Соответствующая вариация одноэлектронной функции Грина записывается в виде [1]:

$$\delta G(\varepsilon\mathbf{p}) = -G(\varepsilon\mathbf{p})\frac{e}{mc}(\mathbf{p}\cdot\delta\mathbf{A}_{\mathbf{q}\omega})G(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q}) +$$
$$+iG(\varepsilon\mathbf{p})G(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\int\frac{d\varepsilon'}{2\pi}\Gamma(\varepsilon\mathbf{p},\varepsilon'\mathbf{p}';\mathbf{q}\omega)G(\varepsilon'\mathbf{p}')\frac{e}{mc}(\mathbf{p}'\cdot\delta\mathbf{A}_{\mathbf{q}\omega})G(\varepsilon'+\omega\mathbf{p}'+\mathbf{q}) \tag{6.231}$$

или

$$\delta G(\varepsilon\mathbf{p}) = G(\varepsilon\mathbf{p})\mathbf{J}(\varepsilon\mathbf{p};\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})G(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\delta\mathbf{A}_{\mathbf{q}\omega} \tag{6.232}$$

что показано графически на Рис. 6.30. Отсюда, кстати, ясно что для свободной функции Грина:

$$\delta G_0(\varepsilon\mathbf{p}) = -G_0(\varepsilon\mathbf{p})\frac{e}{mc}\mathbf{p}G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\delta\mathbf{A}_{\mathbf{q}\omega} \equiv G_0(\varepsilon\mathbf{p})\mathbf{J}_0(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\delta\mathbf{A}_{\mathbf{q}\omega} \tag{6.233}$$

где

$$\mathbf{J}_0(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q}) = -\frac{e}{mc}\mathbf{p} \tag{6.234}$$

– свободная “токовая” вершина. Полная вершина определяется из (6.232) как:

$$\mathbf{J}(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q}) = -\frac{\delta G^{-1}(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta\mathbf{A}_{\mathbf{q}\omega}} \tag{6.235}$$

Совершенно аналогичные формулы возникают и при описании реакции системы на скалярный потенциал:

$$\delta H_{int} = e\int d^3r\psi^+(\mathbf{r})\delta\varphi(\mathbf{r}t)\psi(\mathbf{r}) \tag{6.236}$$

где $\delta\varphi(\mathbf{r}t) = \delta\varphi_{\mathbf{q}\omega}e^{i\mathbf{qr}-i\omega t}$. В частности, аналогично (6.231) имеем:

$$\delta G(\varepsilon\mathbf{p}) = G(\varepsilon\mathbf{p})e\delta\varphi_{\mathbf{q}\omega}G(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q}) +$$
$$-iG(\varepsilon\mathbf{p})G(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\int\frac{d\varepsilon'}{2\pi}\Gamma(\varepsilon\mathbf{p},\varepsilon'\mathbf{p}';\mathbf{q}\omega)G(\varepsilon'\mathbf{p}')e\delta\varphi_{\mathbf{q}\omega}G(\varepsilon'+\omega\mathbf{p}'+\mathbf{q}) \tag{6.237}$$

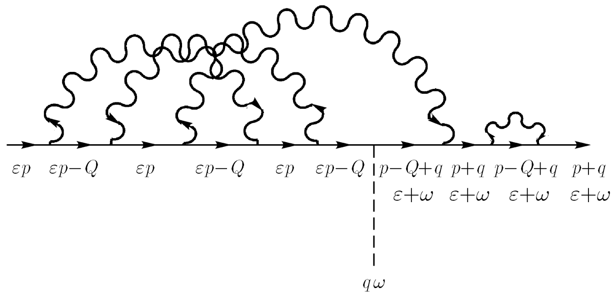



Рис. 6.31: График произвольного порядка для вершинной части взаимодействия с внешним электромагнитным полем.

или

$$\delta G(\varepsilon\mathbf{p}) = G(\varepsilon\mathbf{p})J_0(\varepsilon\mathbf{p};\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})G(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\delta\varphi_{\mathbf{q}\omega} \tag{6.238}$$

где введена, по определению, "скалярная" вершина $J_0(p;p+q)$:

$$J^0(p;p+q) = -\frac{\delta G^{-1}(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta\varphi_{\mathbf{q}\omega}} \tag{6.239}$$

Графически (6.238) изображается опять Рис. 6.30. Аналогично (6.233):

$$\delta G_0(\varepsilon\mathbf{p}) = G_0(\varepsilon\mathbf{p})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})e\delta\varphi_{\mathbf{q}\omega} \equiv G_0(\varepsilon\mathbf{p})J_0^0(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\delta\varphi_{\mathbf{q}\omega} \tag{6.240}$$

где $J_0^0(p;p+q) = e$ – "свободная" вершина.

Вообще удобно ввести общее определение вершины:

$$J^\mu(p;p+q) = -\frac{\delta G^{-1}(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_\mu(\mathbf{q}\omega)} \tag{6.241}$$

где $A_\mu(\mathbf{q}\omega) = \{\varphi_{\mathbf{q}\omega}, \mathbf{A}_{\mathbf{q}\omega}\}$, так что "свободная" вершина равна:

$$J_0^\mu(p;p+q) = \begin{cases} -\frac{e}{mc}\mathbf{p} & \mu = 1,2,3 \\ e & \mu = 0 \end{cases} \tag{6.242}$$

или

$$\frac{\delta G_0(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_\mu(\mathbf{q}\omega)} = G_0(\varepsilon\mathbf{p})J_0^\mu(p;p+q)G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q}) \tag{6.243}$$

тогда как для "полной" функции Грина:

$$\frac{\delta G(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_\mu(\mathbf{q}\omega)} = G(\varepsilon\mathbf{p})J^\mu(p;p+q)G(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q}) \tag{6.244}$$

Теперь пора перейти к делу! Из предыдущего обсуждения ясно, что произвольная диаграмма, описывающая отклик на внешнее поле, может быть получена из произвольной диаграммы для функции Грина (типа Рис. 6.21) "вставкой" в любую из электронных линий линии внешнего поля, как это показано на Рис. 6.31 (причем нужно перебрать все возможные "вставки"). Проводя таким образом "дифференци-

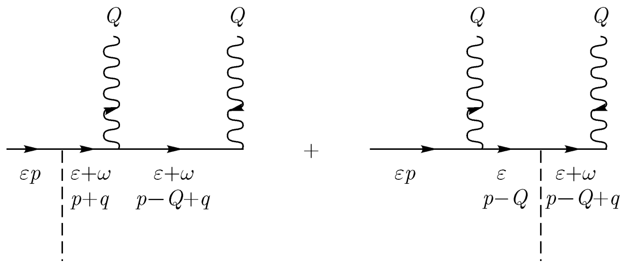



Рис. 6.32: Графики для функциональной производной "блока" $z(\varepsilon\mathbf{p})$.

рование" ряда (6.203)[24], получим ($m$ – номер "блока" $z$, в который вставляется линия $A^{\mu}(\mathbf{q}\omega)$):

$$\frac{\delta G(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_{\mu}(\mathbf{q}\omega)} = \left\langle \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{n}(\zeta z(\varepsilon\mathbf{p}))^{m-1}\zeta\frac{\delta z}{\delta A_{\mu}(\mathbf{q}\omega)}(\zeta z(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q}))^{n-m}G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})+ \right.$$
$$\left. + \sum_{n=0}^{\infty}(\zeta z(\varepsilon\mathbf{p}))^{n}\frac{\delta G_0(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_{\mu}(\mathbf{q}\omega)}\right\rangle_{\zeta} \tag{6.245}$$

Здесь $\frac{\delta G_0(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_{\mu}(\mathbf{q}\omega)}$ определяется из (6.243), а производная "блока" $z(\varepsilon\mathbf{p})$ определяется Рис. 6.32 и равна:

$$\frac{\delta z(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_{\mu}(\mathbf{q}\omega)} = \Delta^2 G_0(\varepsilon\mathbf{p})J_0^{\mu}(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q}) +$$
$$+\Delta^2 G_0(\varepsilon\mathbf{p})G_0(\varepsilon\mathbf{p}-\mathbf{Q})J_0^{\mu}(\mathbf{p}-\mathbf{Q};\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q}) =$$
$$= G_0(\varepsilon\mathbf{p})J_0^{\mu}(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q})z(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q}) + z(\varepsilon\mathbf{p})J_0^{\mu}(\mathbf{p}-\mathbf{q};\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q}) \tag{6.246}$$

Подставляя (6.246) в (6.245), и учитывая (6.243), получим:

$$\frac{\delta G(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_{\mu}(\mathbf{q}\omega)} = \left\langle \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{n}(\zeta z(\varepsilon\mathbf{p}))^{m-1}(\zeta z(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q}))^{n-m+1}G_0(\varepsilon\mathbf{p})J_0^{\mu}(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})}_{I} + \right.$$
$$+\underbrace{\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{n}(\zeta z(\varepsilon\mathbf{p}))^{m}(\zeta z(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q}))^{n-m}G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q})J_0^{\mu}(\mathbf{p}-\mathbf{Q};\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})}_{II}$$
$$\left. + \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty}(\zeta z(\varepsilon\mathbf{p}))^{n}G_0(\varepsilon\mathbf{p})J_0^{\mu}(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})}_{III}\right\rangle_{\zeta} \tag{6.247}$$

Первый и третий вклады в этом выражении объединяются и дают:

$$< I + III >_{\zeta} = \left\langle J_0^{\mu}(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon\mathbf{p})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\left\{\sum_{n=0}^{\infty}\zeta^n z(\varepsilon\mathbf{p})+\right.\right.$$

[24] По сути дела мы здесь в явном виде проводим функциональное дифференцирование полного ряда теории возмущений для одноэлектронной функции Грина и "генерируем" все графики для соответствующей вершинной части.

$$+\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{n}\zeta^{m-1}z^{m-1}(\varepsilon\mathbf{p})\zeta^{n-m+1}z^{n-m+1}(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\Big\}\Big\rangle_{\zeta}=(m-1\to m)$$
$$=J_0^{\mu}(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon\mathbf{p})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\left\langle\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{n}\zeta^{m}z^{m}(\varepsilon\mathbf{p})\zeta^{n-m}z^{n-m}(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\right\rangle_{\zeta}=$$
$$=\left\langle J_0^{\mu}(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon\mathbf{p})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\sum_{n=0}^{\infty}\zeta^{n}z^{n}(\varepsilon\mathbf{p})\sum_{m=0}^{\infty}\zeta^{m}z^{m}(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\right\rangle_{\zeta} \tag{6.248}$$

где также использовано правило умножения рядов: $\left(\sum_{n=0}^{\infty}a_n\right)\left(\sum_{m=0}^{\infty}b_m\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{n}a_nb_{n-m}$.

Тогда, используя (6.203), получаем:

$$<I+III>_{\zeta}=J_0^{\mu}(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q})<G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon\mathbf{p})G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})>_{\zeta} \tag{6.249}$$

где

$$G_{\Delta^2}(\varepsilon\mathbf{p})=\frac{\varepsilon+\xi_p}{\varepsilon^2-\xi_p^2-\Delta^2}\qquad(\varepsilon\to\varepsilon\pm i\delta) \tag{6.250}$$

– нормальная функция Грина пайерлсовского диэлектрика.

Аналогичный счет для второго слагаемого в (6.247) дает:

$$<II>_{\zeta}=J_0^{\mu}(\mathbf{p}-\mathbf{Q};\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q})G_0(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\times$$
$$\times\left\langle\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{n}\zeta^{m}z^{m}(\varepsilon\mathbf{p})\zeta^{n-m}z^{n-m}(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\right\rangle_{\zeta}=$$
$$=J_0^{\mu}(\mathbf{p}-\mathbf{Q};\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q})\left\langle\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{n}\zeta^{m}z^{m}(\varepsilon\mathbf{p})\zeta^{n-m}z^{n-m+1}(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\frac{1}{\zeta\Delta^2}\right\rangle_{\zeta}=$$
$$=J_0^{\mu}(\mathbf{p}-\mathbf{Q};\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q})\left\langle\frac{1}{\zeta\Delta^2}\sum_{n=1}^{\infty}\zeta^{n}z^{n}(\varepsilon\mathbf{p})\sum_{m=1}^{\infty}\zeta^{m}z^{m}(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\right\rangle_{\zeta}=$$
$$=J_0^{\mu}(\mathbf{p}-\mathbf{Q};\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q})<F_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon\mathbf{p})F^{+}_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})>_{\zeta} \tag{6.251}$$

где возникло “$\zeta$ – среднее” от произведения двух *аномальных* функций Грина пайерлсовского диэлектрика:

$$F^{+}_{\Delta^2}(\varepsilon)=\frac{\Delta}{\varepsilon^2-\xi_p^2-\Delta^2}\qquad(\varepsilon\to\varepsilon\pm i\delta) \tag{6.252}$$

несмотря на очевидное отсутствие в системе пайерлсовского дальнего порядка! При этом мы использовали $\left(\sum_{n=1}^{\infty}a_n\right)\left(\sum_{m=0}^{\infty}b_m\right)=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{n}a_nb_{n-m+1}$ и просуммировали прогрессии в предпоследнем члене (6.251).

Таким образом, окончательно получаем:

$$\frac{\delta G(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_{\mu}(\mathbf{q}\omega)}=G(\varepsilon\mathbf{p})J^{\mu}G(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})=$$
$$=\int_0^{\infty}d\zeta e^{-\zeta}\left\{G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon\mathbf{p})J_0^{\mu}(\mathbf{p};\mathbf{p}+\mathbf{q})G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})+\right.$$
$$\left.+F_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon\mathbf{p})J_0^{\mu}(\mathbf{p}-\mathbf{Q};\mathbf{p}-\mathbf{Q}+\mathbf{q})F^{+}_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon+\omega\mathbf{p}+\mathbf{q})\right\} \tag{6.253}$$

что изображается графиками, показанными на Рис. 6.33. Подчеркнем, что этот результат получается суммированием *всех* диаграмм теории возмущений для вершинной части. Этот ответ “почти очевиден”, если вспомнить характер случайного поля, в котором движется электрон в рассматриваемой модели (ср. замечание после

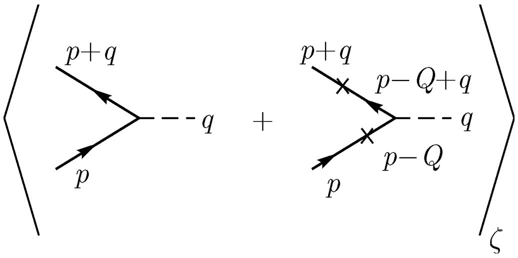



Рис. 6.33: Графическое представление функциональной производной $G(\varepsilon\mathbf{p})$.

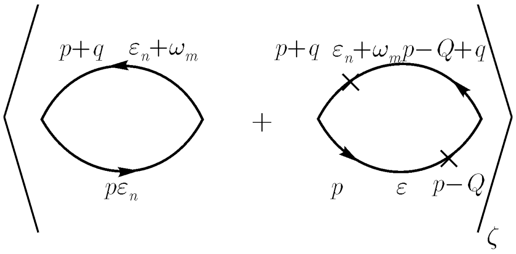



Рис. 6.34: Поляризационный оператор в модели псевдощелевого состояния.

(6.206)) — у нас и должен был возникнуть “диэлектрический” отклик, усредненный по флуктуациям щели.

Теперь можно сразу выписать и соответствующий поляризационный оператор (который пишем уже в мацубаровской технике):

$$
\Pi(\mathbf{q}\omega_m) = \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} 2T \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \Big\{ G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_n \mathbf{p}) G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_n + \omega_m \mathbf{p} + \mathbf{q}) + \\
+ F_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_n \mathbf{p}) F^+_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_n + \omega_m \mathbf{p} + \mathbf{q}) \Big\} = < \Pi_{\zeta\Delta^2}(\mathbf{q}\omega_m) >_\zeta \quad (6.254)
$$

что представляется диаграммами, показанными на Рис. 6.34. Видим, что под знаком усреднения по флуктуациям щели тут стоит просто поляризационный оператор пайерлсовского диэлектрика. Соответственно, структура (точного!) решения для электромагнитного отклика в рассматриваемой модели совершенно ясна — нужно рассчитать отклик пайерлсовского диэлектрика (с фиксированной щелью в спектре), а потом усреднить результат по флуктуациям щели. Таким образом, в ходе дальнейших вычислений, мы анализируем сразу две задачи — отклик пайерлсовского диэлектрика и отклик в точно решаемой модели псевдощелевого состояния.

Проведем подробный расчет $\Pi_{\Delta^2}(\mathbf{q}\omega_m)$ — поляризационного оператора пайерлсовского диэлектрика с фиксированной щелью. Подставляя в соответствующее выражение, следующее из (6.254), нормальную и аномальную функции Грина пайерлсовского диэлектрика в виде[25]:

$$
G_{\Delta^2}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{u_p^2}{i\varepsilon_n - E_p} + \frac{v_p^2}{i\varepsilon_n + E_p} \quad (6.255)
$$

$$
F^+_{\Delta^2}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{\Delta}{(i\varepsilon_n - E_p)(i\varepsilon_n + E_p)} \quad (6.256)
$$

[25]В дальнейшем $\Delta$ можно считать вещественной.

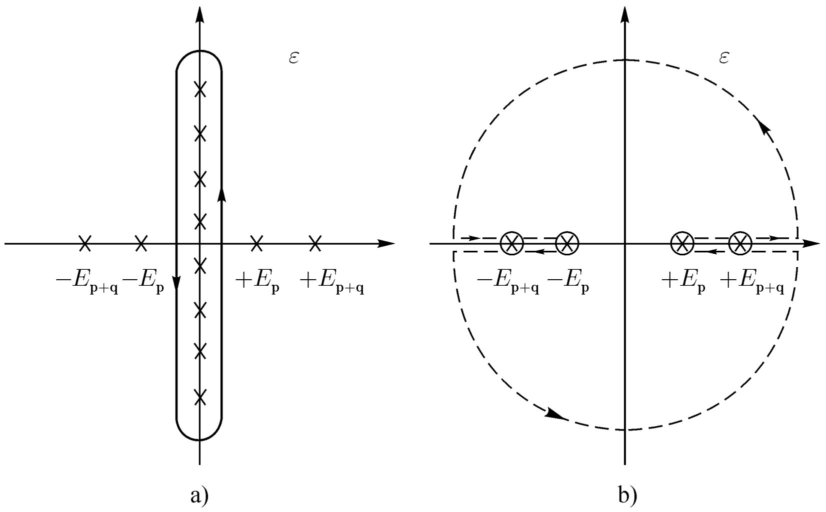



Рис. 6.35: Контура интегрирования, используемые при вычислении суммы по фермиевским частотам в поляризационном операторе.

где

$$u_p^2 = \frac{1}{2}\left\{1 + \frac{\xi_p}{E_p}\right\}, \qquad v_p^2 = \frac{1}{2}\left\{1 - \frac{\xi_p}{E_p}\right\} \tag{6.257}$$

где $E_p = \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}$, записываем сумму по фермиевским частотам в виде контурного интеграла (3.38) и получаем:

$$\Pi_{\Delta^2}(\mathbf{q}\omega_m) = -2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi i}\int_C \frac{d\varepsilon}{2\pi}n(\varepsilon)\left\{\frac{u_p^2 u_{p+q}^2}{(\varepsilon - E_p)(\varepsilon + i\omega_m - E_{p+q})} + \right.$$
$$+\frac{v_p^2 v_{p+q}^2}{(\varepsilon + E_p)(\varepsilon + i\omega_m + E_{p+q})} + \frac{u_p^2 v_{p+q}^2}{(\varepsilon - E_p)(\varepsilon + i\omega_m + E_{p+q})} +$$
$$\left. + \frac{v_p^2 u_{p+q}^2}{(\varepsilon + E_p)(\varepsilon + i\omega_m - E_{p+q})} + \frac{\Delta^2}{(\varepsilon + E_p)(\varepsilon - E_p)(\varepsilon + i\omega_m - E_{p+q})(\varepsilon + i\omega_m + E_{p+q})}\right\} \tag{6.258}$$

где контур интегрирования $C$ показан на Рис. 6.35 (a). Этот контур можно деформировать, как показано на Рис. 6.35 (b), а затем "растянуть" на бесконечность. Тогда интеграл определяется вкладом четырех полюсов $\varepsilon = \pm E_p$ и $\varepsilon = \pm E_{p+q}$. Вычисляя соответствующие вычеты, используя свойства фермиевской функции: $n(\varepsilon + i\omega_m) = n(\varepsilon)$, где $\omega_m = 2\pi mT$, и $n(-\varepsilon) = 1 - n(\varepsilon)$, приводя подобные члены и переходя от интегрирования по $dp$ к интегрированию по $d\xi_p$ (учитывая при этом вклад от обоих "концов" поверхности Ферми, что дает дополнительный фактор 2), получаем:

$$\Pi_{\Delta^2}(\mathbf{q}\omega_m) = 2N_0(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}d\xi_p\frac{1}{E_p - E_{p+q} + i\omega_m}[n(E_p) - n(E_{p+q})]\left\{u_p^2 u_{p+q}^2 + \frac{\Delta^2}{4E_pE_{p+q}}\right\} +$$
$$+2N_0(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}d\xi_p\frac{1}{E_p - E_{p+q} - i\omega_m}[n(E_p) - n(E_{p+q})]\left\{v_p^2 v_{p+q}^2 + \frac{\Delta^2}{4E_pE_{p+q}}\right\} +$$
$$+2N_0(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}d\xi_p\frac{1}{E_p + E_{p+q} + i\omega_m}[n(E_p) + n(E_{p+q}) - 1]\left\{u_p^2 v_{p+q}^2 - \frac{\Delta^2}{4E_pE_{p+q}}\right\} +$$

$$+2N_0(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}d\xi_p\frac{1}{E_p+E_{p+q}-i\omega_m}[n(E_p)+n(E_{p+q})-1]\left\{v_p^2u_{p+q}^2-\frac{\Delta^2}{4E_pE_{p+q}}\right\} \tag{6.259}$$

где $N_0(E_F)$ – плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми для обеих проекций спина. Далее, сюда надо подставить:

$$u_p^2u_{p+q}^2=\frac{1}{4}\left\{1+\frac{\xi_p\xi_{p+q}}{E_pE_{p+q}}+\frac{\xi_p}{E_p}+\frac{\xi_{p+q}}{E_{p+q}}\right\},\qquad v_p^2v_{p+q}^2=\frac{1}{4}\left\{1+\frac{\xi_p\xi_{p+q}}{E_pE_{p+q}}-\frac{\xi_p}{E_p}-\frac{\xi_{p+q}}{E_{p+q}}\right\}$$
$$u_p^2v_{p+q}^2=\frac{1}{4}\left\{1-\frac{\xi_p\xi_{p+q}}{E_pE_{p+q}}+\frac{\xi_p}{E_p}-\frac{\xi_{p+q}}{E_{p+q}}\right\},\qquad v_p^2u_{p+q}^2=\frac{1}{4}\left\{1-\frac{\xi_p\xi_{p+q}}{E_pE_{p+q}}-\frac{\xi_p}{E_p}+\frac{\xi_{p+q}}{E_{p+q}}\right\} \tag{6.260}$$

Члены линейные по $\xi_p$ и $\xi_{p+q}$ выпадают при интегрировании из-за нечетности.

После аналитического продолжения $i\omega_m\to\omega+i\delta$ окончательно получаем[26]:

$$\Pi_{\Delta^2}(\mathbf{q}\omega)=\frac{1}{2}N_0(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}d\xi_p\left\{\frac{E_pE_{p+q}+\xi_p\xi_{p+q}+\Delta^2}{E_pE_{p+q}}\right\}[n(E_p)-n(E_{p+q})]\times$$
$$\times\left\{\frac{1}{E_p-E_{p+q}+\omega+i\delta}+\frac{1}{E_p-E_{p+q}-\omega-i\delta}\right\}-$$
$$-\frac{1}{2}N_0(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{E_pE_{p+q}-\xi_p\xi_{p+q}-\Delta^2}{E_pE_{p+q}}\right\}[1-n(E_p)-n(E_{p+q})]\times$$
$$\times\left\{\frac{1}{E_p+E_{p+q}+\omega+i\delta}+\frac{1}{E_p+E_{p+q}-\omega-i\delta}\right\} \tag{6.261}$$

Это и есть общее выражение для поляризационного оператора пайерлсовского диэлектрика с фиксированной щелью $\Delta^2$. При $\Delta^2\to 0$ второе слагаемое в (6.261) стремится к нулю, а первое дает обычный (запаздывающий) поляризационный оператор электронного газа. С другой стороны, при $T\to 0$, но $\Delta^2\neq 0$, первое слагаемое в (6.261) обращается в нуль, так что для поляризационного оператора при $T=0$ имеем:

$$\Pi_{\Delta^2}(\mathbf{q}\omega)=-\frac{1}{2}N_0(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}d\xi_p\left\{\frac{E_pE_{p+q}-\xi_p\xi_{p+q}-\Delta^2}{E_pE_{p+q}}\right\}\left\{\frac{1}{E_p+E_{p+q}+\omega+i\delta}+\right.$$
$$\left.+\frac{1}{E_p+E_{p+q}-\omega-i\delta}\right\} \tag{6.262}$$

Проводя простые разложения[27] в ряд по степеням $q$ в пределе $v_Fq\ll\Delta$ получаем:

$$\Pi_{\Delta^2}(q\omega)=-\frac{1}{2}N_0(E_F)v_F^2q^2\int_0^{\infty}d\xi_p\left\{\frac{1}{2E_p+\omega+i\delta}+\frac{1}{2E_p-\omega-i\delta}\right\}\frac{\Delta^2}{E_p^4} \tag{6.263}$$

[26] Аналогичные вычисления для сверхпроводника дают результат, отличающийся знаком перед $\Delta^2$ в числителе подинтегрального выражения, что связано с антисимметрией горьковской функции Грина $F_{\alpha\beta}$ по спиновым индексам (5.53). Соответственно, в выражении для поляризационного оператора сверхпроводника $\Pi_{\Delta^2}(\mathbf{q}\omega)$, по сравнению с соответствующим выражением из (6.254), происходит замена $FF^+\to -FF^+$. Такое выражение определяет, например, поглощение ультразвука в сверхпроводнике [4], однако оно непригодно для вычисления проводимости $\sigma(\omega)$ сверхпроводника с помощью формулы типа (2.110). Корректное выражение для поляризационного оператора (диэлектрической проницаемости) сверхпроводника должно учитывать вклад коллективных колебаний (R.Prange, 1963). При вычислении $FF^+$ петли с "токовыми" вершинами для сверхпроводника отмеченное изменение знака компенсируется сменой относительного знака этих вершин, поскольку $F$ – функции Горькова описывают переходы типа $\pm\mathbf{p}\to\mp\mathbf{p}$. В результате получаем комбинацию знаков, выписанную выше в (5.262).

[27] А именно, для $p\sim +p_F$ и $q>0$, имеем: $\xi_{p+q}\approx\xi_p+v_Fq$,

$E_{p+q}=\sqrt{\xi_{p+q}^2+\Delta^2}\approx E_p+v_Fq\frac{\xi_p}{E_p}+\frac{1}{2}v_F^2q^2\frac{\Delta^2}{E_p^3}$

Соответственно:

Отсюда:

$$Re\Pi_{\Delta^2}(q\omega) = -\frac{1}{2}N_0(E_F)v_F^2q^2\int_0^\infty d\xi_p\left\{\frac{1}{2E_p+\omega}+\frac{1}{2E_p-\omega}\right\}\frac{\Delta^2}{E_p^4} \tag{6.264}$$

$$Im\Pi_{\Delta^2}(q\omega) = \frac{\pi}{2}N_0(E_F)v_F^2q^2\int_0^\infty d\xi_p\frac{\Delta^2}{E_p^4}\left\{\delta(2E_p+\omega)-\delta(2E_p-\omega)\right\} \tag{6.265}$$

Перейдем теперь к вычислению диэлектрической проницаемости и проводимости. Используя стандартное определение (2.8), имеем:

$$Re\epsilon_{\Delta^2}(q\omega) = 1-\frac{4\pi e^2}{q^2}Re\Pi_{\Delta^2}(q\omega) \tag{6.266}$$

$$Im\epsilon_{\Delta^2}(q\omega) = -\frac{4\pi e^2}{q^2}Im\Pi_{\Delta^2}(q\omega) \tag{6.267}$$

Тогда из (6.264) и (6.265) получим:

$$Re\epsilon_{\Delta^2}(q\omega) = 1+\frac{\omega_p^2}{4}\int_0^\infty d\xi_p\frac{1}{E_p^2-\frac{\omega^2}{4}}\frac{\Delta^2}{E_p^3} \tag{6.268}$$

$$Im\epsilon_{\Delta^2}(q\omega) = \frac{\pi}{4}\omega_p^2\int_0^\infty d\xi_p\frac{\Delta^2}{(\xi_p^2+\Delta^2)^2}\left\{\delta(2E_p-\omega)-\delta(2E_p+\omega)\right\} \tag{6.269}$$

где ввели:

$$\omega_p^2 = v_F\kappa_D^2, \qquad \kappa_D^2 = 8\pi e^2N_0(E_F) \tag{6.270}$$

— квадраты плазменной частоты и обратного радиуса экранирования[28].

При $\omega = 0$ (6.262) сводится к:

$$\Pi_{\Delta^2}(q0) = -2N_0(E_F)\int_0^\infty d\xi_p\frac{E_pE_{p+q}-\xi_p\xi_{p+q}-\Delta^2}{E_pE_{p+q}}\frac{1}{E_p+E_{p+q}} \tag{6.271}$$

При $v_Fq \ll \Delta$ отсюда (или из (6.264)) получаем:

$$\Pi_{\Delta^2}(q0) = -\frac{1}{2}N_0(E_F)v_F^2q^2\int_0^\infty d\xi_p\frac{\Delta^2}{E_p^5} = -\frac{1}{3}N_0(E_F)\frac{v_F^2q^2}{\Delta^2} \tag{6.272}$$

что дает (пользуемся также (6.270)):

$$\epsilon_{\Delta^2}(q0) = 1+\frac{4\pi e^2N_0(E_F)v_F^2}{3\Delta^2} = 1+\frac{\omega_p^2}{6\Delta^2} \tag{6.273}$$

---

$\xi_p\xi_{p+q} \approx \xi_p^2+v_Fq\xi_p$

$E_pE_{p+q} \approx E_p^2+v_Fq\xi_p+\frac{1}{2}v_F^2q^2\frac{\Delta^2}{E_p^2}$

так что входящая в $\Pi_{\Delta^2}(\mathbf{q}\omega)$ комбинация:

$E_pE_{p+q}-\xi_p\xi_{p+q}-\Delta^2 \approx \frac{1}{2}v_F^2q^2\frac{\Delta^2}{\xi_p^2+\Delta^2}$.

[28] С учетом того, что для $d=1$ имеем $n=\frac{2p_F}{\pi}$, $p_F=\frac{\pi}{2}n$, имеем $v_F^2\kappa_D^2 = 8\pi e^2v_F^2\frac{1}{\pi v_F} = 4e^2v_F = 4e^2\frac{p_F}{m} = \frac{4\pi ne^2}{m}$, что совпадает с обычным определением плазменной частоты. Если подразумевается трехмерная система, состоящая из одномерных цепочек, то используемые здесь выражения для поляризационных операторов нужно еще умножить на число цепочек, приходящихся на единицу площади поперечного сечения образца, т.е. на $1/a^2$, где $a$ – постоянная двумерной (для простоты квадратной) решетки, образуемой цепочками в ортогональной плоскости. Тогда все выписанные формулы остаются справдливыми, только под $n$ уже следует понимать трехмерную плотность электронов.

— статическую диэлектрическую проницаемость пайерлсовского диэлектрика.

При $v_F q \gg \Delta$ из (6.261) получаем (детали вычислений опускаем):

$$\Pi_{\Delta^2}(q0) = 2N_0(E_F) = \frac{\kappa_D^2}{4\pi e^2} \tag{6.274}$$

так что:

$$\epsilon(q0) = 1 + \frac{\kappa_D^2}{q^2} \tag{6.275}$$

где опять учли (6.270). Выражение (6.275) очевидно соответствует дебаевской экранировке в *металле* — при $v_F q \gg \Delta$ пайерлсовская щель становится несущественной!

Возвращаясь к случаю $\omega \neq 0$ и $v_F q \ll \Delta$, запишем (6.264) как:

$$Re\epsilon_{\Delta^2} = 1 + \frac{\omega_p^2}{4}\int_0^\infty d\xi_p \frac{\Delta^2}{(\xi_p^2+\Delta^2)^{3/2}} \frac{1}{\xi_p^2+\Delta^2-\frac{\omega^2}{4}} \tag{6.276}$$

При $\omega \to 0$ ($\omega \ll 2\Delta$) отсюда естественно следует (6.273), а при $\omega \gg 2\Delta$ мы получаем обычный плазменный предел:

$$Re\epsilon_{\Delta^2}(\omega \gg 2\Delta) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \tag{6.277}$$

Полное выражение (6.276) описывает плавный переход от (6.273) к (6.277), происходящий при $\omega \sim 2\Delta$. Подробнее дело выглядит следующим образом. Используя в (6.276) замену переменной $\xi_p = \Delta sh(z)$, после простых преобразований и взятия табличных интегралов, имеем:

$$Re\epsilon_{\Delta^2}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\left\{1 + \frac{2\Delta}{\omega}\frac{1}{\sqrt{1-\frac{\omega^2}{4\Delta^2}}}\left[arctg\left(\sqrt{\frac{4\Delta^2}{\omega^2}-1}\right) - \frac{\pi}{2}\right]\right\} \quad \text{при} \quad \omega^2 < 4\Delta^2 \tag{6.278}$$

$$Re\epsilon_{\Delta^2}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\left\{1 - \frac{2\Delta}{\omega}\frac{1}{\sqrt{\frac{\omega^2}{4\Delta^2}-1}}\left[arcth\left(\sqrt{1-\frac{4\Delta^2}{\omega^2}}\right) - 1\right]\right\} \quad \text{при} \quad \omega^2 > 4\Delta^2 \tag{6.279}$$

откуда и следуют указанные выше предельные случаи.

Рассмотрим теперь подробнее $Im\epsilon_{\Delta^2}(\omega)$. Выражение (6.269) записывается как:

$$Im\epsilon_{\Delta^2}(\omega) = \frac{\pi}{4}\omega_p^2\int_0^\infty d\xi_p \frac{\Delta^2}{(\xi_p^2+\Delta^2)^2}\left\{\delta\left(2\sqrt{\xi_p^2+\Delta^2}-\omega\right) - \delta\left(2\sqrt{\xi_p^2+\Delta^2}+\omega\right)\right\} \tag{6.280}$$

Вычисляя интеграл пользуясь известными формулами $\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x)$ и $\int_y^\infty dx\delta(x-a) = \theta(a-y)$, получим:

$$Im\epsilon_{\Delta^2}(\omega) = \pi\Delta\frac{\omega_p^2}{\omega^3}\frac{\theta(|\omega|-2\Delta)}{\sqrt{\frac{\omega^2}{4\Delta^2}-1}} \tag{6.281}$$

Отсюда для действительной части проводимости имеем:

$$Re\sigma_{\Delta^2}(\omega) = \frac{\omega}{4\pi}Im\epsilon_{\Delta^2}(\omega) = \begin{cases} \frac{ne^2}{m\omega}\frac{\pi}{\sqrt{\frac{\omega^2}{4\Delta^2}-1}}\frac{\Delta}{\omega} & \text{при} \quad |\omega| > 2\Delta \\ 0 \quad \text{при} & |\omega| < 2\Delta \end{cases} \tag{6.282}$$

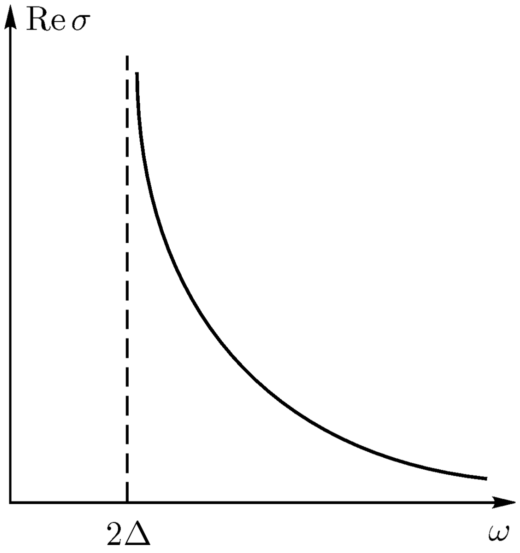



Рис. 6.36: Частотная зависимость действительной части проводимости в пайерлсовском диэлектрике.

Соответствующая частотная зависимость качественно показана на Рис. 6.36. Видим, что поглощение электромагнитной энергии происходит путем возбуждения квазичастиц через пайерлсовскую щель шириной $2\Delta$ и отлично от нуля при $\omega > 2\Delta$. Это типично диэлектрическое поведение.

При $\omega \gg 2\Delta$ имеем:

$$Im\epsilon_{\Delta^2}(\omega) \approx 2\pi\left(\frac{\Delta}{\omega}\right)^2\left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2, \qquad Re\sigma_{\Delta^2}(\omega) \approx \frac{ne^2}{m\omega}2\pi\left(\frac{\Delta}{\omega}\right)^2 \tag{6.283}$$

В псевдощелевом состоянии[29] все эти выражения нужно еще усреднить по флуктуациям $\Delta$, описываемым распределением (6.206) или (6.207). Таким образом из (6.281) и (6.282) получаем:

$$Im\epsilon(\omega) = \pi\Delta\frac{\omega_p^2}{\omega^3}\int_0^{\frac{\omega^2}{4\Delta^2}} d\zeta e^{-\zeta}\frac{\zeta}{\sqrt{\frac{\omega^2}{4\Delta^2}-\zeta}} \tag{6.284}$$

$$Re\sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4}\frac{\Delta}{\omega^2}\int_0^{\frac{\omega^2}{4\Delta^2}} d\zeta e^{-\zeta}\frac{\zeta}{\sqrt{\frac{\omega^2}{4\Delta^2}-\zeta}} \tag{6.285}$$

Результаты численных расчетов этих выражений показаны на Рис. 6.37, 6.38. Аналитически из (6.284) и (6.285) легко показать, что при $\omega \ll 2\Delta$ "работают" следующие асимптотики[30]:

$$Im\epsilon(\omega) \approx \frac{\pi}{6}\frac{\omega_p^2}{\Delta^2}, \qquad Re\sigma(\omega) \approx \frac{1}{24}\left(\frac{\omega_p}{\Delta}\right)^2\omega \to 0 \quad \text{при} \quad \omega \to 0 \tag{6.286}$$

[29] Разумеется здесь речь идет только о нашей чрезвычайно упрощенной модели, соответствующей картине гауссовых флуктуаций CDW – типа с корреляционной длиной $\kappa \to \infty$. Обобщение на случай конечных $\xi$ существенно сложнее и будет рассмотрено ниже.

[30] Это сразу получается с учетом асимптотического поведения интеграла при $a \to 0$: $\int_0^a dxe^{-x}\frac{x}{\sqrt{a-x}} \to \int_0^a dx\frac{x}{\sqrt{a-x}} = \frac{4}{3}a^{3/2}$.

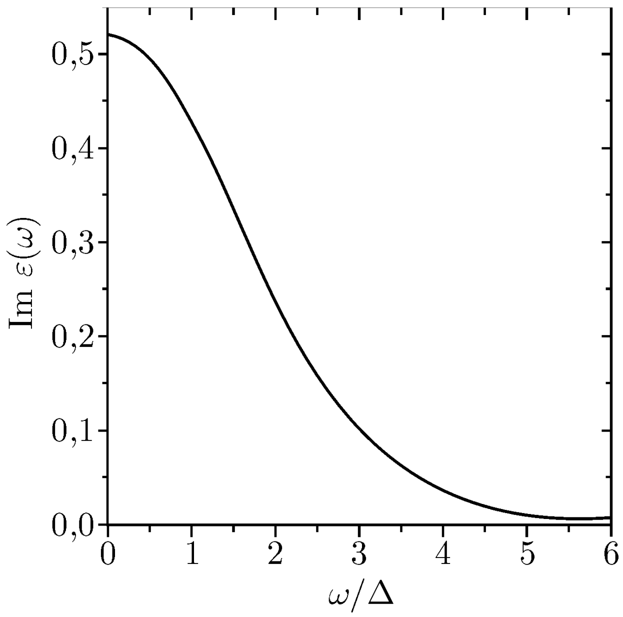



Рис. 6.37: Частотная зависимость мнимой части диэлектрической проницаемости в модели псевдощелевого состояния. Значения $Im\epsilon(\omega)$ даны в единицах $\frac{\omega_p^2}{\Delta^2}$.

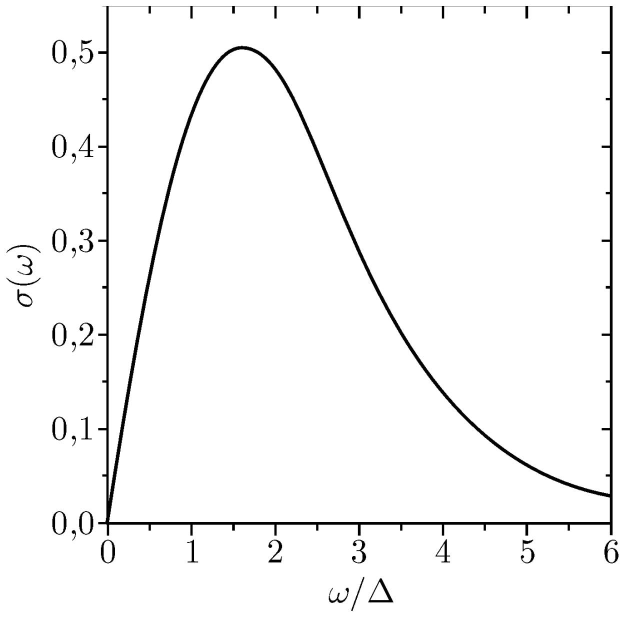



Рис. 6.38: Частотная зависимость действительной части проводимости в псевдощелевом состоянии. Проводимость дана в единицах $\frac{\omega_p^2}{4\pi\Delta}$.

При расчете $Re\epsilon(\omega)$ можно конечно провести численный обсчет формул, следующих из (6.279), (6.278) с последующим усреднением (6.206):

$$Re\epsilon_{\Delta^2}(\omega)=1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2}\int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta}\left\{1+\frac{4\zeta\Delta^2}{\omega}\frac{1}{\sqrt{4\zeta\Delta^2-\omega^2}}\left[arctg\left(\sqrt{\frac{4\zeta\Delta^2}{\omega^2}-1}\right)-\frac{\pi}{2}\right]\right\} \tag{6.287}$$

при $\omega^2<4\Delta^2$, и

$$Re\epsilon_{\Delta^2}(\omega)=1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2}\int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta}\left\{1-\frac{4\zeta\Delta^2}{\omega}\frac{1}{\sqrt{\omega^2-4\zeta\Delta^2}}\left[arcth\left(\sqrt{1-\frac{4\zeta\Delta^2}{\omega^2}}\right)-1\right]\right\} \tag{6.288}$$

при $\omega^2>4\Delta^2$. Гораздо проще, однако, воспользоваться вместо (6.279), (6.278) простейшей интерполяционной формулой:

$$Re\epsilon_{\Delta^2}(\omega)=1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2-6\Delta^2} \tag{6.289}$$

которая правильно описывает предельное поведение при $\omega\ll 2\Delta$ и $\omega\gg 2\Delta$. Тогда получаем:

$$Re\epsilon(\omega)=1-\omega_p^2\int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta}\frac{1}{\omega^2-6\zeta\Delta^2}=1-\frac{\omega_p^2}{6\Delta^2}e^{-\frac{\omega^2}{6\Delta^2}}\overline{Ei}\left(\frac{\omega^2}{6\Delta^2}\right) \tag{6.290}$$

Непосредственный численный счет показывает, что (6.287), (6.288) и (6.290) дают количественно очень близкие результаты, как это видно из Рис. 6.39. Используя известные асимптотики:

$$\overline{Ei}(x)=\begin{cases}\frac{e^x}{x} & \text{при} \quad x\gg 1\\ C+\ln x+... & \text{при} \quad x\to 0, \qquad C=\ln\gamma\end{cases} \tag{6.291}$$

можно из (6.290) найти:

$$Re\epsilon(\omega)\to 1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2} \qquad \text{при} \qquad \omega\gg 2\Delta \tag{6.292}$$

$$Re\epsilon(\omega)\approx 1-\frac{\omega_p^2}{6\Delta^2}\ln\gamma\frac{\omega^2}{6\Delta^2} \tag{6.293}$$

Логарифмическая расходимость $Re\epsilon(\omega)$ на малых частотах демонстрирует промежуточное (не металлическое, но и не диэлектрическое) поведение рассматриваемой упрощенной модели псевдощелевого состояния.

Аналогичным образом можно рассмотреть $q-$зависимость диэлектрической проницаемости в статическом пределе $\omega=0$. Напишем простейшую интерполяционную формулу, связывающую предельные случаи (6.272) и (6.274):

$$\Pi_{\Delta^2}(q0)=-2N_0(E_F)\frac{v_F^2q^2}{v_F^2q^2+6\Delta^2} \tag{6.294}$$

так что

$$\epsilon_{\Delta^2}(q0)=1+\frac{\kappa_D^2}{q^2+\frac{6\Delta^2}{v_F^2}} \tag{6.295}$$

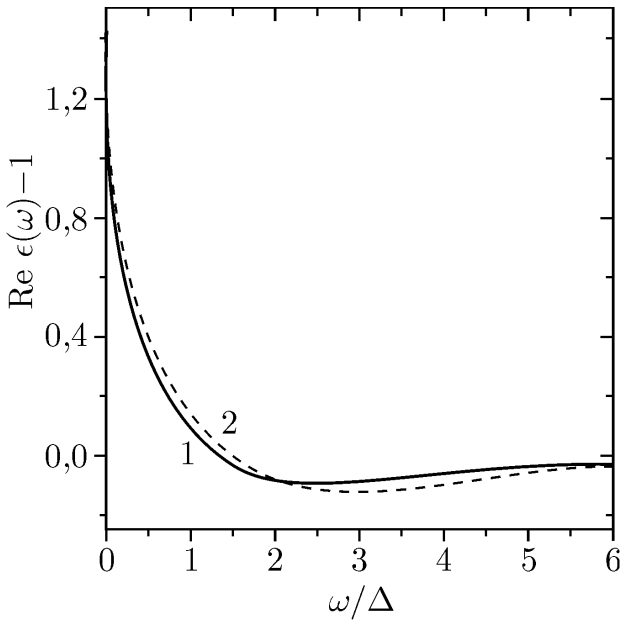



Рис. 6.39: Действительная часть диэлектрической проницаемости как функция частоты внешнего поля. (1) – зависимость, полученная численным расчетом по точным формулам, (2) – зависимость, полученная из интерполяционной формулы. Диэлектрическая проницаемость дана в единицах $\frac{\omega_p^2}{\Delta^2}$.

что интерполирует между (6.273) и (6.275). Тогда в нашей модели псевдощелевого состояния:

$$\epsilon(q0)=\int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta}\frac{q^2+\kappa_D^2+6\zeta\frac{\Delta^2}{v_F^2}}{q^2+6\zeta\frac{\Delta^2}{v_F^2}}=1-\frac{v_F^2\kappa_D^2}{6\Delta^2}e^{\frac{v_F^2q^2}{6\Delta^2}}Ei\left(-\frac{v_F^2q^2}{6\Delta^2}\right) \tag{6.296}$$

Соответствующее поведение показано на Рис. 6.40, из которого видно также прекрасное согласие интерполяционной формулы с результатами расчетов по точным формулам (которые мы опускаем). При $v_Fq\gg\Delta$ используем асимптотику при $x\gg 1$: $Ei(-x)\to -\frac{e^{-x}}{x}$. Тогда, как и следует ожидать, получаем:

$$\epsilon(q0)=1+\frac{\kappa_D^2}{q^2} \tag{6.297}$$

т.е. "металлическое" (дебаевское) поведение. Однако, при $v_Fq\ll\Delta$, пользуясь асимптотикой $Ei(-x)\approx\ln\gamma x \quad (x\to 0)$, имеем:

$$\epsilon(q0)\approx 1-\frac{v_F^2\kappa_D^2}{6\Delta^2}\ln\gamma\frac{v_F^2q^2}{6\Delta^2} \tag{6.298}$$

При таком поведении $\epsilon(q0)$ в пределе малых $q$, эффективное кулоновское взаимодействие принимает вид:

$$\mathcal{V}(q)=\frac{4\pi\tilde{e}^2(q)}{q^2} \tag{6.299}$$

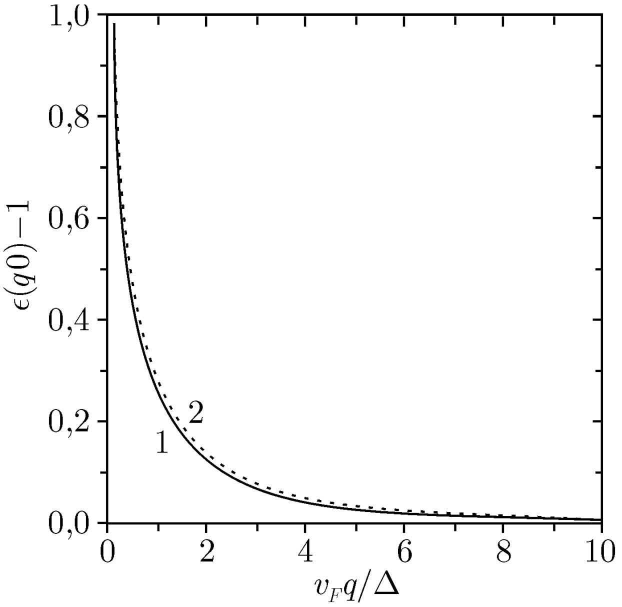



Рис. 6.40: Диэлектрическая проницаемость как функция волнового вектора. (1) – зависимость, полученная численным расчетом по точным формулам, (2) – зависимость, полученная из интерполяционной формулы. Диэлектрическая проницаемость дана в единицах $\frac{\omega_p^2}{\Delta^2}$.

где

$$\tilde{e}^2(q) = \frac{e^2}{1 - \frac{v_F^2 \kappa_D^2}{6\Delta^2} \ln \gamma \frac{v_F^2 q^2}{6\Delta^2}} \to 0 \qquad \text{при} \qquad q \to 0 \tag{6.300}$$

что напоминает известную ситуацию "нуль – заряда" в квантовой электродинамике [20]. Таким образом, флуктуации щели в спектре нашей модели приводят к полной экранировке заряда, хотя и весьма специфического вида. Опять мы видим поведение промежуточное между типично "металлическим" и "диэлектрическим"[31].

Основной вывод, который можно сделать из проведенного рассмотрения этой, чрезвычайно упрощенной и искусственной модели, довольно важен. Результаты точного решения (полного суммирования диаграммного ряда) могут оказаться разительно отличающимися от результатов, получаемых приближенными методами (частичным суммированием диаграммного ряда). К сожалению, полное суммирование удается провести, как правило, лишь для упрощенных и не очень реалистических задач.

Обобщение этих результатов на случай конечных корреляционных длин $\xi$ (или конечных $\kappa$) может быть проведено, путем вывода рекуррентных уравнений для вершинной части, описвающей электромагнитный отклик системы, аналогично проведенному выше выводу рекуррентных уравнений для собственно – энергетической части (одноэлектронной функции Грина).

Произвольная диаграмма для вершинной части, как мы видели выше, может быть получена вставкой линии внешнего поля в соответствующую диаграмму для неприводимой собственно – энергетической части. Основная идея дальнейшего вывода состоит в том, что в нашей модели можно ограничиться только диаграммами без пересечения линий взаимодействия, с дополнительными

[31] Разумеется эти аномалии, в значительной мере, являются следствием достаточно искусственных предположений, использованных при формулировке нашей модели псевдощелевого состояния, и исчезают, например, при учете эффектов конечности корреляционной длины ближнего порядка.

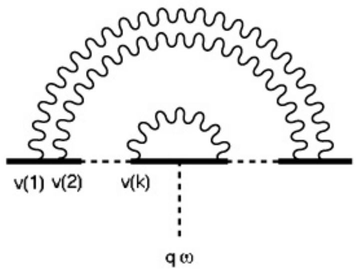



Рис. 6.41: Диаграмма общего вида для вершинной поправки.

комбинаторными множителями $v(k)$, приписываемыми "начальным" вершинам взаимодействия. Тогда при расчете вершинных поправок достаточно рассмотреть только диаграммы типа показанных на Рис. 6.41. Тогда мы немедленно получаем систему рекуррентных уравнений для вершинных частей, показанную на Рис. 6.42. Чтобы найти соответствующие аналитические выражения рассмотрим простейшую поправку к вершинной части, показанную на Рис. 6.43 (a). Непосредственно выполняя вычисления при $T = 0$ в $RA$ – канале, находим:

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_1^{(1)RA}(\varepsilon,\xi_p;\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}) &= \Delta^2\int\frac{dQ}{2\pi}G_0^A(\varepsilon,\xi_{p-Q})G_0^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p-Q+q}) = \\ &= \Delta^2\left\{G_0^A(\varepsilon,-\xi_p+iv_F\kappa)-G_0^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}-iv_F\kappa)\right\}\frac{1}{\omega+v_Fq} = \\ &= \Delta^2 G_0^A(\varepsilon,-\xi_p+iv_F\kappa)G_0^R(\varepsilon+\omega,-\xi_{p+q}-iv_F\kappa)\left\{1+\frac{2iv_F\kappa}{\omega+v_Fq}\right\}\end{aligned}\tag{6.301}$$

где, при интегрировании, мы воспользовались следующим тождеством, справедливым для свободных функций Грина:

$$G_0^A(\varepsilon,\xi_p)G_0^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}) = \left\{G_0^A(\varepsilon,\xi_p)-G_0^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})\right\}\frac{1}{\omega-v_Fq}\tag{6.302}$$

"Одевая" внутренние электронные линии флуктуациями, получаем диаграмму, показанную на Рис. 6.43 (b), так что с использованием тождества:

$$\begin{aligned}G^A(\varepsilon,\xi_p)G^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}) &= \left\{G^A(\varepsilon,\xi_p)-G^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})\right\}\times \\ &\times\frac{1}{\omega-v_Fq-\Sigma_1^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})+\Sigma_1^A(\varepsilon,\xi_p)}\end{aligned}\tag{6.303}$$

справедливого для полных функций Грина (6.215), можно записать вклад этой диаграммы как:

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_1^{RA}(\varepsilon,\xi_p;\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}) &= \Delta^2 v(1)G_1^A(\varepsilon,\xi_p)G_1^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})\times \\ \times\left\{1+\frac{2iv_F\kappa}{\omega+v_Fq-\Sigma_2^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})+\Sigma_2^A(\varepsilon,\xi_p)}\right\}&J_1^{RA}(\varepsilon,\xi_p;\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})\end{aligned}\tag{6.304}$$

Здесь мы предположили, что линия взаимодействия в вершинной поправке на Рис. 6.43 (b) "преобразует" собственно – энергетические части $\Sigma_1^{R,A}$ внутренних линий в $\Sigma_2^{R,A}$, в соответствии с основной идеей нашего *Ansatz*'а для собственно – энергетической части[32]. Теперь мы можем выписать аналогичное выражение для диаграммы общего вида, показанной на Рис. 6.43 (c):

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_k^{RA}(\varepsilon,\xi_p;\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}) &= \Delta^2 v(k)G_k^A(\varepsilon,\xi_p)G_k^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})\times \\ \times\left\{1+\frac{2iv_F\kappa k}{\omega-(-1)^k v_Fq-\Sigma_{k+1}^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})+\Sigma_{k+1}^A(\varepsilon,\xi_p)}\right\}&J_k^{RA}(\varepsilon,\xi_p;\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})\end{aligned}\tag{6.305}$$

[32]Оказывается, как мы увидим ниже, что этот прием обеспечивает выполнение точного тождества Уорда (6.309), что и является главной мотивировкой для такой записи.

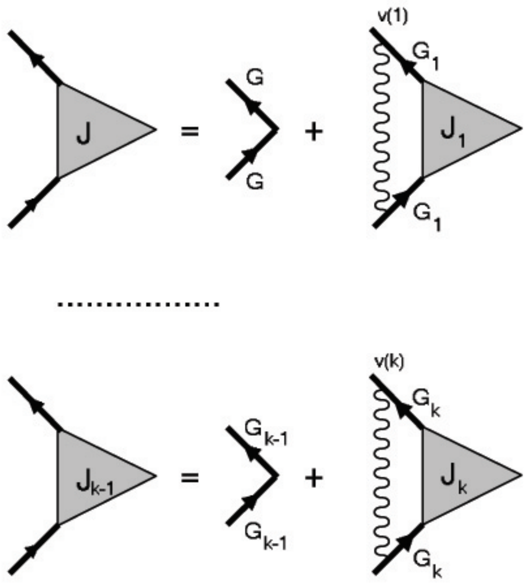



Рис. 6.42: Рекуррентные уравнения для вершинной части.

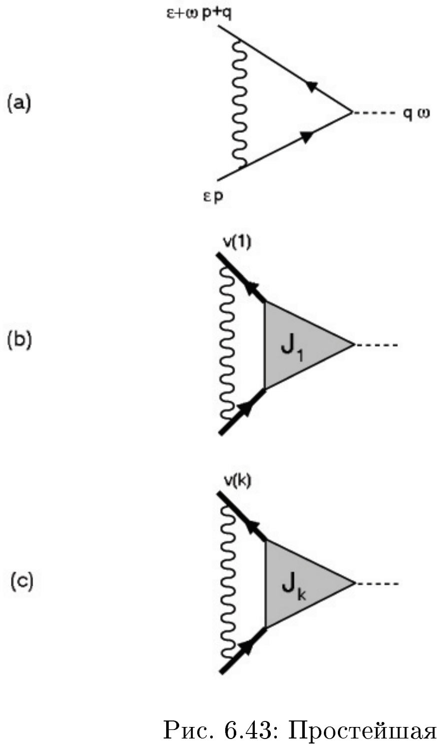



Рис. 6.43: Простейшая поправка к вершинной части.

Тогда немедленно получаем рекуррентное уравнение для вершинной части, показанное графически на Рис. 6.42, и имеющее следующий аналитический вид (М.В.Садовский, А.А.Тимофеев, 1991):

$$J_{k-1}^{RA}(\varepsilon,\xi_p;\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}) = 1+\Delta^2 v(k)G_k^A(\varepsilon,\xi_p)G_k^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})\times$$
$$\times\left\{1+\frac{2iv_F\kappa k}{\omega-(-1)^k v_F q-\Sigma_{k+1}^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})+\Sigma_{k+1}^A(\varepsilon,\xi_p)}\right\}J_k^{RA}(\varepsilon,\xi_p;\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}) \tag{6.306}$$

где все собственно – энергетические части и функции Грина определяются из аналитически продолженных (на вещественные частоты) рекуррентных соотношений типа (6.222), (6.223). "Физическая" вершинная часть $J^{RA}(\varepsilon,\xi_p;\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})$ определяется как $J_{k=0}^{RA}(\varepsilon,\xi_p;\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})$. Рекуррентная процедура (6.306) учитывает *все* диаграммы теории возмущений для вершины. В случае вершин RR и AA – типа получим аналогичные рекуррентные соотношения, с очевидной заменой $G^R\leftrightarrow G^A$, а также с заменой выражения в больших фигурных скобках в правой части на 1. При $\kappa\to 0\quad(\xi\to\infty)$ эти рекуррентные уравнения эквивалентны полной сумме диаграммного ряда, изучавшейся выше, когда нам удалось провести суммирование в аналитическом виде. Стандартное "лестничное" приближение соответствует в этой схеме выбору комбинаторных множителей в (6.306) $v(k)=1$.

Согласно (2.115), (4.78) проводимость системы выражается через запаздывающую функцию отклика плотность – плотность $\chi(q,\omega)$ как:

$$\sigma(\omega)=e^2\lim_{q\to 0}\left(-\frac{i\omega}{q^2}\right)\chi(q\omega) \tag{6.307}$$

Для упрощения численных расчетов можно, в первом приближении, воспользоваться выражением (4.105), справедливом в пределе малых частот $\omega$:

$$\chi(q\omega)=\omega\left\{\Phi^{RA}(q\omega)-\Phi^{RA}(0\omega)\right\} \tag{6.308}$$

где двухчастичная функция Грина $\Phi^{RA}(q,\omega)$ была определена в (4.103) (ср. общее обсуждение в Главе IV и определения (4.88), (4.94) и т.д.)[33]. Однако, из – за существования в рассматриваемой задаче дополнительного масштаба энергии $\Delta\ll E_F$ (ширина псевдощели), использование (6.308) приводит к определенной (количественной, но не качественной!) неточности результатов, особенно в пределе малых $\kappa$. Поэтому, гораздо лучше использовать полное (интегральное) представление для $\chi(q,\omega)$, задаваемое (4.87), (4.95). Это позволяет воспроизвести точные результаты для оптической проводимости, полученные выше в пределе $\kappa\to 0$ с помощью рассматриваемых здесь рекуррентных соотношений. В тоже время, возникающее здесь дополнительное интегрирование по энергии, с очевидностью ведет к заметно большим затратам машинного времени. Ниже мы приводим результаты, полученные в результате полных расчетов на основе (4.95). Сходимость численной процедуры для вершинной части дочтаточно хорошая (кроме области очень малых частот и малых $\kappa=\xi^{-1}$), хотя ясно, что расчеты проводимости конечно же требуют существенно большего времени, нежели например расчеты плотности состояний.

Типичные зависимости действительной части проводимости от частоты показаны на Рис. 6.44 (для случая несоизмеримых флуктуаций ближнего порядка)[34]. Видим, что уменьшение корреляционной длины $\xi=\kappa^{-1}$ ведет к постепенному росту поглощения внутри псевдощели. Наиболее удивительной аномалией является появление дополнительного плавного максимума (или немонотонности) в частотной зависимости проводимости внутри псевдощелевой области, которое мы связываем с проявлением эффектов андерсоновской локализации, всегда имеющей место в одномерных неупорядоченных системах. Локализационная природа этой аномалии непосредственно подтверждается сравнением нашего "точного" (т.е. учитывающего все диаграммы) расчета с результатами "лестничного" приближения, сводящегося к использованию во всех соотношениях комбинаторных множителей $v(k)=1$. Типичная зависимость проводимости, получающаяся в таком

---

[33] Прямые численные расчеты показывают, что рекуррентная процедура (6.306) удовлетворяет точному (в пределе $\omega\to 0$) тождеству Уорда (4.104):

$$\Phi^{RA}(0\omega)=-\frac{N(E_F)}{\omega} \tag{6.309}$$

где $N(E_F)$ – плотность состояний на уровне Ферми, которая может быть независимо рассчитана с помощью (6.226) – (6.229). В действительности, это может быть главный аргумент в пользу обоснованности *Ansatz*'а, использованного при выводе (6.304), (6.305) и (6.306).

[34] Автор признателен Э.З.Кучинскому, который провел расчеты полные проводимости специально для этих лекций

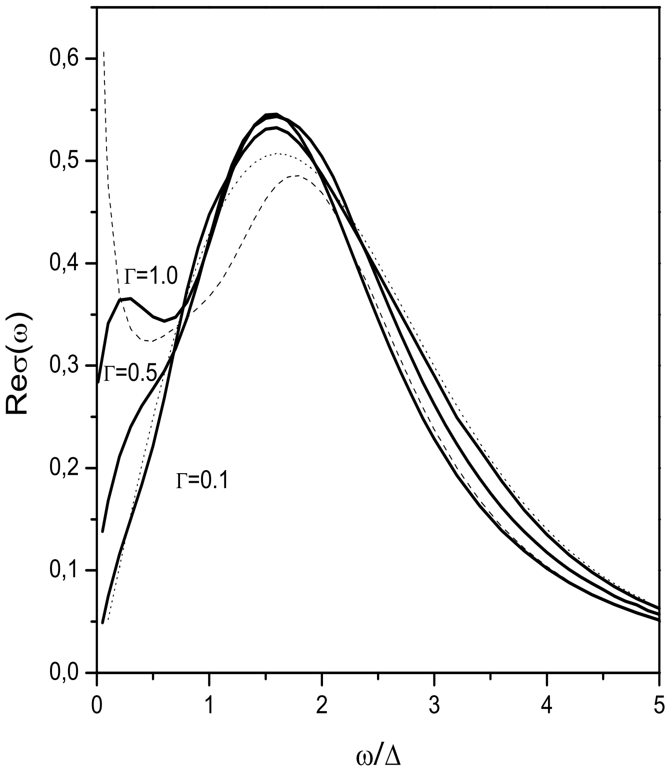



Рис. 6.44: Частотная зависимость действительной части проводимости в случае несоизмеримых псевдощелевых флуктуаций для различных значений $\Gamma = v_F\kappa/\Delta$. Пунктир – случай $\Gamma = 0$. Штрихи – результаты “лестничного” приближения для $\Gamma = 1.0$. Проводимость дана в единицах $\frac{\omega_p^2}{4\pi\Delta}$.

приближении, показана на Рис. 6.44 штриховой кривой. Ясно видно, что локализационное поведение трансформируется в узкий "друдевский" пик на малых частотах. Это вполне естественно, поскольку мы видели в Главе IV, что локализация тесно связана с учетом диаграмм с перекрещивающимися линиями взаимодействия, отсутствующими в "лестничном" приближении. Прямые расчеты показывают также, что наши результаты для проводимости удовлетворяют точному правилу сумм (5.297).

Этот подход непосредственно обобщается также и на расчеты проводимости в двумерных моделях псевдощелевого поведения, используемых в теории высокотемпературных сверхпроводников на основе оксидов меди[35].

## 6.6 Модель Томонага – Латтинжера и нефермижидкостное поведение.

Практически во всех рассмотренных выше задачах мы исходили из картины ферми – жидкости Ландау и, прежде всего, из полюсного характера одночастичной функции Грина:

$$G(p) = \frac{Z}{\varepsilon - v_F(p - p_F) + i\delta} + \cdots \tag{6.310}$$

где $0 < Z < 1$ – некоторая постоянная, определяющая, как мы видели, скачок функции распределения частиц на поверхности Ферми $p = p_F$. Также мы поступали и при рассмотрении одномерных задач. В тоже время, в предыдущем разделе мы видели, что точное решение одномерной задачи может привести к совершенно иному виду функции Грина, не содержащей полюсов и не совпадающей с предсказаниями теории ферми – жидкости. На самом деле, это является общим свойством теории взаимодействующих электронов в одном измерении — фермижидкостное поведение отсутствует *всегда*. В качестве, может быть, наиболее яркого (и общего) примера в этом разделе мы бегло рассмотрим так называемую модель Томонага – Латтинжера.

Эта модель описывает газ ферми – частиц с плотностью $n$ (импульс Ферми $p_F = \pi n/2$), массой $m$ (скорость Ферми $v_F = p_F/m$) и потенциалом взаимодействия $\lambda(|x|)$, фурье – компоненты которого $\lambda(k)$ отличны от нуля лишь в предельно узком интервале импульсов $|k| \leq \Lambda \ll p_F$. Соответствующий гамильтониан имеет вид:

$$H = \sum_p \frac{p^2}{2m} a_p^+ a_p + \frac{1}{2} \sum_{pp'k} \lambda(k) a_p^+ a_{p'}^+ a_{p'-k} a_{p+k} \tag{6.311}$$

Томонага показал, что в случае предельного дальнодействия, т.е. в пренебрежении всеми величинами типа $\Lambda/p_F \to 0$, спектр гамильтониана (6.311) совпадает со спектром системы *бозонов*, описываемых операторами $b_k$, $b_k^+$[36]:

$$H = \sum_k v(k) k b_k^+ b_k, \qquad v^2(k) = v_F^2 + \frac{2v_F}{\pi} \lambda(k) \tag{6.312}$$

Ниже мы покажем это диаграммными методами (И.Е.Дзялошинский, А.И.Ларкин, 1973), также как и то, что одноэлектронная функция Грина сохраняет вид (6.310) в области $|p - p_F| \gg \Lambda$, но имеет совершенно другой вид вблизи поверхности Ферми, т.е. при $|p - p_F| \ll \Lambda$.

---

[35]Дополнительные детали можно найти в в обзорах: М.В.Садовский. УФН **171**, 539 (2001) и ArXiV: cond-mat/0408489.

[36]Иными словами, в системе вообще не остается фермионных возбуждений, а ее спектр исчерпывается коллективными колебаниями "звукового" типа.

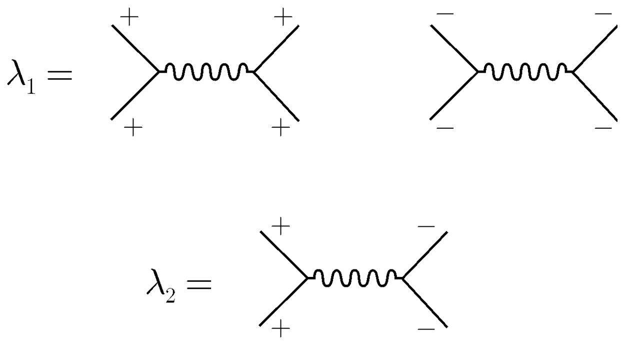



Рис. 6.45: Взаимодействия частиц в модели Томонага – Латтинжера.

Имея в виду спектр одномерной системы свободных электронов, показанный на Рис. 6.3, будем вычислять функции Грина вблизи “правой” и “левой” точек Ферми $\pm p_F$, обозначая их соответственно $G_+(p)$ и $G_-(p)$ ($\pm$ – фермионы). Для газа свободных частиц:

$$G_+^{(0)} = \frac{1}{\varepsilon - p + p_F + i\delta}, \qquad G_-^{(0)} = \frac{1}{\varepsilon + p + p_F + i\delta} \tag{6.313}$$

где, для краткости, перешли к системе единиц с $v_F = 1$.

Частицы вблизи правой и левой ферми – точки можно, по существу, считать разными фермионами и в системе с взаимодействием, даже в области $|p - p_F| \gg p_F$, поскольку в пределе $\Lambda/p_F \to 0$ взаимодействие не может переводить их друг в друга. Это означает, в частности, что с той же точностью величины $p - p_F$ для “+”– частиц и $p + p_F$ для “$-$” – частиц могут меняться в пределах от $-\infty$ до $+\infty$.

Прежде всего нам нужно вычислить эффективное взаимодействие, обозначаемое далее $D(k)$ и волнистой линией, а также “треугольную” вершину $\Gamma(p,k)$. В силу условия $\Lambda/p_F \to 0$, во всех вершинах существенны только импульсы $k \ll p_F$, поэтому обе гриновские функции фермионов, входящие в $\Gamma$ должны лежать на одной и той же ферми – точке $+p_F$ или $-p_F$, так что можно ввести $\Gamma_+(p,k)$ и $\Gamma_-(p,k)$. При этом мы рассмотрим некоторое обобщение модели Томонага, а именно, будем считать, что взаимодействия частиц одного “знака” (+ или -) и разных “знаков” различны, как это показано на Рис. 6.45. Соответственно вводим обозначения:

$$\lambda_{++} = \lambda_{--} = \lambda_1; \quad \lambda_{+-} = \lambda_2; \qquad D_{++} = D_{--}; \quad D_{+-} = D_{-+} \tag{6.314}$$

Уравнения Дайсона для $D$ имеют вид:

$$D_{++} = \lambda_1 + \lambda_1 \Pi_+ D_{++} + \lambda_2 \Pi_- D_{-+} \tag{6.315}$$

$$D_{-+} = \lambda_2 + \lambda_2 \Pi_+ D_{++} + \lambda_1 \Pi_- D_{-+} \tag{6.316}$$

Входящие сюда поляризационные операторы изображаются графиками, показанными на Рис. 6.46. Уравнение Дайсона для функции Грина $G$ имеет стандартный вид:

$$G_\pm^{-1} = \varepsilon \mp p + p_F - \Sigma_\pm \tag{6.317}$$

где $\Sigma_+$ и $\Sigma_-$ показаны на Рис. 6.47.

Обычно, как мы видели на разных примерах выше, вершинная часть $\Gamma$ определяется бесконечным рядом диаграмм, в силу чего такие задачи решаются лишь

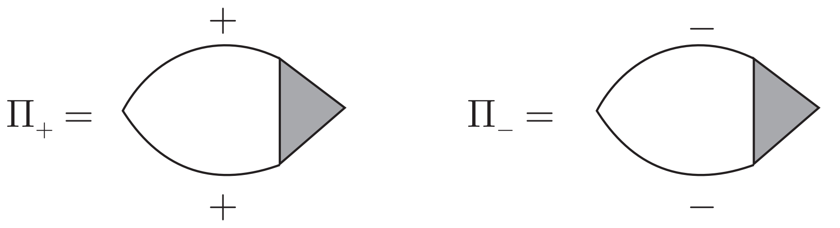



Рис. 6.46: Поляризационные операторы в модели Томонага – Латтинжера.


Рис. 6.47: Собственно – энергетические части электрона в модели Томонага – Латтинжера.

приближенно. Однако в рассматриваемой модели задачу можно решить точно в пределе $\Lambda/p_F \to 0$, воспользовавшись тождествами Уорда, связывающими $\Gamma$ и $G$ и имеющими следующий простой вид:

$$\Gamma_+(p,k) = \frac{G_+^{-1}(p) - G_+^{-1}(p-k)}{\omega - k} \tag{6.318}$$

$$\Gamma_-(p,k) = \frac{G_-^{-1}(p) - G_-^{-1}(p-k)}{\omega + k} \tag{6.319}$$

Здесь, как и выше, $k$ в аргументах функций Грина и вершин обозначает пару $(k,\omega)$. Соотношения (6.318) и (6.319) можно вывести непосредственно, рассматривая диаграммы разных порядков и используя следующее из (6.313) тождество:

$$G_\pm^{(0)}(p)G_\pm^{(0)}(p+k) = \frac{1}{\omega \mp k}\left(G_\pm^{(0)}(p) - G_\pm^{(0)}(p+k)\right) \tag{6.320}$$

Дело в том, что взаимодействие (волнистая линия) передает практически нулевой импульс ($\leq \Lambda$) $\to 0$. Тогда во всех диаграммах для $G$ или $\Sigma$ имеется непрерывная линия частицы "одного знака", переносящая "внешний" импульс $p$, как можно видеть, рассматривая примеры графиков, показанные на Рис. 6.48. Поэтому все диаграммы для $\Gamma$ можно получить, вставляя произвольным образом внешнюю линию взаимодействия в графики для собственно энергетической части. Это показано на Рис. 6.49,

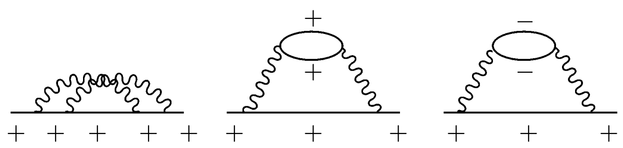



Рис. 6.48: Примеры конкретных графиков для собственно – энергетической части электрона в модели Томонага – Латтинжера.

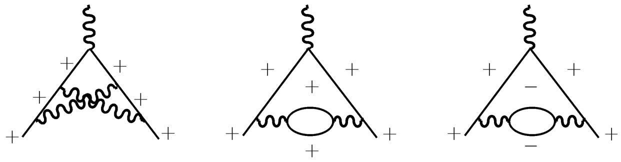


Рис. 6.49: Примеры конкретных графиков для вершинной части в модели Томонага – Латтинжера.

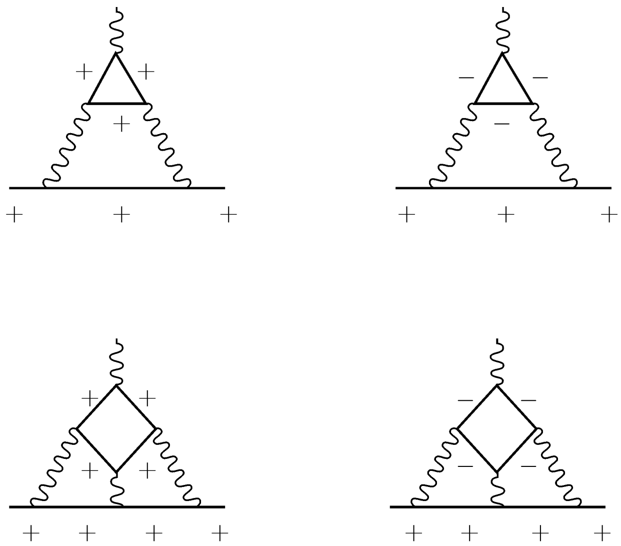


Рис. 6.50: Примеры конкретных графиков для вершинной части в модели Томонага – Латтинжера, которые можно не рассматривать.

где приведены графики для вершины, полученные из диаграмм для собственно – энергетической части, показанных на Рис. 6.48. Если теперь в месте каждой вставки такой линии взаимодействия воспользоваться (6.320), мы немедленно получим тождества (6.318), (6.319). При этом важно отметить, что в рассматриваемой задаче с дальнодействием и "затравочными" функциями Грина (с линейным спектром) вида (6.313) можно показать, что все диаграммы, содержащие замкнутые петли из более, чем двух фермионных линий, равны нулю. Точнее, равна нулю соответствующим образом симметризованная их сумма. Поэтому, например, диаграммы типа показанных на Рис. 6.50 можно не рассматривать, так что *все* графики для вершины возникают так, как это показано на Рис. 6.49. Доказательство этого утверждения основано на законе сохранения числа $\pm$ – частиц (по отдельности) и является аналогом условия поперечности тока в квантовой электродинамике [20] (где такие диаграммы также выпадают из рассмотрения тождества Уорда).

В самом деле, запишем уравнения движения для свободных операторов $+$ – частиц:

$$i\frac{\partial\psi_+}{\partial t} + i\frac{\partial\psi_+}{\partial x} = 0 \tag{6.321}$$

откуда следует закон сохранения числа частиц (заряда):

$$\frac{\partial\rho_+}{\partial t} + \frac{\partial j_+}{\partial x} = 0, \qquad \rho_+ = j_+ = \psi_+^+\psi_+ \tag{6.322}$$

Для $-$ – частиц аналогично:

$$i\frac{\partial\psi_-}{\partial t}+i\frac{\partial\psi_-}{\partial x}=0 \tag{6.323}$$

$$\frac{\partial\rho_-}{\partial t}+\frac{\partial j_-}{\partial x}=0,\qquad \rho_-=-j_+=\psi_-^+\psi_- \tag{6.324}$$

Поскольку произвольная замкнутая петля представляет собой компоненту Фурье от среднего по основному состоянию от произведения соответствующего числа операторов плотности $< T\rho_+(1)\rho_+(2)...\rho_+(n) >$ (и аналогично для $-$ – частиц), то из законов сохранения (6.322), (6.324) следует:

$$(\omega_1-k_1)(\omega_2-k_2)...(\omega_n-k_n)<\rho_+(k_1)\rho_+(k_2)...\rho_+(k_n)>=0 \tag{6.325}$$

$$(\omega_1+k_1)(\omega_2+k_2)...(\omega_n+k_n)<\rho_-(k_1)\rho_-(k_2)...\rho_-(k_n)>=0 \tag{6.326}$$

Тогда сделанное выше утверждение о петлях следует из (6.325), (6.326), если все интегралы по импульсам фермионов сходятся. Легко видеть, что дело так и обстоит для петель, состоящих из трех и более линий.

Петля, состоящая из двух линий пропорциональна (для $+$ – частиц) интегралу:

$$\int d^2p\frac{1}{\varepsilon-p+p_F+i\delta}\frac{1}{\varepsilon-\omega-p+k+p_F+i\delta} \tag{6.327}$$

который формально расходится. По физическому смыслу конечность этого интеграла обеспечивается квадратичной зависимостью энергии частиц от импульса на больших расстояниях от поверхности Ферми (которой мы здесь пренебрегаем). Технически это можно обеспечить, выполняя сначала интегрирование по $\varepsilon$, а уж потом по $p$. Результат такого интегрирования оказывается конечным и дает величину, пропорциональную $\frac{k}{\omega-k}$.

Теперь мы можем выписать *замкнутую* систему уравнений для $G$ и $D$, выражая с помощью (6.318), (6.319) вершины $\Gamma$ через $G$ в выражениях для $\Pi$ и $\Sigma$, определяемых Рис. 6.46, 6.47. Таким образом получаем:

$$\Pi_+(k)=-\frac{i}{2\pi^2}\frac{1}{\omega-k}\int d^2p\,[G_+(p-k)-G_+(p)] \tag{6.328}$$

$$\Pi_-(k)=-\frac{i}{2\pi^2}\frac{1}{\omega+k}\int d^2p\,[G_-(p-k)-G_-(p)] \tag{6.329}$$

причем уравнения для $G_\pm$ имеют вид:

$$(\varepsilon-p+p_F)G_+(p)=1+\frac{i}{4\pi^2}\int d^2k\frac{D_{++}(k)}{\omega-k}G_+(p-k) \tag{6.330}$$

$$(\varepsilon+p+p_F)G_+(p)=1+\frac{i}{4\pi^2}\int d^2k\frac{D_{--}(k)}{\omega+k}G_-(p-k) \tag{6.331}$$

Вычислим теперь $\Pi_+$ и $\Pi_-$. Введем обрезание по импульсу $|p-p_F|\le A\ll p_F$. Тогда имеем:

$$\Pi_+(k)=-\frac{i}{2\pi^2}\frac{1}{\omega-k}\int_{p_F-A}^{p_F+A}dp\int_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon\,[G_+(p-k,\varepsilon-\omega)-G_+(p,\varepsilon)] \tag{6.332}$$

Вклад от области $|p-p_F|\ge A$ не может быть найден из (6.328), (6.329) поскольку тождества (6.318), (6.319) справедливы только вблизи поверхности Ферми. Можно убедиться, что этот вклад равен нулю, если его вычислить с помощью "свободных" функций Грина (и вершин). Вычисляя в (6.332) интеграл по $\varepsilon$, имеем:

$$\Pi_+(k)=\frac{1}{\pi(\omega-k)}\int_{p_F-A}^{p_F+A}dp\,[n_+(p-k)-n_+(p)] \tag{6.333}$$

где мы воспользовались также общим выражением для функции распределения:

$$n_+(p)=-i\lim_{t\to-0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi}e^{-i\varepsilon t}G_+(\varepsilon p) \tag{6.334}$$

Интеграл по $p$ в (6.333) можно переписать так:

$$\int_{p_F-A}^{p_F+A} dp... = \int_{p_F-A-k}^{p_F-A} dpn_+(p) - \int_{p_F+A-k}^{p_F+A} dpn_+(p) \tag{6.335}$$

где, с точностью $\Lambda/A \to 0$, можно считать, что $n_+(p) = n_F(p)$, где $n_F$ – ступенька Ферми при $T = 0$. Поэтому получаем:

$$\Pi_+(k) = \frac{k}{\pi(\omega - k)} \tag{6.336}$$

Аналогичным образом получаем и:

$$\Pi_-(k) = -\frac{k}{\pi(\omega + k)} \tag{6.337}$$

Используя (6.336), (6.337) в (6.315), (6.316) и решая эти уравнения, находим:

$$D_{++}(k) = (\omega - k)\frac{\lambda_1(\omega + k) + (\lambda_1^2 - \lambda_2^2)k/\pi}{\omega^2 - u^2k^2 + i\delta} \tag{6.338}$$

где

$$u = \left(1 + \frac{2\lambda_1}{\pi} + \frac{\lambda_1^2 - \lambda_2^2}{\pi^2}\right)^{1/2} \tag{6.339}$$

Таким образом в системе возникают коллективные (бозонные) возбуждения, спектр которых определяется полюсом (6.338). При $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ эти формулы, фактически, дают результат Томонаги (6.312) (напомним, что у нас сейчас $v_F = 1$).

Для нахождения одноэлектронной функции Грина осталось решить линейные интегральное уравнение (6.330) с известным теперь $D_{++}$. Мы не будем этим заниматься подробно, а рассмотрим только простейшие случаи, приводя потом общие результаты.

Пусть $\lambda_2 = 0$, тогда частицы на одной стороне поверхности Ферми (+) вообще не взаимодействуют с частицами на другой стороне (−), так что $D_{-+} = 0$, а

$$D_{++}(k) = \frac{\pi(w-1)(\omega - k)}{\omega - wk + i\delta} \tag{6.340}$$

где

$$w = 1 + \frac{\lambda_1}{\pi} \tag{6.341}$$

Уравнение для $G_+$ имеет тогда вид:

$$(\varepsilon - p)G(p) = 1 + \frac{i}{4\pi}\int d^2kG(p-k)\frac{w-1}{\omega - wk + i\delta} \tag{6.342}$$

Здесь и далее опускаем индекс + у $G_+$ и отсчитываем $p$ от $+p_F$. Непосредственной подстановкой можно убедиться, что уравнению (6.340) удовлетворяет функция:

$$G(p) = \{(\varepsilon - p + i\delta)(\varepsilon - wp + i\delta)\}^{-1/2} \tag{6.343}$$

где разрез на комплексной плоскости $\varepsilon$ выбран в виде отрезка, соединяющего $p - i\delta$ и $wp - i\delta$ ($sign\delta = sign(p)$). Такая функция Грина не имеет полюсов, соответствующих одночастичным возбуждениям, но расчет по (6.334) показывает, что распределение частиц по импульсам остается фермиевским:

$$n(p) = n_F(p) \tag{6.344}$$

Далее можно проанализировать случай малых $\lambda_1$ и $\lambda_2$, когда $u$ из (6.339) близко к единице ($v_F$!). Исследование (6.330), (6.338), (6.339) показывает, что в этом случае одноэлектронная функция Грина нашей модели имеет вид:

$$G(p) = \{(\varepsilon - p)(\varepsilon - up)\}^{-1/2} \exp\left\{-\frac{\lambda_2^2}{4\pi^2} \ln \frac{\Lambda}{|p|}\right\} \tag{6.345}$$

где

$$u = 1 + \frac{\lambda_1}{\pi} + \frac{\lambda_1^2 - \lambda_2^2}{2\pi^2} \tag{6.346}$$

Вычисляя с помощью (6.334) и (6.345) функцию распределения частиц $n(p)$, можно убедиться, что при $\lambda_2 \neq 0$ скачок при $p = 0$ отсутствует и на его месте остается лишь особенность вида (E.Lieb, D.Mattis, 1965):

$$n(p) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{|p|}{\Lambda}\right)^{\frac{\lambda_2^2}{4\pi^2}} sign(p) \tag{6.347}$$

Рассмотрим, наконец, физически “реалистический” случай $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$. В этом случае имеем:

$$D_{++}(k) = \frac{\lambda(\omega^2 - k^2)}{\omega^2 - v^2k^2 + i\delta} \tag{6.348}$$

где

$$v = \left(1 + \frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/2} \tag{6.349}$$

и для $G$ имеем интегральное уравнение:

$$(\varepsilon - p)G(p) = 1 + \frac{i}{4\pi^2}\int d^2k G(p-k)\frac{\lambda(\omega + k)}{\omega^2 - v^2k^2 + i\delta} \tag{6.350}$$

Его также можно решить (переходя к координатному представлению $x, t$). Мы этого делать не будем, а только приведем результат для функции распределения частиц по импульсам $n(p)$ вблизи ферми – точки $p = 0$. При слабом взаимодействии, когда $\lambda \to 0$, $v \to 1$ имеем результат (6.347) с $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$. Эта формула сохраняется до тех пор, пока взаимодействие не слишком сильно:

$$n(p) = \frac{1}{2} - const|p|^{2\alpha} sign(p) \tag{6.351}$$

где

$$\alpha = \frac{(v-1)^2}{8v}, \qquad \text{причем} \qquad \alpha < 1/2 \tag{6.352}$$

Однако, когда величина $\alpha$ превысит 1/2, ведущим членом разложения $n(p)$ вблизи ферми – точки становится линейный член:

$$n(p) = \frac{1}{2} - const \cdot p \tag{6.353}$$

В любом случае скачка функции распределения в точке Ферми нет!

Приведем результаты исследования асимптотического поведения $G(\varepsilon p)$ в области $p \sim \varepsilon \ll \Lambda$. При $\alpha < 1/2$:

$$G(\varepsilon \sim p) \sim \frac{1}{\varepsilon^{1-2\alpha}} \tag{6.354}$$

При $\alpha > 1/2$:

$$G(\varepsilon \sim p) \sim A + B\varepsilon^{2\alpha-1} \tag{6.355}$$

При $3/2 > \alpha > 1$:

$$G(\varepsilon \sim p) \sim A + B\varepsilon + C\varepsilon^{2\alpha-1}, \qquad \text{и т.п.} \tag{6.356}$$

Таким образом, в модели Томонага – Латтинжера не выполняются основные предположения теории ферми – жидкости Ландау. Уже при сколь угодно слабом взаимодействии особенность вблизи поверхности Ферми слабее полюсной (ср. (6.354)), а при взаимодействии достаточной силы функция Грина вообще остается конечной в точке Ферми (ср. (6.354), (6.356)). Сама точка Ферми проявляется при этом лишь как особая точка в производных достаточно высокого порядка.

Рассмотренные аномалии связаны с тем, что в одномерных ферми – системах имеет место своеобразная "инфракрасная катастрофа". Любая частица, лежащая вблизи одной из точек Ферми, может испустить, с соблюдением всех законов сохранения, любое число реальных пар частица – дырка, также лежащих вблизи ферми – точек. Математически это проявляется в том, что в ряду теории возмущений для собственно – энергетической части $\Sigma(p)$ появляются полюсные вклады высоких порядков типа:

$$\frac{\lambda^n}{(\varepsilon - p)^{n-1}} \tag{6.357}$$

В самом деле, рассмотрим выражение для $\Sigma$, соответствующее, например, (6.343):

$$\Sigma(p) = \varepsilon - p - [(\varepsilon - p)(\varepsilon - p - \lambda p/\pi)]^{1/2} \tag{6.358}$$

Разлагая его в ряд по $\lambda$, получаем:

$$\Sigma(p) = \frac{\lambda p}{2\pi} + \frac{\lambda^2 p^2}{8\pi^2(\varepsilon - p)} + \cdots \tag{6.359}$$

Все члены этого ряда (кроме первого) имеют структуру (6.357).

Выводы из проведенного рассмотрения модели Томонага – Латтинжера очень важны и поучительны. Фактически, большинство этих выводов сохраняется и при рассмотрении взаимодействующих электронов в одномерии в рамках более общих моделей взаимодействия. Фермижидкостное поведение отсутствует всегда, зато возникает явление *бозонизации* спектра элементарных возбуждений. В этом смысле, одномерные системы с взаимодействием описываются картиной, альтернативной обычной теории ферми – жидкости. Принято говорить, что в них реализуется картина "латтинжеровской" жидкости. В последние годы особый интерес вызывает анализ ситуации в пограничном двумерном случае, где при описании систем с сильными электронными корреляциями (типа ВТСП – оксидов) именно "сценарий" формирования латтинжеровской жидкости конкурирует с картиной обычной (или упоминавшейся выше "маргинальной") ферми – жидкости [13].

# Приложение A

# Поверхность Ферми, как топологический объект.

При обсуждении основ теории ферми – жидкости мы исходили из того, что поверхность Ферми сохраняется и при адиабатическом "включении" произвольного взаимодействия между фермионами. Приведем изящное доказательство этого утверждения, основанное на топологических соображениях (Г.Е.Воловик, 1999).

В идеальном ферми – газе поверхность Ферми представляет собой естественную границу, разделяющую в импульсном пространстве области занятых ($n(\mathbf{p}) = 1$) и пустых ($n(\mathbf{p}) = 0$) состояний [11]. Ясно, что в таком газе поверхность Ферми представляет собой устойчивый объект – малые изменения энергий частиц лишь слегка деформируют границу между занятыми и пустыми состояниями, приводя к соответствующей малой деформации поверхности Ферми.

Если "включается" взаимодействие между частицами, то, как мы видели выше, функция распределения частиц $n(\mathbf{p})$ в основном состоянии системы более не равняется просто 1 или 0. Тем не менее, поверхность Ферми сохраняется и проявляется в виде особенности в $n(\mathbf{p})$. Такая устойчивость поверхности Ферми является следствием некоторого топологического свойства фермионной функции Грина. Запишем эту функцию Грина в идеальном газе для заданного импульса $\mathbf{p}$ и *мнимой*[1] частоты $z = ip_0$:

$$G(p_0, \mathbf{p}) = \frac{1}{ip_0 - v_F(p - p_F)} \tag{A.1}$$

Очевидно, что эта функция Грина все равно имеет сингулярность на гиперповерхности ($p_0 = 0,\ p = p_F$) в четырехмерном пространстве ($p_0,\ \mathbf{p}$), где эта функция просто не определена. Эта сингулярность устойчива, т.е. не может быть устранена малыми возмущениями. Причина этого в том, что фаза $\Phi$ функции Грина, рассматриваемой как комплексное число, т.е. $G = |G|e^{i\Phi}$, меняется на $2\pi$ при обходе по любому контуру $C$, охватывающему какой – либо элемент упомянутой гиперповерхности.

В этом можно убедиться, если мы опустим одно пространственное измерение, так чтобы поверхность Ферми представляла собой замкнутую линию в двумерном пространстве $(p_x, p_y)$. Сингулярности функции Грина (A.1) лежат тогда на на замкнутой линии в трехмерном пространстве $(p_0, p_x, p_y)$, показанной на нижней части Рис. A.1. Фаза функции Грина меняется на $2\pi$ при каждом обходе произвольного

[1]Мнимая частота вводится, чтобы избежать обычной сингулярности при $z = \xi(\mathbf{p})$, и не связана, вообще говоря, с мацубаровским формализмом.

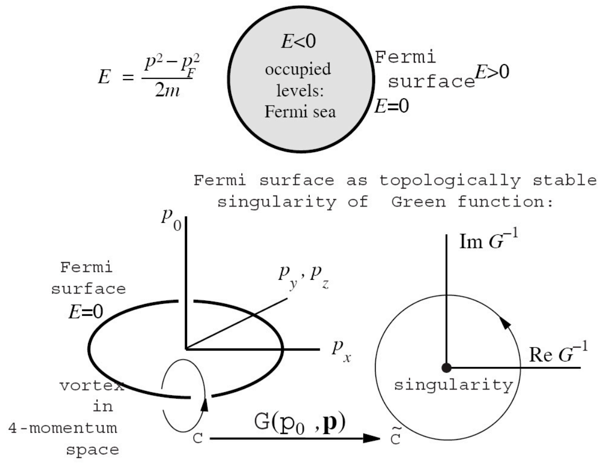



Рис. A.1: Поверхность Ферми, как топологический объект в импульсном пространстве. *Наверху*: в идеальном фермиевском газе, поверхность Ферми ограничивает сферу заполненных состояний с отрицательной энергией. *Внизу*: поверхность Ферми сохраняется даже при "включении" взаимодействия. Причина в том, что она представляет собой топологически устойчивый объект – "вихрь" в четырехмерном пространстве $(p_0, \mathbf{p})$.

контура $C$, охватывающего любой элемент этого "вихревого кольца"[2] в трехмерном пространстве $(p_0, p_x, p_y)$. Соответствующее "циркуляционное число" $N_1 = 1$ не может меняться непрерывным образом и устойчиво, по отношению к адиабатическому "включению" любого взаимодействия. Поэтому сингулярность функции Грина и наличие нулевых энергий возбуждения в системе фермионов при этом также сохраняются.

В общем случае функция Грина фермиона является матрицей со спиновыми индексами. В периодическом кристалле она характеризуется дополнительно зонным индексом и т. п. В таком случае, понятие фазы гриновской функции теряет смысл, однако описанное топологической свойство, фактически, сохраняется. Можно показать, что в в таком общем случае можно ввести топологический инвариант, который записывается в следующем виде:

$$N_1 = Sp \oint_C \frac{dl}{2\pi i} G(p_0, \mathbf{p}) \frac{\partial G^{-1}(p_0, \mathbf{p})}{\partial l} \tag{A.2}$$

где функция Грина представляет собой соответствующую матрицу, а интеграл берется по произвольному контуру $C$ в пространстве $(p_0, \mathbf{p})$, окружающему гиперповерхность сингулярностей в этом пространстве (как это показано на нижней части Рис. A.1). В (A.2) $Sp$ берется по спиновым, зонным и прочим возможным индексам.

В ферми – жидкости Ландау одночастичная функция Грина, как мы знаем, имеет вид:

$$G(p_0, \mathbf{p}) = \frac{Z}{ip_0 - v_F(p - p_F)} + \cdots \tag{A.3}$$

В отличие от идеального ферми – газа скорость Ферми $v_F$ не равняется больше просто $p_F/m$, а является отдельной "фундаментальной константой" теории ферми – жидкости. Она определяет эффективную массу квазичастицы $m^* = p_F/v_F$. Изменение $v_F$ и вычета $Z$ не меняют величину топологического инварианта (A.2). Это

[2]Здесь имеется прямая аналогия с топологической устойчивостью абрикосовских вихрей в сверхпроводниках II рода, где параметр порядка имеет, как известно, вид $\Psi = |\Psi|e^{i\Phi}$ [21].

подтверждает предположение теории Ландау об однозначном соответствии между низкоэнергетическими квазичастицами в ферми – жидкости и частицами в идеальном ферми – газе.

Поэтому (если в системе не возникают "инфракрасные" особенности, типа обсуждавшихся выше в связи с моделью Томонага – Латтинжера) в изотропной ферми – жидкости спектр фермионных квазичастиц описывается универсальной зависимостью:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) \to v_F(|\mathbf{p}| - p_F) \tag{A.4}$$

с двумя "фундаментальными константами" $v_F$ и $p_F$. Их величина определяется "микроскопическими" взаимодействиями, но в теории ферми – жидкости они являются феноменологическими константами.

Топологическая устойчивость поверхности Ферми означает, что любое непрерывное изменение системы не меняет топологический инвариант. В частности, таким изменением может быть и адиабатическое включение взаимодействия между частицами и (или) адиабатическая деформация поверхности Ферми. В условиях таких адиабатических воздействий энергетические уровни системы не могут пересекать поверхность Ферми. Состояние без возбужденных квазичастиц трансформируется в другое такое же состояние, т.е. вакуум системы переходит в другой вакуум (основное состояние). Это и приводит к справедливости теоремы Латтинжера, которая утверждает, что объем поверхности Ферми является "адиабатическим инвариантом" (если полное число частиц в системе не изменяется).

Для изотропной ферми – жидкости со сферической поверхностью Ферми, теорема Латтинжера сводится к утверждению о сохранении обычного (газового!) соотношения между плотностью частиц и импульсом Ферми:

$$n = \frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3} \tag{A.5}$$

Поверхность Ферми, характеризуемая топологическим инвариантом $N_1$ существует для систем любых размерностей в обычном пространстве. В двумерии, как мы видели, она представляет собой замкнутую линию в двумерном импульсном пространстве, соответствующую "вихревому кольцу" в трехмерном пространстве частотно – импульсном пространстве. В одномерных системах поверхность Ферми является точечным "вихрем".

Мы видели выше, что в одномерных системах функция Грина может иметь вид, совершенно отличный от канонической формулы (A.3) теории Ландау. В частности, в модели Томонага – Латтинжера ее полюсная структура пропадает из – за "инфракрасных" расходимостей. Тем не менее, как поверхность Ферми, так и утверждение о наличии в системе возбуждений со сколь угодно малой энергией сохраняются (для системы с достаточно слабым взаимодействием), ввиду сохранения топологического инварианта $N_1 = 1$. В самом деле, если в полученных выше выражениях для функции Грина в модели Томонага – Латтинжера (типа (6.345)) перейти к $\varepsilon \to ip_0$, то в них возникнет все та же особенность при $(p_0 = 0,\ p = 0)$. Поэтому поверхность Ферми сохраняется, несмотря на нарушение основных положений теории Ландау.

Рассмотрим с этой точки зрения нашу модель псевдощелевого состояния в точно решаемом пределе больших корреляционных длин ($\xi \to \infty$). Перепишем (6.203) как:

$$G(p_0, p) = \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \frac{ip_0 + \xi_p}{(ip_0)^2 - \xi_p^2 - \zeta\Delta^2} =$$

$$= \frac{ip_0 + \xi_p}{\Delta^2} \exp\left(\frac{p_0^2 + \xi_p^2}{\Delta^2}\right) Ei\left(-\frac{p_0^2 + \xi_p^2}{\Delta^2}\right) \tag{A.6}$$

Тогда для $p_0 \to 0$ и $\xi_p \to 0$ (i.e. $p \to p_F$) имеем:

$$G(p_0, p) \approx \frac{ip_0 + \xi_p}{\Delta^2} \ln\left(\gamma \frac{p_0^2 + \xi_p^2}{\Delta^2}\right) \equiv \frac{Z(p_0, \xi_p)}{ip_0 - \xi_p} \tag{A.7}$$

где

$$Z(p_0, \xi_p) = -\frac{p_0^2 + \xi_p^2}{\Delta^2} \ln\left(\gamma \frac{p_0^2 + \xi_p^2}{\Delta^2}\right) \to 0 \quad \text{for} \quad p_0 \to 0,\ \xi_p \to 0 \tag{A.8}$$

Видим, что влияние "вычета" становится настолько сильным, что он преобразует полюс функции Грина в нуль! Однако, сингулярность функции Грина на поверхности Ферми сохраняется: нуль это тоже сингулярность, причем с тем же топологическим инвариантом, что и полюс[3]. Таким образом, наша модель в некотором смысле аналогична модели латтинжеровской или "маргинальной" ферми – жидкостиб с очень сильной перенормировкой сингулярности на поверхности Ферми.

Отличие от теории ферми – жидкости Ландау в одномерных системах проявляется при рассмотрении *действительных* частот: квазичастичные полюса отсутствуют, вместо них имеется разрез в комплексной плоскости частоты, так что одночастичные возбуждения не определены. Функция распределения частиц при этом, как мы видели в (6.351), не имеет скачка на поверхности Ферми, однако, вообще говоря, может сохраняться степенная особенность в ее производной.

[3]Автор благодарен Г.Е.Воловику за прояснение этого вопроса.

# Приложение B

# Электрон в случайном поле и интегралы по траекториям.

Возвращаясь к задаче о движении электрона в поле случайно расположенных в пространстве рассеивателей, покажем, как можно получить формальное выражение для усредненной одноэлектронной функции Грина в виде фейнмановского интеграла по траекториям [20], эквивалентного сумме ряда всевозможных диаграмм теории возмущений. Для электрона, движущегося в потенциальном поле (4.1), в координатно – временном представлении функция Грина записывается в виде стандартного интеграла по траекториям следующего вида ($N$ – полное число рассеивателей):

$$G(\mathbf{r}\mathbf{r}';t) = \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}} \mathcal{D}\mathbf{r}(\tau) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau \left[ \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} - \sum_{j=1}^{N} v(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j) \right] \right\} \tag{B.1}$$

где $\int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}} \mathcal{D}\mathbf{r}(\tau)$ обозначает функциональное интегрирование по мере Винера – Фейнмана [20], причем $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ представляют собой конечную и начальную точки движения, совершаемого за интервал времени $t$.

Рассмотрим достаточно общий случай, когда заданы $N$ – частичные функции распределения [11] рассеивателей $F_N(\mathbf{R}_1, ..., \mathbf{R}_N)$. Тогда, проводя усреднение вклада в (B.1), зависящего от конфигураций рассеивающих центров, получаем:

$$\begin{aligned} &\left\langle \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar}\sum_j \int_0^t d\tau v(\mathbf{r}(\tau)-\mathbf{R}_j) \right\} \right\rangle = \\ &= \frac{1}{V^N}\int d\mathbf{R}_1 ... \int d\mathbf{R}_N \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar}\sum_j \int_0^t d\tau v(\mathbf{r}(\tau)-\mathbf{R}_j) \right\} F_N(\mathbf{R}_1, ..., \mathbf{R}_N) = \\ &= \exp\left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_0^t d\tau_1 ... \int_0^t d\tau_n \left\langle \sum_i v(\mathbf{r}(\tau_1)-\mathbf{R}_i) ... \sum_j v(\mathbf{r}(\tau_n)-\mathbf{R}_j) \right\rangle_c \right\} \equiv \\ &\equiv \exp\left\{ \sum_n \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n K_n \right\} \end{aligned} \tag{B.2}$$

где $< ... >_c$ – кумулянтные средние, определенные согласно (4.13), $V$ – объем системы. В результате, усредненная функция Грина имеет вид:

$$< G(\mathbf{r}\mathbf{r}';t) >= \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}} \mathcal{D}\mathbf{r}(\tau) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} + \sum_n \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n K_n \right\} \tag{B.3}$$

Ограничиваясь $n = 2$ (вклад, соответствующий $n = 1$, дает тривиальный фазовый множитель), т.е. гауссовым приближением для статистики случайного поля, получаем:

$$< G(\mathbf{r}\mathbf{r}';t) >= \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}} \mathcal{D}\mathbf{r}(\tau) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} - \frac{1}{2\hbar^2}\int_0^t d\tau' \int_0^t d\tau W[\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}'(\tau')] \right\} \tag{B.4}$$

где

$$W(\mathbf{r} - \mathbf{r}') =< V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}') >_c \tag{B.5}$$

что для задачи хаотически расположенных в пространстве "примесей" определяется с помощью (4.12), (4.16) и сводится, в итоге, к коррелятору типа "белого шума" (4.20).

В качестве примера применения (B.4) для решения конкретных задач, рассмотрим электрон, движущийся в одномерной системе в гауссовом случайном поле с коррелятором типа (6.184), интересовавшим нас в связи с рассмотрением модели псевдощелевого состояния:

$$W(r - r') = 2 < |\Delta|^2 > \exp\left\{-\frac{|r-r'|}{\xi(T)}\right\} \cos 2p_F(r - r') \tag{B.6}$$

Фурье – образ этого коррелятора имеет, как мы видели, вид (6.196):

$$S(Q) = 2\Delta^2 \left\{ \frac{\kappa}{(Q-2p_F)^2 + \kappa^2} + \frac{\kappa}{(Q+2p_F)^2+\kappa^2} \right\} \tag{B.7}$$

где $\kappa = \xi^{-1}$, и представляет собой два лоренцевских пика с шириной $\sim \xi^{-1}$, центрированных на $Q = \pm K = \pm 2p_F$. Вводя переменную $q$ (отклонение от центра пика) как $Q = \pm K + q$, можем записать:

$$\begin{aligned}
\int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' W[r(\tau) - r'(\tau')] &= \int \frac{dQ}{2\pi} S(Q) \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' e^{iQr(\tau)} e^{-iQr(\tau')} = \\
&= \Delta^2 \int \frac{dq}{\pi}\frac{\kappa}{q^2+\kappa^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' e^{iKr(\tau)} e^{iqr(\tau)} e^{-iKr(\tau')} e^{-iqr(\tau')} + \\
&+ \Delta^2 \int \frac{dq}{\pi}\frac{\kappa}{q^2+\kappa^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' e^{-iKr(\tau)} e^{iqr(\tau)} e^{iKr(\tau')} e^{-iqr(\tau')} = \\
&= 2\Delta^2 \int \frac{dq}{\pi}\frac{\kappa}{q^2+\kappa^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' e^{iqr(\tau)} e^{-iqr(\tau')} \cos K[r(\tau) - r(\tau')] = \\
&= 2\Delta^2 \int \frac{dq}{\pi}\frac{\kappa}{q^2+\kappa^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' e^{iqr(\tau)} e^{-iqr(\tau')} \{\cos Kr(\tau)\cos Kr(\tau') + \\
&+ \sin Kr(\tau) \sin Kr(\tau')\}
\end{aligned} \tag{B.8}$$

Выше мы рассматривали асимптотику больших корреляционных длин $\xi \to \infty$ (или $\kappa \to 0$). В этом случае имеем:

$$\int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' W[r(\tau) - r'(\tau')] \approx 2\Delta^2 \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \{\cos Kr(\tau)\cos Kr(\tau') +$$

$$+\sin Kr(\tau)\sin Kr(\tau')\} = 2\Delta^2\left\{\int_0^t d\tau\cos Kr(\tau)\right\}^2 + 2\Delta^2\left\{\int_0^t d\tau\sin Kr(\tau)\right\}^2 \quad (B.9)$$

Тогда легко получаем следующее представление для нетривиальной части экспоненты в (B.4):

$$\exp\left\{-\frac{1}{2\hbar^2}\int_0^t d\tau\int_0^t d\tau' W[r(\tau)-r(\tau')]\right\} =$$
$$= \exp\left\{-\frac{\Delta^2}{\hbar^2}\left[\int_0^t \cos Kr(\tau)\right]^2\right\}\exp\left\{-\frac{\Delta^2}{\hbar^2}\left[\int_0^t \sin Kr(\tau)\right]^2\right\} =$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{\pi}}e^{-x^2+2ix\frac{\Delta}{\hbar}\int_0^t \cos Kr(\tau)}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dy}{\sqrt{\pi}}e^{-y^2+2iy\frac{\Delta}{\hbar}\int_0^t \sin Kr(\tau)} \quad (B.10)$$

где в последнем равенстве использовали известный прием Хаббарда – Стратоновича. В результате, после очевидных замен переменных, получаем интересующую нас усредненную функцию Грина в виде:

$$< G(rr';t) >= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dV_x}{\sqrt{\pi}}e^{-\frac{V_x^2}{\Delta^2}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dV_y}{\sqrt{\pi}}e^{-\frac{V_y^2}{\Delta^2}}\int_{r(0)=r'}^{r(t)=r}\mathcal{D}r(\tau)\exp\frac{i}{\hbar}\left\{\int_0^t d\tau\frac{m\dot{r}^2(\tau)}{2} -\right.$$
$$\left. - 2\int_0^t d\tau V_x\cos Kr(\tau) - 2\int_0^t d\tau V_y \sin Kr(\tau)\right\} \quad (B.11)$$

Переходя к полярным координатам в плоскости $(V_x, V_y)$, т.е. вводя $W = \sqrt{V_x^2 + V_y^2}$ и $\phi = arctg\frac{V_y}{V_x}$, получаем:

$$< G(rr';t) >= \int_0^{\infty} dW\frac{2W}{\Delta^2}e^{-\frac{W^2}{\Delta^2}}\int_0^{2\pi}\frac{d\phi}{2\pi}\times$$
$$\times\int_{r(0)=r'}^{r(t)=r}\mathcal{D}r(\tau)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau\left[\frac{m\dot{r}^2(\tau)}{2} - 2W\cos(Kr(\tau)+\phi)\right]\right\} =$$
$$= \int_0^{\infty} dW\mathcal{P}\{W\}\int_0^{2\pi}\mathcal{G}_{2W\cos(Kr+\phi)}(rr';t) \quad (B.12)$$

где $\mathcal{P}(W)$ – распределение Рэлея (6.207), а $\mathcal{G}_{2W\cos(Kr+\phi)}(rr';t)$ – одноэлектронная функция Грина в периодическом поле вида $2W\cos(Kr+\phi)$. Если теперь перейти в импульсное представление и найти нормальную функцию Грина в таком поле, то в простейшем (двухволновом) приближении [27] получим (6.57), (6.60) и (в мацубаровской технике и в условиях “нестинга”, справедливых при $K = 2p_F$ (6.71) (ср. Рис. 6.7)). Тогда ясно, что (B.12) сведется к полученному выше суммированием диаграмм результату (6.203). Соответствующая аномальная функция Грина (6.72) обращается в нуль при усреднению по фазе в (B.12), что соответствует отсутствию в системе дальнего порядка. Таким образом, рассмотренная выше упрощенная модель псевдощелевого состояния действительно эквивалентна рассмотрению электрона, распространяющегося в поле вида $2W\cos(Kr+\phi)$, амплитуда которого $W$ не зависит от координаты и распределена по Рэлею, а фаза $\phi$ однородно распределена на интервале $(0, 2\pi)$. Возникновение здесь распределения Рэлея тесно связано с предположением о гауссовском характере случайного поля, в котором движется электрон.

Использование асимптотики $\xi \to \infty$, т.е. пренебрежение шириной лоренцевских пиков в $S(Q)$, очевидно соответствует пренебрежению крупномасштабными флуктуациями амплитуды нашего случайного поля на расстояниях порядка $\xi \sim \kappa^{-1}$. Из физических соображений ясно, эти флуктуации приводят к дополнительному рассеянию с характерными временами порядка $\tau \sim \frac{\xi}{v_F} \sim (v_F\kappa)^{-1}$ (ср. (6.198)). Ясно, что влиянием такого рассеяния можно пренебречь для области энергий, удовлетворяющих условию $v_F\kappa \ll \xi_p$. Оно также не играет роли при $v_F\kappa \ll T$. Эти условия были выписаны выше в (6.199). Более последовательное (но и громоздкое!) рассмотрению задачи с конечными $\kappa$ приводит к таким же качественным выводам. Главный эффект рассеяния на крупномасштабных флуктуациях[1] – возникновение конечной плотности состояний электрона в центре псевдощели и ее полное "замытие" при $v_F\kappa \sim \Delta$.

---

[1] М.В.Садовский. УФН **171**, 539 (2001)

# Литература


[1] А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Физматгиз, М, 1963, Добросвет 1998

[2] Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. Статистическая физика. Часть 2. “Наука”, М, 1978, 2000

[3] Л.С.Левитов, А.В.Шитов. Функции Грина. Задачи с решениями. Физматлит, М, 2003; http://www.mit.edu/ levitov/book/

[4] G.D.Mahan. Many – Particle Physics. Plenum Press, NY 1981

[5] Дж.Шриффер. Теория сверхпроводимости. “Наука”, М, 1970

[6] D.Khomskii. Quantum Theory of Solids (Lecture Notes), Groningen 1999

[7] С.Л.Гинзбург. Необратимые явления в спиновых стеклах. “Наука”, М, 1989

[8] А.Б.Мигдал. Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер. “Наука”, М, 1983

[9] P.Nozieres. Theory of Interacting Fermi Systems. W.A.Benjamin, NY 1964

[10] Д.Пайнс, Ф.Нозьер. Теория квантовых жидкостей. “Мир”, М, 1967

[11] М.В.Садовский. Лекции по статистической физике. “Институт компьютерных исследований”, Москва – Ижевск, 2003

[12] Д.Н.Зубарев. Неравновесная статистическая механика. “Наука”, М, 1971

[13] C.M.Varma, Z.Nussinov, Wim van Saarloos. Singular or non – Fermi liquids. Physics Reports **361**, 267 (2002)

[14] Проблема высокотемпературной сверхпроводимости. Под ред. В.Л.Гинзбурга и Д.А.Киржница. “Наука”, М, 1977

[15] И.М.Лифшиц, С.А.Гредескул, Л.А.Пастур. Введение в теорию неупорядоченных систем. “Наука”, М, 1982

[16] M.V.Sadovskii. Superconductivity and Localization. World Scientific, Singapore 2000

[17] B.L.Altshuler, A.G.Aronov. Electron – Electron Interaction in Disordered Conductors. In “Electron – Electron Interactions in Disordered Systems”, Ed. by A.L.Efros and M.Pollak. Elsevier 1985

[18] B.L.Altshuler, A.G.Aronov, D.E.Khmelnitskii, A.I.Larkin. Coherent Effects in Disordered Conductors. In "Quantum Theory of Solids", Ed. by I.M.Lifshits. Mir Publishers, Moscow 1982

[19] P.A.Lee, T.V.Ramakrishnan. Disordered Electronic Systems. Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985)

[20] М.В.Садовский. Лекции по квантовой теории поля. "Институт компьютерных исследований". Москва – Ижевск, 2003

[21] П. Де Жен. Сверхпроводимость металлов и сплавов. "Мир", М, 1968

[22] Н.Ф.Мотт. Переходы металл – изолятор. "Наука", М, 1979

[23] Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников. "Наука", М, 1979

[24] R.D.Mattuck. Quantum Theory of Phase Transitions in Fermi Systems. Adv.Phys. **17**, 509 (1968)

[25] Н.Н.Боголюбов. Квазисредние в задачах статистической механики. Избр. труды. т.3, 174, "Наукова думка", Киев 1971

[26] С.В.Вонсовский, Ю.А.Изюмов, Э.З.Курмаев. Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений. "Наука", М, 1977

[27] Д.Займан. Принципы теории твердого тела. "Мир", М, 1974

[28] Р.Уайт, Т.Джебелл. Дальний порядок в твердых телах. "Мир", М, 1982