Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. П. Маслов, О модели высокотемпературной сверхпроводимости, *Матем. заметки*, 2003, том 73, выпуск 6, 942–946

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm2667>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.205.19.152

26 апреля 2023 г., 17:14:19

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

О МОДЕЛИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

В. П. Маслов

Рассмотрим систему N фермионов в кристаллической решетке. Будем считать, что решетка состоит из G ячеек и создает внешнее поле, в котором двигаются фермионы, период потенциала внешнего поля равен периоду решетки. На волновую функцию фермионов наложим периодические условия Борна–Кармана, т.е. координаты N частиц x_i , $i = 1, \dots, N$, принимают значения на трехмерном торе T . Потенциал внешнего поля $U(x)$ такой, что дискретный спектр уравнения Шрёдингера для одной частицы распадается на зоны. Будем считать, что энергетические уровни всех зон, кроме двух верхних полностью заполнены. Верхняя из незаполненных зон называется *зоной проводимости*, а нижняя – *валентной зоной*. Рассмотрим модель, в которой потенциал взаимодействия фермионов имеет специальный вид: взаимодействуют между собой только фермионы, находящиеся в зоне проводимости, потенциал этого взаимодействия зависит только от импульсов и имеет вид

$$V(p_1, p_2) = -\frac{V}{N} W_{\Omega}(p_1 - p_2), \quad (1)$$

где Ω – область в $\mathbb{R}^3$, вид которой будет конкретизован ниже, а W_{Ω} – характеристическая функция этой области, V – положительное число. Уравнение Шрёдингера для такой фермионной системы имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_N \Psi(x_1, \dots, x_N) &= \sum_{j=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_j + U(x_j) \right) \Psi(x_1, \dots, x_N) \\ &- \frac{V}{N} \sum_{j=1}^N \sum_{k=j+1}^N \sum_{l=1}^{G_2} \sum_{m=1}^{G_2} \sum_{k=1}^{G_2} \sum_{n=1}^{G_2} \varphi_l(x_j) \varphi_m(x_k) \\ &\times \iint d\xi d\eta \varphi_l^*(\xi) \varphi_m^*(\eta) W_{\Omega} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \xi} + i\hbar \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \varphi_k(\xi) \varphi_n(\eta) \\ &\times \iint dz dw \varphi_k^*(z) \varphi_n^*(w) \Psi(x_1, \dots, x_{j-1}, z, x_{j+1}, \dots, x_{k-1}, w, x_{k+1}, \dots, x_N) \\ &= E \Psi(x_1, \dots, x_N), \end{aligned} \quad (2)$$

где $\Psi(x_1, \dots, x_N)$ – антисимметричная функция, $\varphi_i(x)$, $i = 1, \dots, G_2$, – набор собственных функций одночастичного уравнения Шрёдингера, отвечающих зоне проводимости, G_2 – число уровней в зоне проводимости. Область Ω определяется следующим образом: это есть шар с центром в точке 0 радиуса P , где число P – максимальное из чисел

$$P_i = \frac{\hbar^2 \int dx \varphi_i^*(x) \Delta \varphi_i(x)}{\int dx \varphi_i^*(x) \varphi_i(x)}, \quad i = 1, \dots, G_2. \quad (3)$$

Следуя [1]–[6], рассмотрим ансамбль таких фермионных систем при температуре θ . Квантование этого ансамбля приводит к унитарно-нелинейному уравнению, которое эквивалентно следующей системе уравнений:

$$\hat{H}_N \Psi_\alpha + \theta \ln \left(\frac{\|\Psi_\alpha\|^2}{\sum_{\alpha'} \|\Psi_{\alpha'}\|^2} \right) = F \Psi_\alpha, \quad (4)$$

где α – дискретный индекс, принимающий значения в некотором подмножестве множества натуральных чисел, Ψ_α – функции из пространства $L_2(\mathbb{T}^N)$, ортогональные друг другу, $\|\Psi\|$ – норма в пространстве $L_2(\mathbb{T}^N)$, F – собственное значение унитарно-нелинейного уравнения. В пределе при $N \rightarrow \infty$ асимптотика решений унитарно-нелинейного уравнения выражается через решения температурных уравнений Хартри–Фока.

Рассмотрим простой случай, когда $\Omega = \mathbb{R}^3$. Тогда уравнение Шрёдингера и унитарно-нелинейное уравнение для системы фермионов решаются точно. Для простоты полагаем, что в валентной и проводящей зонах одинаковое число уровней G . Энергетические уровни в валентной зоне обозначим ε_{1i} , а в зоне проводимости – ε_{2i} , $i = 1, \dots, G$, где числа ε упорядочены следующим образом:

$$\varepsilon_{1i} < \varepsilon_{1i+1}, \quad \varepsilon_{2i} < \varepsilon_{2i+1}, \quad \varepsilon_{1G} < \varepsilon_{21}.$$

Кроме того, далее через N обозначается число частиц в валентной и проводящей зонах. В силу принципа Паули $N \leq 2G$. Уровни энергии такой фермионной системы имеют вид

$$E_{\{n\}} = E_0 + \sum_{i=1}^G (\varepsilon_{1i} n_{1i} + \varepsilon_{2i} n_{2i}) - \frac{V}{2N} \left(\sum_{i=1}^G n_{2i} \right),$$

где E_0 – энергия заполненных нижних зон, $\{n\}$ – набор целых неотрицательных чисел n_{1i} , n_{2i} , $i = 1, \dots, G$, таких, что

$$\sum_{i=1}^G (n_{1i} + n_{2i}) = N.$$

Поскольку все нижние зоны полностью заполнены фермионами, то система температурных уравнений Хартри–Фока в рассматриваемом случае специального вида взаимодействия принимает вид системы алгебраических уравнений

$$\lambda_{1i} = \varepsilon_{1i}, \quad \lambda_{2i} = \varepsilon_{2i} - \frac{V}{N} \sum_{j=1}^G \bar{n}_{2j}, \quad i = 1, \dots, G, \quad (5)$$

где μ определяется из уравнения

$$\sum_{i=1}^G (\bar{n}_{1i} + \bar{n}_{2i}) = N, \quad (6)$$

а $\bar{n}$ выражаются через λ следующим образом:

$$\bar{n}_{1i} = \frac{1}{\exp((\lambda_{1i} - \mu)/\theta) + 1}, \quad \bar{n}_{2i} = \frac{1}{\exp((\lambda_{2i} - \mu)/\theta) + 1}.$$

Будем считать, что G зависит от N таким образом, что

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{G}{N} = g > \frac{1}{2},$$

а ε зависят от G так, что

$$\varepsilon_{1i+1} - \varepsilon_{1i} = O\left(\frac{1}{G}\right), \quad \varepsilon_{2i+1} - \varepsilon_{2i} = O\left(\frac{1}{G}\right),$$

$$\lim_{G \rightarrow \infty} \varepsilon_{11} = \varepsilon_1^-, \quad \lim_{G \rightarrow \infty} \varepsilon_{1G} = \varepsilon_1^+, \quad \lim_{G \rightarrow \infty} \varepsilon_{21} = \varepsilon_2^-, \quad \lim_{G \rightarrow \infty} \varepsilon_{2G} = \varepsilon_2^+.$$

Тогда в пределе при $N \rightarrow \infty$ решениям системы уравнений (5) отвечают собственные значения унитарно-нелинейного уравнения, имеющие вид

$$\begin{aligned} F(\theta) = & \sum_{i=1}^G (\varepsilon_{1i} \bar{n}_{1i} + \varepsilon_{2i} \bar{n}_{2i}) - \frac{V}{2N} \left(\sum_{i=1}^G \bar{n}_{2i} \right)^2 \\ & + \theta \sum_{i=1}^G (\bar{n}_{1i} \ln(\bar{n}_{1i}) + (1 - \bar{n}_{1i}) \ln(1 - \bar{n}_{1i})) \\ & + \sum_{i=1}^G (\bar{n}_{2i} \ln(\bar{n}_{2i}) + (1 - \bar{n}_{2i}) \ln(1 - \bar{n}_{2i})) + O(1). \end{aligned} \quad (7)$$

Предположим теперь, что ε зависят от G так, что для любой непрерывной функции выполняются равенства

$$\lim_{G \rightarrow \infty} \frac{1}{G} \sum_{i=1}^G f(\varepsilon_{1i}) = \int_{\varepsilon_1^-}^{\varepsilon_1^+} d\varepsilon f(\varepsilon) \rho_1(\varepsilon), \quad \lim_{G \rightarrow \infty} \frac{1}{G} \sum_{i=1}^G f(\varepsilon_{2i}) = \int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon f(\varepsilon) \rho_2(\varepsilon),$$

где функции ρ_1 и ρ_2 положительны и непрерывны на интервалах $[\varepsilon_1^-, \varepsilon_1^+]$ и $[\varepsilon_2^-, \varepsilon_2^+]$ соответственно и равны 0 вне соответствующих интервалов; кроме того, для этих функций выполняются условия

$$\int_{\varepsilon_1^-}^{\varepsilon_1^+} d\varepsilon \rho_1(\varepsilon) = 1, \quad \int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon \rho_2(\varepsilon) = 1.$$

В этом случае система уравнений (5) в пределе при $N \rightarrow \infty$ принимает вид системы интегральных уравнений

$$\begin{aligned} \lambda_1(\varepsilon) &= \varepsilon, \quad \varepsilon \in [\varepsilon_1^-, \varepsilon_1^+], \\ \lambda_2(\varepsilon) &= \varepsilon - Vg \int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon' \frac{\rho_2(\varepsilon')}{\exp((\lambda_2(\varepsilon') - \mu)/\theta) + 1}, \quad \varepsilon \in [\varepsilon_1^-, \varepsilon_1^+], \end{aligned} \quad (8)$$

а уравнение (6) для μ переходит в следующее уравнение:

$$\int_{\varepsilon_1^-}^{\varepsilon_1^+} d\varepsilon \frac{\rho_1(\varepsilon)}{\exp((\lambda_1(\varepsilon) - \mu)/\theta) + 1} + \int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon \frac{\rho_2(\varepsilon)}{\exp((\lambda_2(\varepsilon) - \mu)/\theta) + 1} = \frac{1}{g}. \quad (9)$$

Собственные значения (7) унитарно-нелинейного уравнения записываются в виде

$$\begin{aligned} F(\theta) = & G \int_{\varepsilon_1^-}^{\varepsilon_1^+} d\varepsilon \rho_1(\varepsilon) \left(\varepsilon \bar{n}_1(\varepsilon) + \theta (\bar{n}_1(\varepsilon) \ln(\bar{n}_1(\varepsilon)) + (1 - \bar{n}_1(\varepsilon)) \ln(1 - \bar{n}_1(\varepsilon))) \right) \\ & + G \int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon \rho_2(\varepsilon) \left(\varepsilon \bar{n}_2(\varepsilon) + \theta (\bar{n}_2(\varepsilon) \ln(\bar{n}_2(\varepsilon)) + (1 - \bar{n}_2(\varepsilon)) \ln(1 - \bar{n}_2(\varepsilon))) \right) \\ & - G \frac{Vg}{2} \left(\int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon \bar{n}_2(\varepsilon) \right)^2 + O\left(\frac{1}{N}\right), \end{aligned} \quad (10)$$

где $\bar{n}(\varepsilon)$ имеют вид

$$\bar{n}_1(\varepsilon) = \frac{1}{\exp((\lambda_1(\varepsilon) - \mu)/\theta) + 1}, \quad \bar{n}_2(\varepsilon) = \frac{1}{\exp((\lambda_2(\varepsilon) - \mu)/\theta) + 1}.$$

Определим $\bar{n}_2$ следующим образом

$$\bar{n}_2 = \int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon \rho_2(\varepsilon) \bar{n}_2(\varepsilon). \quad (11)$$

Из уравнений (8) следует уравнение для $\bar{n}_2$:

$$\bar{n}_2 = \int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon \frac{\rho_2(\varepsilon)}{\exp((\varepsilon - \mu - Vg\bar{n}_2)/\theta) + 1}, \quad (12)$$

а уравнение (9) может быть записано в виде

$$\int_{\varepsilon_1^-}^{\varepsilon_1^+} d\varepsilon \frac{\rho_1(\varepsilon)}{\exp((\varepsilon - \mu)/\theta) + 1} + \bar{n}_2 = \frac{1}{g}. \quad (13)$$

Число решений системы уравнений (12), (13) зависит от параметров $\theta, V, g, \varepsilon^\pm$. Если температура θ достаточно высокая, то уравнения (12), (13) имеют одно решение. Асимптотика этого решения в пределе при $\theta \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\bar{n}_2 = \frac{1}{2g} + o(1), \quad \mu = -\theta \ln(2g - 1) + O(1). \quad (14)$$

Предположим, что выполнены условия

$$1 < g, \quad \varepsilon_2^- - \varepsilon_1^- < V. \quad (15)$$

В этом случае при достаточно малых значениях температуры θ уравнения (12), (13) имеют не меньше двух решений. Асимптотика одного из решений в пределе при $\theta \rightarrow 0$ имеет вид

$$\bar{n}_2 = o(1), \quad \mu = \mu_1 + o(1), \quad (16)$$

где μ_1 определяется из уравнения

$$\frac{1}{g} = \int_{\varepsilon_1^-}^{\mu_1} d\varepsilon \rho_1(\varepsilon). \quad (17)$$

Асимптотика второго решения имеет вид

$$\bar{n}_2 = \frac{1}{g} + o(1), \quad \mu = \mu_2 + o(1), \quad (18)$$

где μ_2 определяется из уравнения

$$\frac{1}{g} = \int_{\varepsilon_2^-}^{\mu_2 + V} d\varepsilon \rho_2(\varepsilon). \quad (19)$$

Предположим теперь, что вместо условий (15) выполнены следующие условия:

$$g < 1, \quad \frac{\varepsilon_2^+ - \varepsilon_1^-}{g} < V < \frac{\varepsilon_2^+ - \varepsilon_1^-}{1 - g}. \quad (20)$$

В этом случае при достаточно малых значениях температуры уравнения (12), (13) имеют по крайней мере два решения. Асимптотика одного из этих решений в пределе при $\theta \rightarrow 0$ имеет вид

$$\bar{n}_2 = \frac{1}{g} - 1 + o(1), \quad \mu = \mu_1 + o(1), \quad (21)$$

где μ_1 определяется из уравнения

$$\frac{1}{g} - 1 = \int_{\varepsilon_2^-}^{\mu_1 + V(1-g)} d\varepsilon \rho_2(\varepsilon). \quad (22)$$

Асимптотика второго решения есть

$$\bar{\mu}_2 = 1 + o(1), \quad \mu = \mu_2 + o(1), \quad (23)$$

где μ_2 определяется из уравнения

$$\frac{1}{g} - 1 = \int_{\varepsilon_1^-}^{\mu_2} d\varepsilon \rho_1(\varepsilon). \quad (24)$$

Таким образом, если выполнено одно из условий (15), (20), то при изменении температуры θ меняется число решений уравнений, т.е. происходит фазовый переход. Уравнение для критической температуры θ_c , при которой происходит фазовый переход, имеет вид

$$\begin{aligned} & \theta_c \left(\frac{\alpha}{1-\alpha} \right)^2 \int_{\varepsilon_1^-}^{\varepsilon_1^+} d\varepsilon \frac{\rho_1(\varepsilon) \exp((\varepsilon - \mu)/\theta_c)}{(\exp((\varepsilon - \mu)/\theta_c) + 1)^2} \\ & + \theta_c \int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon \frac{\rho_2(\varepsilon) \exp((\varepsilon - \mu - Vg\bar{\mu}_2)/\theta_c)}{(\exp((\varepsilon - \mu - Vg\bar{\mu}_2)/\theta_c) + 1)^2} \\ & - Vg \left(\int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon \frac{\rho_2(\varepsilon) \exp((\varepsilon - \mu - Vg\bar{\mu}_2)/\theta_c)}{(\exp((\varepsilon - \mu - Vg\bar{\mu}_2)/\theta_c) + 1)^2} \right)^2 = 0, \end{aligned} \quad (25)$$

где $\bar{\mu}_2$, μ удовлетворяют уравнениям (12), (13) при $\theta = \theta_c$, а α имеет вид:

$$\begin{aligned} \alpha = & \left(\int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon \frac{\rho_2(\varepsilon) \exp((\varepsilon - \mu - Vg\bar{\mu}_2)/\theta_c)}{(\exp((\varepsilon - \mu - Vg\bar{\mu}_2)/\theta_c) + 1)^2} \right) \\ & \times \left[\int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon \frac{\rho_2(\varepsilon) \exp((\varepsilon - \mu - Vg\bar{\mu}_2)/\theta_c)}{(\exp((\varepsilon - \mu - Vg\bar{\mu}_2)/\theta_c) + 1)^2} \right. \\ & \left. + \int_{\varepsilon_2^-}^{\varepsilon_2^+} d\varepsilon \frac{\rho_2(\varepsilon) \exp((\varepsilon - \mu - Vg\bar{\mu}_2)/\theta_c)}{(\exp((\varepsilon - \mu - Vg\bar{\mu}_2)/\theta_c) + 1)^2} \right]^{-1}. \end{aligned}$$

Случай, когда в валентной зоне и в зоне проводимости разное число уровней, может быть рассмотрен аналогичным образом. Кроме того, полученные результаты о существовании метастабильных состояний и о фазовом переходе, справедливы так же в более сложном случае, когда область Ω не равна всему пространству, а есть шар радиуса P .

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Маслов В. П. Квантование термодинамики и ультратворичное квантование. М.: Институт компьютерных исследований, 2001.
2. Маслов В. П. // Функцион. анализ. 2003. Т. 37. № 2.
3. Маслов В. П. // Матем. заметки. 2003. Т. 73. № 4. С. 637–640.
4. Маслов В. П. // Матем. заметки. 1997. Т. 62. № 4. С. 633–634.
5. Koval' G. V. // Russian J. Math. Phys. 1997. V. 5. № 4. P. 527–528.
6. Рууге А. // Матем. заметки. 2000. Т. 67. № 2. С. 257–269.

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
E-mail: viktor_maslov@hotmail.com

Поступило
20.04.2003