Исследование уравнения для щели в энергетическом спектре сверхпроводника

А. В. Свидзинский

В этой работе будет изучаться уравнение Н. Н. Боголюбова для щели в спектре одночастичных возбуждений сверхпроводника [1]. Уравнение для щели $\Delta(\theta, \vec{p})$ как функции температуры θ и импульса $\vec{p}$ имеет вид

$$\Delta(\theta, \vec{p}) = \frac{1}{2(2\pi)^3} \int I(\vec{p}, \vec{p}') \frac{\Delta(\theta, \vec{p}')}{\sqrt{\xi^2(\vec{p}') + \Delta^2(\theta, \vec{p}')}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\xi^2(\vec{p}') + \Delta^2(\theta, \vec{p}')}}{2\theta} d\vec{p}'. \tag{1}$$

Ядро интегрального уравнения $I(\vec{p}, \vec{p}')$ описывает взаимодействие пар электронов с противоположными импульсами, $\xi(\vec{p}) = \varepsilon(\vec{p}) - \varepsilon(\vec{p}_F)$ — энергия электрона с законом дисперсии $\varepsilon(\vec{p})$, отсчитанная от энергии Ферми.

Для изотропного закона дисперсии уравнение (1) было исследовано в работе Д. Н. Зубарева и Ю. А. Церковникова [2], а в анизотропном случае — в работе В. Л. Покровского [3]. При этом в [3] предполагалось, что ядро I является функцией только направлений импульсов $\left(\vec{n} = \frac{\vec{p}}{|p|}\right)$ на поверхности Ферми $I = I(\vec{n}, \vec{n}')$ и отлично от нуля вблизи поверхности Ферми в энергетическом слое, толщина которого равна удвоенной дебаевской энергии ω, а вне указанного слоя ядро равно нулю. В этих предположениях В. Л. Покровский нашел асимптотику решения уравнения (1) в области температур, близких к критической. Интересный результат, полученный в [3] для описанной модели, состоит в том, что вместо универсальных равенств изотропной теории возникают универсальные неравенства для значений различных термодинамических величин. Например, оказывается, что относительный скачек теплоемкости

$$\frac{\sigma_s - \sigma_n}{\sigma_n} < 1{,}43$$

для любого сверхпроводника. Появление неравенств приводит, как правило, к ухудшению согласия теории с имеющимся в настоящее время экспериментальным материалом; причины этого пока еще не вполне ясны.

В настоящей работе мы применяем к исследованию уравнения для щели другой, более простой, метод. При этом рассматриваем несколько более общую модель, а именно учитываем также зависимость ядра от энергетических переменных. Очевидно, что эта зависимость должна учитываться наряду с зависимостью от направлений импульсов, поскольку обе они одного порядка. Действительно, рассматривая, например, ядро, полученное в [1] для модели Фрелиха, убеждаемся, что при изменении энергетической переменной ξ от нуля до дебаевской энергии ω ядро, а стало быть, и щель меняются на порядок своей величины. То же самое касается зависимости щели от направлений. Итак, будем считать $I(\vec{p}, \vec{p}')$ заданной функцией, симметричной по $\vec{p}$ и $\vec{p}'$, медленно меняющейся в слое толщиной 2ω вблизи поверхности Ферми и равной нулю вне этого слоя.

Займемся получением асимптотики решения уравнения (1) при температурах, близких к критической. Введем переменную

$$\tau = 1 - \frac{\theta}{\theta_c},$$

где θ_c — критическая температура.

Известно, что в случае ядра, постоянного в рассматриваемом слое, асимптотическое поведение щели как функции τ при $\tau \sim 0$ определяется членом, пропорциональным $\tau^{1/2}$. Легко убедиться, что этот факт не связан с конкретной формой ядра. На этом основании будем искать решение уравнения (1) в виде следующего ряда по полуцелым степеням:

$$\Delta(\tau, \vec{p}) = \tau^{1/2} f_1(\vec{p}) + \tau^{3/2} f_2(\vec{p}) + \ldots \tag{2}$$

Подставляя этот ряд в (1) и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях τ, получаем

$$f_1(\vec{p}) = \frac{1}{2(2\pi)^3} \int I(\vec{p}, \vec{p}') \frac{1}{|\xi'|} \operatorname{th} \frac{|\xi'|}{2\theta_c} f_1(\vec{p}')\, d\vec{p}', \tag{3}$$

$$f_2(\vec{p}) = \frac{1}{2(2\pi)^3} \int I(\vec{p}, \vec{p}') \frac{1}{|\xi'|} \operatorname{th} \frac{|\xi'|}{2\theta_c} f_2(\vec{p}')\, d\vec{p}' + \tag{4}$$

$$+ \frac{1}{2(2\pi)^3} \int I(\vec{p}, \vec{p}') \left\{ \frac{1}{2\theta_c} \operatorname{ch}^{-2} \frac{|\xi'|}{2\theta_c} + \frac{f_1^2(\vec{p}')}{2\xi'^2} \left(\frac{1}{2\theta_c} \operatorname{ch}^{-2} \frac{|\xi'|}{2\theta_c} - \right.\right.$$

$$\left.\left. - \frac{1}{|\xi'|} \operatorname{th} \frac{|\xi'|}{2\theta_c} \right) \right\} f_1(\vec{p})\, d\vec{p}'.$$

Для получения главного члена асимптотики функции $\Delta(\tau, \vec{p})$ вблизи $\tau = 0$ достаточно ограничиться выписанными двумя уравнениями.

Первое уравнение имеет нетривиальные решения лишь при некоторых значениях параметра θ_c. Физический смысл критической температуры имеет, очевидно, наименьшее положительное значение этого параметра, для которого существует нетривиальное решение.

Для разрешимости второго уравнения необходимо и достаточно, чтобы выполнялось следующее условие ортогональности

$$\int f_1^2(\vec{p}) \left\{ \frac{1}{2\theta_c} \operatorname{ch}^{-2} \frac{|\xi|}{2\theta_c} + \frac{f_1^2(\vec{p})}{2\xi^2} \left(\frac{1}{2\theta_c} \operatorname{ch}^{-2} \frac{|\xi|}{2\theta_c} - \frac{1}{|\xi|} \operatorname{th} \frac{|\xi|}{2\theta_c} \right) \right\} d\vec{p} = 0. \tag{5}$$

Это условие фиксирует нормировочный множитель собственной функции уравнения (3). Полагая

$$f_1(\vec{p}) = Q\,\psi(\vec{p}), \tag{6}$$

где $\psi(\vec{p})$ — определенным образом нормированное решение, получим

$$Q^2 = \frac{1}{\theta_c} \frac{\int \psi^2(\vec{p}) \operatorname{ch}^{-2} \frac{|\xi|}{2\theta_c} d\vec{p}}{\int \frac{\psi^4(\vec{p})}{\xi^2} \left(\frac{1}{|\xi|} \operatorname{th} \frac{|\xi|}{2\theta_c} - \frac{1}{2\theta_c} \operatorname{ch}^{-2} \frac{|\xi|}{2\theta_c} \right) d\vec{p}}, \tag{7}$$

чем и решается вопрос о нахождении главного члена асимптотики:

$$\Delta(\theta, \vec{p}) \cong \left(1 - \frac{\theta}{\theta_c}\right)^{1/2} Q\psi(\vec{p}). \tag{8}$$

Для получения более обозримых формул положим

$$d\vec{p} = d\xi \frac{ds}{|\operatorname{grad} \varepsilon(p)|} \cong d\xi \frac{ds}{v_F} \tag{9}$$

и произведем замену переменной интегрирования $x = \frac{\xi}{2\theta_c}$. Получим:

$$Q^2 = -8\theta_c^2 \frac{\int\limits_0^{\omega/2\theta_c} dx \operatorname{ch}^{-2} x \int \psi^2 \left(\frac{2\theta_c}{\omega} x, \vec{n} \right) \frac{ds}{v_F}}{\int\limits_0^{\omega/2\theta_c} \frac{dx}{x} \left(\frac{\operatorname{th} x}{x} \right)' \int \psi^4 \left(\frac{2\theta_c}{\omega} x, \vec{n} \right) \frac{ds}{v_F}}. \tag{10}$$

Если теперь, следуя [3], предположить, что ядро от ξ не зависит, то и ψ будет функцией только от $\vec{n}$. Далее, отношение $\frac{\omega}{2\theta_c} \gg 1$, а подынтегральное выражение достаточно быстро убывает. Заменяя поэтому верхний предел в интеграле по x бесконечностью, получаем

$$Q^2 = \frac{\int \psi^2(\vec{n}) \frac{ds}{v_F}}{\int \psi^4(\vec{n}) \frac{ds}{v_F}} Q^2_{\text{из}}, \tag{11}$$

где

$$Q^2_{\text{из}} = -8\theta_c^2 \Bigg/ \int\limits_0^\infty \frac{dx}{x}\left(\frac{\operatorname{th} x}{x}\right)', \tag{12}$$

Если теперь наложить условие нормировки в виде

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int \psi^2(\vec{n})\,\frac{ds}{N(0)\,v_F} = 1, \tag{13}$$

причем

$$N(0) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{ds}{v_F}, \tag{14}$$

то придем к неравенству

$$Q^2 = \frac{Q^2_{\text{из}}}{\int \psi^4(\vec{n})\,\frac{ds}{N(0)v_F}} \leqslant Q^2_{\text{из}}, \tag{15}$$

найденному ранее в [3].

Ясно, что этот результат с хорошей точностью будет иметь место и в нашем случае, когда ядро зависит от ξ, так как ввиду малости отношения $\frac{2\theta_c}{\omega}$ по сравнению с единицей, можно заменить в (10) $\psi^2\left(\frac{2\theta_c}{\omega}\;x,\;\vec{n}\right)$ на $\psi^2(0,\vec{n}) \equiv \psi^2(n)$, после чего придем снова к (15). Из неравенства (15) следуют соответствующие неравенства для значений ряда термодинамических величин, в частности для скачка теплоемкости.

Обратимся теперь к рассмотрению уравнения (3) и получим формулу для критической температуры в случае факторизующегося ядра. Соответствующее интегральное уравнение имеет при этом единственное собственное значение (это условие необходимо и достаточно), само интегральное уравнение сводится к трансцендентному, и благодаря возникающим упрощениям удается получить явное выражение для критической температуры.

Итак, положим

$$I(\vec{p},\vec{p}') = g\varphi(\vec{p})\,\varphi(\vec{p}'), \tag{16}$$

где $\varphi(\vec{p})$ отлична от нуля лишь в слое $(-\omega,\omega)$. В этом случае $f_1(\vec{p}) = \varphi(\vec{p})$, θ_c находится из уравнения

$$\frac{g}{2(2\pi)^3}\int \frac{\varphi^2(\vec{p})}{|\xi|}\operatorname{th}\frac{|\xi|}{2\theta_c}\,d\vec{p} = 1. \tag{17}$$

Получая уравнение (17), мы считали, что $\varphi(\vec{p}) \not\equiv 0$, однако не исключено, конечно, что $\varphi(\vec{p})$ может обращаться в нуль в отдельных точках. Физические следствия этого обсудим ниже.

Запишем уравнение (17) в форме

$$\frac{g}{(2\pi)^3}\int\limits_0^\infty d\xi \int \frac{\varphi^2(\xi/\omega,\vec{n})}{\xi}\operatorname{th}\frac{\xi}{2\theta_c}\frac{ds}{v_F} = 1. \tag{18}$$

Интеграл по ξ после элементарных преобразований примет вид

$$\int_0^\infty \frac{\varphi^2(\xi/\omega, \vec{n})}{\xi} \operatorname{th} \frac{\xi}{2\theta_c} d\xi = -\int_0^\infty \ln \frac{2\theta_c}{\omega} x \cdot \operatorname{ch}^{-2} x \, \varphi^2\left(\frac{2\theta_c}{\omega} x, \vec{n}\right) dx -$$

$$-\int_0^\infty \ln x \operatorname{th} \frac{\omega}{2\theta_c} x \frac{d}{dx} \varphi^2(x, \vec{n}) \, dx.$$

Учитывая малость отношения $2\theta_c/\omega$ и наличие под интегралом быстро убывающих функций, имеем приближенно:

$$\int_0^\infty \frac{\varphi^2(\xi/\omega, \vec{n})}{\xi} \operatorname{th} \frac{\xi}{2\theta_c} d\xi \simeq -\ln \frac{2\theta_c}{\omega} - \int_0^\infty \ln x \operatorname{ch}^{-2} x dx -$$

$$-\int_0^\infty \ln x \frac{d}{dx} \varphi^2(x, \vec{n}) \, dx.$$

Подставляя это в (18), деля на $N(0)$ и учитывая (13), получаем

$$\theta_c = \frac{\omega}{2} \exp \left\{ -\frac{1}{gN(0)} - \int_0^\infty \ln x \operatorname{ch}^{-2} x dx - \right.$$

$$\left. -\int_0^\infty \ln x \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \varphi^2(x, \vec{n}) \frac{ds}{N(0) v_F} \right) dx \right\}. \tag{19}$$

Аналогично находим решение уравнения для щели при $\theta = 0$ в случае факторизующего ядра. Исходное уравнение имеет вид

$$\frac{g}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d\xi \int \frac{\varphi^2(\xi/\omega, \vec{n})}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2 \varphi^2(\xi/\omega, \vec{n})}} \frac{ds}{v_F} = 1. \tag{20}$$

Интеграл по ξ после замены переменной и интегрирования по частям, а также пренебрежений, связанных с малостью отношения $\frac{\Delta_0}{\omega}$, приобретает вид

$$\int_0^\infty \frac{\varphi^2(\xi/\omega, \vec{n}) d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2 \varphi^2(\xi/\omega, \vec{n})}} = -\varphi^2(\vec{n}) \ln \frac{\Delta_0}{\omega} \varphi(\vec{n}) -$$

$$-\int_0^\infty \ln 2x \frac{d}{dx} \varphi^2(x, \vec{n}) \, dx.$$

Отсюда с учетом (13) имеем

$$-\frac{1}{gN(0)} = \ln \frac{2\Delta_0}{\omega} + \frac{1}{(2\pi)^3} \int \varphi^2(\vec{n}) \ln \varphi(\vec{n}) \frac{ds}{v_F N(0)} +$$

$$+\int_0^\infty dx \ln x \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int \varphi^2(x, \vec{n}) \frac{ds}{v_F N(0)} \right)$$

и, таким образом,

$$\Delta_0 = 2\omega \exp\left\{-\frac{1}{gN(0)} - \frac{1}{(2\pi)^3}\int \varphi^2(\vec{n}) \ln\varphi(\vec{n}) \frac{ds}{v_F N(0)} - \right.$$

$$\left. - \int_0^\infty dx \ln x \frac{d}{dx}\left(\frac{1}{(2\pi)^3}\int \varphi^2(x, \vec{n}) \frac{ds}{v_F N(0)}\right)\right\}. \tag{21}$$

Соответствие формул (19), (21) с аналогичными формулами в работах [2] и [3] очевидно.

Выражения для критической температуры и щели при абсолютном нуле нечувствительны к обращению $\varphi(n)$ в нуль при некоторых отдельных значениях аргумента. Однако, если мы рассмотрим температурный ход теплоемкости вблизи абсолютного нуля, то убедимся, что ее поведение существенно зависит от этого обстоятельства. Действительно, в этой области температур имеем (см., например, [3]):

$$\sigma_s = \frac{4\sqrt{2\pi}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\theta^{3/2}} \int \Delta^{5/2}(\vec{n})\, e^{-\frac{\Delta(\vec{n})}{\theta}} \frac{ds}{v_F}. \tag{22}$$

Как показано в [3], если $\Delta_{\min} > 0$, теплоемкость имеет экспоненциальный ход. Однако, как было отмечено выше, не исключен случай, когда $\Delta(\vec{n})$ обращается в нуль для некоторого направления. Тогда легко показать, что теплоемкость будет иметь степенной ход, причем показатель степени зависит от того, на каком многообразии точек функция обращается в нуль и каков порядок нуля.

Сделаем еще замечание относительно учета зонной структуры электронного спектра. Уравнение (1) будет справедливо и в этом случае, если считать $\Delta(\theta, \vec{p})$ и $I(\vec{p}, \vec{p}')$ векторами с числом компонент, равным числу зон. В развернутой форме получаем следующую систему интегральных уравнений

$$\Delta_i(\xi, \vec{n}, \theta) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_k \int_0^\omega d\xi' \int I_{ik}(\xi, \vec{n}; \xi', \vec{n}') \times$$

$$\times \frac{\operatorname{th} \dfrac{\sqrt{\xi'^2 + \Delta_k^2(\xi', \vec{n}, \theta)}}{2\theta}}{\sqrt{\xi'^2 + \Delta_k^2(\xi', \vec{n}', \theta)}} \frac{ds_k}{v_F^{(k)}}. \tag{23}$$

Здесь i — номер зоны.

Частный случай такой системы для двух зон при специальных предположениях о функциях I_{ik} рассматривался В. А. Москаленко [4].

Им было найдено выражение для скачка теплоемкости, которое для случая, когда плотность электронных состояний в первой зоне значительно больше, чем во второй, имеет следующий простой вид

$$\frac{\sigma_s - \sigma_n}{\sigma_n} = 1{,}43 \left[1 + \frac{\varrho_2 \tau}{\varrho_1}(2 - \tau_1^{-2} - \tau_1^2) \right] \tag{24}$$

(обозначения см. в [4]). Отсюда нетрудно усмотреть, что

$$\frac{\sigma_s - \sigma_n}{\sigma_n} \leqslant 1{,}43.$$

Таким образом, и в этой модели снова подтверждается универсальное неравенство для скачка теплоемкости.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Н. Боголюбов, В. В. Толмачев, Д. В. Ширков, Новый метод в теории сверхпроводимости, Изд-во АН СССР, М., 1958.

2. Д. Н. Зубарев, Ю. А. Церковников, Научн. докл. высш. шк., физ.-матем. науки, № 2, 1959, 133.

3. В. Л. Покровский, ЖЭТФ, т. 40, 1961, 641.

4. В. А. Москаленко, Физика металлов и металловедение, т. 8, 1959, 503.

Поступила 25.VI 1962 г.
Харьков