

## Лекція 18

### 25. Феномен Купера

Ще за рік до появи роботи БКШ нічого не свідчило на користь більш глибокого проникнення у суть проблеми НП, але все досить швидко змінилося після виходу роботи (навіть – коротенької замітки) молодого у 1956 р. американського вченого Леона Купера, в якій, якщо говорити з позицій сьогодення, була розглянута досить штучна (іншою мовою, уможлядна) задача про поведінку двох електронів, що притягуються один до одного. Причина, або джерело, притягання не називалася та не обговорювалася, проте результат виявився важливим і зводився до того, що, насправді, фермі-система є нестійкою до утворення зв'язаних *електронних пар*.

Звичайно, це ще не НП (про неї Купер взагалі не згадував); знадобився геній Джона Бардіна – на той час вже Нобелівського лауреата, який не тільки зрозумів результат Купера та його наслідки, але й зумів свідомо сформулювати розв'язувану задачу щодо пошуків реального механізму міжелектронного притягання у металах. Ми вже не говоритимемо про те, що двоелектронна задача не є по-справжньому багатоелект-

ронною, як це має місце у реальних металах, але вона зіграла свою винятково важливу роль для загального розвитку не тільки теорії НП, але і фізики взагалі.

Задача Купера є важливою і в ідеологічному плані, і в учбовому, тому ми її викладемо практично без змін.

Отже, нехай існують два вільні електрони, які ми заради максимального спрощення будемо вважати безспіновими. Незбурена і несиметризована внаслідок безспіновості частинок власна хвильова функція пари (віднесена до одиниці об'єму) може бути представлена у стандартному мультиплікативному вигляді:

$$\psi_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2},$$

який легко переписати шляхом введення координат

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2); \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

центру мас та відносного руху, відповідно, які змінюють “зовнішній” вигляд функції:

$$\psi_{\mathbf{K}, \mathbf{k}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

де, як і має бути,  $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$  та  $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/2$  – хвильові вектори спільного та відносного руху, які для пари частинок є квантовими числами, що зберігаються.

Кінетична енергія такої пари тепер теж має бути переписана у спосіб:

$$\hbar^2 \frac{\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{1}{4} \mathbf{K}^2 + \mathbf{k}^2 \right),$$

і ми слідом за Купером покладемо  $\mathbf{K} = 0$ , з чого зразу ж випливає, що  $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$ , а  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$ . Іншою мовою, двохчастинкова квантова задача подібно до класичної задачі двох тіл також зводиться до одночастинкової. Тепер ми можемо розглядати задачу про одну частинку, навіть коли вихідні частинки взаємодіють і зберігається лише вектор  $\mathbf{K}$ . Дійсно, розглянемо гамільтоніан, в якому є взаємодія і який легко перетворити:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2) + V_{\text{int}} \rightarrow \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{m} + V_{\text{int}} \equiv H_0 + V_{\text{int}}.$$

Власні хвильові функції збуреної системи шукатимемо у вигляді:

$$\psi_{\mathbf{K}=0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \equiv \chi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \chi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} = \sum_{\mathbf{q}} \chi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}},$$

що дозволяє поставити питання про власні значення  $\lambda$  повного гамільтоніану, або розв'язки рівняння

$$(H - \lambda)\chi(\mathbf{r}) = 0.$$

Запишемо секулярне рівняння

$$\int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (H_0 + V_{\text{int}} - \lambda) \sum_{\mathbf{q}} \chi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = 0,$$

або

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{m} \chi(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{q}} \chi(\mathbf{q}) \langle e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} | V_{\text{int}} | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \rangle = \lambda \chi(\mathbf{k}).$$

Якщо ввести густину двохелектронних станів  $\rho(\varepsilon)$  на одиницю інтервалу енергії, то останнє рівняння набуває вигляду:

$$(\varepsilon - \lambda)\chi(\varepsilon) + \int d\nu \rho(\nu) \chi(\nu) \langle \varepsilon | V_{\text{int}} | \nu \rangle = 0,$$

де згідно припущенню матричний елемент  $\langle \varepsilon | V_{\text{int}} | \nu \rangle = -V$  для значень  $\varepsilon$  та  $\nu$ , коли вони знаходяться в інтервалі енергій  $\pm \Omega_D$  поблизу енергії Фермі  $\varepsilon_F$ , а зовні нього  $\langle \varepsilon | V_{\text{int}} | \nu \rangle = 0$ .

Тепер треба прийняти до уваги, що ми розв'язуємо не тільки двочастинкову задачу, а і задачу про дві взаємодіючі частинки у металі, де крім цих двох частинок є, як кажуть, море ферміонів, що заповнюють усі стани імпульсного (оберненого) простору з  $|\mathbf{k}| \leq |\mathbf{k}_F|$ . Це, в свою чергу, означає, що хвильова функція  $\chi(\mathbf{r})$  у своєму розкладі може будуватися лише із станів з  $|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_F|$ , причому таких, що знаходяться між  $\mathbf{k}_F$  і деяким  $\mathbf{k}_{\text{max}}$ , що задовольняє умові

$$\frac{1}{2m}(\mathbf{k}_{\text{max}}^2 - \mathbf{k}_F^2) = \varepsilon_{\text{max}} - \varepsilon_F = \Omega_D.$$

Тоді наше секулярне рівняння треба переписати у спосіб:

$$(\varepsilon - \lambda)\chi(\varepsilon) = V \int_{2\varepsilon_F}^{2\varepsilon_{\text{max}}} d\nu \rho(\nu)\chi(\nu),$$

де двійка у межах інтегрування відображає існування двох частинок. Видно, що права частина отриманого рівняння не залежить від  $\varepsilon$ , а отже шукана хвильова функція має форму

$$\chi(\varepsilon) = \frac{C}{\varepsilon - \lambda},$$

в якій  $C$  – деяка стала. Використовуючи знайдену функцію, приходимо до рівняння

$$V \int_{2\varepsilon_F}^{2\varepsilon_{\max}} dv \rho(v) \frac{C}{v - \lambda} = C,$$

або

$$1 - V \int_{2\varepsilon_F}^{2\varepsilon_{\max}} dv \frac{\rho(v)}{v - \lambda} = 0.$$

Оскільки інтервал зміни енергії в інтегралі досить малий,  $2\varepsilon_F \leq v \leq 2\varepsilon_{\max}$ , можна припустити, що густина станів на відрізку  $2\varepsilon_{\max} - 2\varepsilon_F = 2\Omega_D$  залишається постійною,  $\rho(v) \approx \text{const} \equiv \rho_F$ , що дозволяє розв'язати рівняння аналітично:

$$\frac{1}{\rho_F V} = \int_{2\varepsilon_F}^{2\varepsilon_{\max}} \frac{dv}{v - \lambda} = \ln \frac{2\varepsilon_{\max} - \lambda}{2\varepsilon_F - \lambda} = \ln \frac{2\varepsilon_{\max} - 2\varepsilon_F + \Delta}{\Delta} = \ln \frac{2\Omega_D + \Delta}{\Delta},$$

де замість шуканої власної енергії  $\lambda$  ми ввели енергію  $\Delta \equiv 2\varepsilon_F - \lambda$  (тобто  $\lambda = 2\varepsilon_F - \Delta$ ), яку зручно відрахувати від енергії Фермі. При цьому ми шукаємо стан пари з енергією, нижчою за фермівську, тому, зрозуміло, величина зниження  $\Delta > 0$ . Виявляється, що такий стан дійсно виникає, а його енергія знаходиться з таких простих розрахунків:

$$\frac{\Delta}{2\Omega_D + \Delta} = e^{-\frac{1}{\rho_F V}},$$

звідки

$$\Delta - \Delta e^{-\frac{1}{\rho_F V}} = 2\Omega_D e^{-\frac{1}{\rho_F V}};$$

$$\Delta = \frac{2\Omega_D}{e^{\frac{1}{\rho_F V}} - 1} \rightarrow \begin{cases} 2\Omega_D e^{-\frac{1}{\rho_F V}}, & \rho_F V \ll 1 \text{ (слабкий зв'язок);} \\ 2\Omega_D e \rho_F V, & \rho_F V \gg 1 \text{ (сильний зв'язок).} \end{cases}$$

Таким чином, як ми і очікували, енергія взаємодіючої пари виявляється нижче вихідної енергії двох вільних ферміонських частинок. Іншими словами, у випадку притягання енергія металічної системи знижується і стає менше за енергію сукупності вільних електронів. В цілому, система виявляється нестійкою відносно утворення окремих пар. Очевидно, що таких пар може бути багато, але наш розгляд, як і розгляд Купера, це не враховував. Тим не менш, можливість утворення ферміонами у металах стабільних, стійких пар отримала назву *феномена Купера*.

Історична справедливість вимагає також згадати, що ідея про “електронні молекули”, або фактично пари, висувалася М.Шафротом, С. Батлером і Дж. Блаттом у 1954-55 рр., щоб у такий спосіб ввести композитивні бозони і тим самим звести НП до явища надплинності. Проте автори не змогли зробити коректних розрахунків, щоб ця ідея стала по-справжньому обгрунтованою. Вже після роботи Купера, у 60-ті роки минулого століття, дехто робив спроби розвинути ідеї про пари електронів у реальному просторі, але такі уявлення були у протиріччі з моделями металів, де, як відомо, електрони майже вільні, досить далеко рознесені і майже не взаємодіють. Тільки після відкриття високо-температурних надпровідників стало очевидно, що між *локальними парами*, тобто існуючими у  $r$ -просторі, і так званими *куперівськими парами*, що існують у  $k$ -просторі, немає принципової різниці, проте ці питання лежать за межами нашого курсу.

Врахування скінченої кількості фермі-частинок, а отже – принципу Паулі, як раз і було зроблене у роботі БКШ. Лише одне важливе зауваження: отриманий

Купером результат не є наслідком застосування теорії збурень і ніяким чином не може бути представлений розкладом по збуренню  $V$ , навіть для випадку  $\rho_F V \ll 1$  (насправді,  $V/\varepsilon_F \ll 1$ ). Тому таке явище, як НП, не може бути в принципі описано в рамках теорії збурень у будь-якому її скінченному порядку.

## 26. Теорія Бардіна-Купера-Шріффера

### 26.1. Розподіл електронів у основному стані НП.

Будемо слідувати видатній, без перебільшення, роботі БКШ і розглянемо задачу про основний стан НП. Спочатку згадаємо деякі відомості з квантової механіки. Для багатоелектронної функції справедливо все те, що і для одноелектронної. Нехай  $\psi_n(\{\mathbf{r}_j\})$  повна система функцій  $N$  електронів; тоді будь-яка їх хвильова функція може бути представлена розкладом

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n(\{\mathbf{r}_j\}),$$

в якому  $c_n$  – амплітуди, а  $|c_n|^2$  – ймовірності знайти систему у стані  $n$  (це може бути і одне квантове число, і їх набір). Нехай гамільтоніан системи має вигляд

$$H = H_0 + V_{\text{int}},$$

де  $H_0 = H_{\text{kin}}$  – оператор кінетичної енергії вільних електронів. Як завжди, енергія визначається середнім

$$\bar{E} = \int \Psi^* H \Psi \{d\mathbf{r}_j\} = \bar{E}_{\text{kin}} + \bar{V}_{\text{int}};$$

$$\bar{V}_{\text{int}} = \sum_{n,m} \int \{d\mathbf{r}_j\} c_n^* c_m \psi_n^*(\{\mathbf{r}_j\}) V_{\text{int}} \psi_m(\{\mathbf{r}_j\}) = \sum_{n,m} c_n^* c_m V_{nm}.$$

Основний стан нормального металу добре відомий: при  $T = 0$  найнижчий енергії відповідає такий розподіл електронів у  $\mathbf{k}$ -просторі, коли всі стани, що розташовані всередині деякої поверхні, яка зветься фермівською, зайняті, а решта – поза нею – вільні. При цьому енергія системи частинок є виключно кінетичною, а потенціальної просто нема.

Включимо її саме таким чином, як ми щойно обговорювали, вважаючи, що в енергетичному околі  $\pm\Omega_D$  поверхні (енергії) Фермі  $\varepsilon_F$  електрони починають притягуватись один до одного. Із загальних міркувань можна очікувати, що притягання повинно знизити повну енергію (саме її, а не вільну енергію, бо за припущенням  $T = 0$ ) системи. Проаналізуємо структуру взаємодії, яка фактично задається міжелектронним розсіянням, при якому пара електронів з вихідного стану  $\{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2\}$  переходить у кінцевий стан  $\{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2\}$ .

Такий процес може мати місце лише за умови, коли стан  $\{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2\}$  є заповненим, а  $\{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2\}$  – вільним. Відповідне розсіяння здійснюватиметься у повному обсязі, коли будуть задіяні стани як під, так і над поверхнею Фермі, і стає зрозумілим, що вже при  $T = 0$  проста картина з повністю заповненими станами під сферою Фермі та повністю вільними над нею не може відповідати мінімуму енергії. Тим самим у “гру” залучаються стани з більшими енергіями, і природа допускає деякий програш в одному (кінетичній енергії), щоб виграти в іншому (потенціальній енергії) та в цілому.

Тепер мінімуму повної енергії відповідатиме стан з “розмазаним” біля поверхні Фермі розподілом носіїв по станах, в якому певною мірою пустими виявляють-

ся стани під нею і, навпаки, заповненими над нею. При цьому за припущенням БКШ звільнення (заповнення) відбувається попарно, тобто якщо звільняється (заповнюється) стан  $\mathbf{k} \uparrow$ , де стрілка відповідає спіну, то теж саме відбувається і з станом  $-\mathbf{k} \downarrow$ . Справа в тому, і ми це вже обговорювали, при розсіянні виконується закон збереження імпульсу, тобто  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2$ , і чим більше таких переходів, тим більше матричних елементів дадуть внесок у загальне зменшення енергії. А оскільки  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = \mathbf{K}$ , то при будь-якому скінченному векторі  $\mathbf{K}$  кількість можливостей для зміни відповідних вихідних (кінцевих) векторів обмежується (це видно, наприклад, з того, що при великих (паралельних)  $\mathbf{k}_1$  та  $\mathbf{k}_2$  може залишитися лише одне значення для  $\mathbf{q}_1$  та  $\mathbf{q}_2$ ). Тому вибір БКШ  $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$  відповідає не тільки формальній умові нерухомої пари, але й дає максимально можливий зв'язок між її різними станами, коли усі вони з області  $\pm\Omega_D$  навколо енергії Фермі стають актуальними, роблячи свій внесок в енергію.

Повторюючи міркування БКШ, уявимо, що уся сукупність станів пари нумерується індексом  $n$ ; як і в задачі Купера, це можна зробити саме для випадку  $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}$ . Відповідні функції парних станів утворюють повну систему, по якій можна розкласти шукану хвильову функцію основного стану. Що в такому разі означає акт розсіяння пари  $\{\mathbf{k}, -\mathbf{k}\}$  в пару  $\{\mathbf{q}, -\mathbf{q}\}$ ? Це фактично значить, що багатоелектронний стан  $\psi_n$ , в якому парціальний стан  $\{\mathbf{k}, -\mathbf{k}\}$  зайнятий, а такий же стан  $\{\mathbf{q}, -\mathbf{q}\}$  вільний, переходить у інший багатоелект-

ронний стан  $\psi_m$ , де, навпаки, перший стан,  $\{\mathbf{k}, -\mathbf{k}\}$ , вже вільний, а другий,  $\{\mathbf{q}, -\mathbf{q}\}$ , – зайнятий. Як це врахувати у розрахунках, розглядатиметься нижче.

26.2. Коефіцієнти  $uv$ -перетворення. Щоб знайти енергію багатоелектронної системи з притяганням між електронами, в теорії БКШ вводиться деяка функція  $v_{\mathbf{k}} \leq 1$  – ймовірність того, що стан  $\{\mathbf{k}, -\mathbf{k}\}$  є заповненим (при цьому, зрозуміло,  $1 - v_{\mathbf{k}}^2 = u_{\mathbf{k}}^2$  – задає ймовірність його незаповнення). Тоді амплітуда того, що в системі стан  $\{\mathbf{k}, -\mathbf{k}\}$  зайнятий, а відповідно стан  $\{\mathbf{q}, -\mathbf{q}\}$  пустий є

$$c_n = \sqrt{v_{\mathbf{k}}^2(1 - v_{\mathbf{q}}^2)} = v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{q}}.$$

Використовуючи тепер виписану вище формулу квантової механіки, неважко записати модельну енергію такої НП системи наступним чином:

$$E_S = 2 \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k})v_{\mathbf{k}}^2 + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} V_{\mathbf{kq}} v_{\mathbf{q}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{q}},$$

де  $E_S$  – енергія НП колективу частинок, яка відраховується від фермівського рівня так, що

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \equiv \varepsilon^{(free)}(\mathbf{k}) - \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_F^2}{2m} \approx \frac{\hbar \mathbf{p}_F}{m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_F),$$

і враховано, що здійснюються саме переходи  $\{\mathbf{q}, -\mathbf{q}\} \leftrightarrow \{\mathbf{k}, -\mathbf{k}\}$ . Матричний елемент взаємодії задовольняє умові, яку ми вже використовували:

$$V_{\mathbf{kq}} = \begin{cases} -V, & |\varepsilon^{(free)}(\mathbf{k}) - \varepsilon_F| \leq \hbar\Omega_D; \quad |\varepsilon^{(free)}(\mathbf{q}) - \varepsilon_F| \leq \hbar\Omega_D; \\ 0, & |\varepsilon^{(free)}(\mathbf{k}) - \varepsilon_F| \geq \hbar\Omega_D; \quad |\varepsilon^{(free)}(\mathbf{q}) - \varepsilon_F| \geq \hbar\Omega_D. \end{cases}$$

Розглядаючи функцію  $\Psi$  як варіаційну, знайдемо таку ймовірність  $v_{\mathbf{k}}$ , яка мінімізує енергію  $E_S$ , тобто отримаємо рівняння  $\partial E_S / \partial v_{\mathbf{k}}^2 = 0$ :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial v_{\mathbf{k}}^2} \left( 2 \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p}) v_{\mathbf{p}}^2 + \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} V_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \sqrt{v_{\mathbf{p}}^2} \sqrt{v_{\mathbf{q}}^2} \sqrt{1-v_{\mathbf{p}}^2} \sqrt{1-v_{\mathbf{q}}^2} \right) = \\ & = 2\varepsilon(\mathbf{k}) + 2 \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \left( \frac{\sqrt{1-v_{\mathbf{k}}^2}}{2\sqrt{v_{\mathbf{k}}^2}} + \frac{-\sqrt{v_{\mathbf{k}}^2}}{2\sqrt{1-v_{\mathbf{k}}^2}} \right) \sqrt{v_{\mathbf{q}}^2} \sqrt{1-v_{\mathbf{q}}^2} = \\ & = 2\varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{1-2v_{\mathbf{k}}^2}{u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{k}\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} = \\ & = 2\varepsilon(\mathbf{k}) - \frac{1-2v_{\mathbf{k}}^2}{u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}} V \sum_{|\mathbf{k}_F - \Delta\mathbf{k}| \leq |\mathbf{q}| \leq |\mathbf{k}_F + \Delta\mathbf{k}|} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} = 0. \end{aligned}$$

Введемо позначення

$$\Delta_S(T=0) \equiv \Delta_S(0) = V \sum_{|\mathbf{k}_F - \Delta\mathbf{k}| \leq |\mathbf{q}| \leq |\mathbf{k}_F + \Delta\mathbf{k}|} u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \equiv V \sum_{\mathbf{q}} \bullet u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}},$$

де, як і у попередній формулі, сумування йде по шару поблизу  $\varepsilon_F$ . Тоді видно, що  $2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} / (1-2v_{\mathbf{k}}^2) = \Delta_S(0) / \varepsilon(\mathbf{k})$ , звідки отримуємо:

$$\begin{aligned} & \frac{4u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2}{u_{\mathbf{k}}^4 - 2u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^4} = \frac{4u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2}{1 - 4u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2} = \frac{\Delta_S^2(0)}{\varepsilon^2(\mathbf{k})} \rightarrow \\ & \rightarrow 4u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2 \left[ 1 + \frac{\Delta_S^2(0)}{\varepsilon^2(\mathbf{k})} \right] = \frac{\Delta_S^2(0)}{\varepsilon^2(\mathbf{k})}, \end{aligned}$$

де використані тотожності:  $1 - 2v_{\mathbf{k}}^2 = u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2$  та  $(u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2)^2 = u_{\mathbf{k}}^4 + 2u_{\mathbf{k}}^2v_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^4 = 1$ . В результаті цих перетворень приходимо до алгебраїчного рівняння

$$v_{\mathbf{k}}^4 - v_{\mathbf{k}}^2 + \frac{\Delta_S^2(0)}{E_{\mathbf{k}}^2} = 0; \quad v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 \pm \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}} \right] \rightarrow \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}} \right],$$

де  $E_{\mathbf{k}} \equiv \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{k}) + \Delta_S^2(0)}$ , а знак “-” вибраний з фізичних міркувань. Справа в тому, що якщо  $|\mathbf{k}|$  все більше віддаляється від  $|\mathbf{k}_F|$  то при  $\varepsilon(\mathbf{k}) < \varepsilon_F$  коефіцієнт за своїм змістом  $v_{\mathbf{k}}$  має все більше наближатися до одиниці, оскільки при зменшенні  $|\mathbf{k}|$  стани стають глибшими і ймовірність їх заповнення прямує до 1. У границі  $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$  з останньої формули знаходимо:

$$\begin{aligned} v_{\mathbf{k} \rightarrow 0}^2 &= \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\varepsilon^{(free)}(\mathbf{k} \rightarrow 0) - \varepsilon_F}{\sqrt{[\varepsilon^{(free)}(\mathbf{k} \rightarrow 0) - \varepsilon_F]^2 + \Delta_S^2(0)}} \right] = \\ &= \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\varepsilon_F}{\sqrt{\varepsilon_F^2 + \Delta_S^2(0)}} \right) \approx 1 - \frac{\Delta_S^2(0)}{4\varepsilon_F^2} \leq 1. \end{aligned}$$

Відповідно

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}} \right]$$

і  $v_{\mathbf{k} \rightarrow 0}^2 \approx \Delta_S^2(0) / 4\varepsilon_F^2 \rightarrow 0$ .

На рисунку 18.1 показана залежність  $v_{\mathbf{k}}^2$ , з якої дійсно видно, що при  $T = 0$  функція розподілу електронів у НП виявляється розмитою в околі імпульсу (енергії) Фермі, що цілком обумовлено електрон-

к

ЛЕКЦІЯ 18

223

електронною кореляцією. Проте не будь-якою, а такою, що має характер притягання! На це як і в феномені Купера, вказує позитивний знак енергії, яка визначається  $\Delta_s(0)$ .

Ми вже згадували, що функція БКШ є тільки варіаційною, але вона правильно відображає основні риси наслідків кореляції пар електронів у станах  $\mathbf{k}$  і  $-\mathbf{k}$ . Саме це припущення (тобто одночасного і корельованого заповнення або незаповнення відповідних станів) стало ключовим наближенням теорії БКШ. В ній, як ми показали, зниження енергії НП фази обумовлене не тільки вибором пар  $\{\mathbf{k}, -\mathbf{k}\}$ , але й їх партнерів  $\{\mathbf{q}, -\mathbf{q}\}$ .

Причина, чому досить проста модель БКШ виявилась настільки вдалою та успішною, полягає у тому, що у реальних фермі-системах (в першу чергу, металах) кореляції електронів майже цілком пов'язані з принципом Паулі, а не з реальною динамічною взаємодією. Тому при правильному виборі форми фермівської багатоелектронної хвильової функції можна обмежитись врахуванням лише взаємодії між вихідною і кінцевою компонентами пари.

На більш формальній мові наближення БКШ – це врахування динамічної кореляції між спеціально вибраними станами двох електронів при збереженні кореляції останніх, обумовленої принципом Паулі.

Рис. 18.1