UNIVERZITET U NOVOM SADU

PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET - GRUPA FIZIKA

D I P L O M S K I   R A D

Tema:

TERMODINAMIČKA SVOJSTVA SUPERPROVODNIKA

SUBIĆ S. VERA

Iskreno se zahvaljujem profesoru Dr. Bratislavu S. Tošiću
na pomoći i savetima koje mi je pružio pri izradi ovog rada.

SADRŽAJ:

U V O D

Ovaj diplomski rad posvećen je problemu superprovodnosti metala. Problem superprovodnosti aktuelan je već više od pola veka, a naročito veliki značaj dobio je u sadašnje vreme zbog naglog razvoja raketne tehnike.

Superprovodni elementi su sastavni delovi raketnih uredjaja koji regulišu automatsko upravljanje raketom, satelitom, ili vasionskim brodom.

Postoje veliki problemi u praksi i teoriji koji nisu ni do danas uspešno rešeni, jer superprovodnike imamo samo na veoma niskim temperaturama, a u praksi zbog napred pomenutih problema raketne tehnike bilo bi veoma korisno da se konstruiše visoko teperaturski superprovodnik. Teškoća je u tome da niskotemperaturski superprovodnik zahteva veoma glomazne i teške uredjaje za hladjenje i to povećava štetni tovar rakete ili satelita.

Cilj ovog diplomskog rada je da se problem superprovodljivosti osvetli iz jednog drugog aspekta i da se eventualno dodje do nekih zaključaka koji bi pomogli realizaciju superprovodnika sa višom kritičnom temperaturom od dosad poznatih.

I. 1. Uslovi za egzistenciju superfluidnog stanja

Pojavu superfluidnosti otkrio je 1939 Kapica.

Ova pojava se sastoji u tome da tečni $_2He^4$ protiče kroz kapilare bez trenja. Pre nego što predjem na opisivanje elementarnih ekscitacija u tečnom $_2He^4$, najprebih u najopštim crtama razjasnila uslove pod kojima tečnost može da se kreće bez trenja kroz kapilare.

Ako uočimo količinu tečnosti čija je masa M i brzina kretanja $\vec{V}$, onda je kinetička energija ove količine tečnosti ravna:

$$E_0 = \frac{1}{2} M\vec{V}^2 = \frac{\vec{Q}^2}{2M} \ ; \quad \vec{Q} = M\vec{V} \qquad (I.1.1)$$

Ukoliko ova količina tečnosti protiče kroz kapilar ona se tare o zidove suda i deo svoje energije Eo ostavlja zidovima kapilara. Prema tome energija te iste količine tečnosti kada ona prolazi kroz kapilar mora da bude manja od Eo jer deo energije odlazi na trenje. Ako ovu energiju tečnosti označimo sa E, onda je očigledno da u slučaju kad postoji trenje mora biti:

$$E < E_0 \qquad (I.1.2)$$

Činjenica da se tečnost tare o zidove suda i da se usled toga njenim sastavnim delovima (atomima i molekulima) menja energija, opisaćemo na taj način što ćemo predpostaviti da se u tečnosti pojavljuju elementarne ekscitacije tj. kvanti pobudjenja njenih atoma.

Analiziraćemo najprostiju situaciju kada se u tečnosti pojavi samo jedna elementarna ekscitacija sa impulsom $\vec{P}$, i energijom $\mathcal{E}_{\vec{p}}$. Tada je očigledno energija cele količine tečnosti plus energija jedne elementarne ekscitacije ravna:

$$E = \frac{(\vec{Q}+\vec{P})^2}{2M} + \mathcal{E}_{\vec{p}} = \frac{\vec{Q}^2}{2M} + \frac{\vec{Q}\vec{P}}{M} + \frac{\vec{P}^2}{2M} + \mathcal{E}_{\vec{p}} =$$

$$= E_0 + \vec{V}\vec{P} + \mathcal{E}_{\vec{p}} + \frac{\vec{P}^2}{2M}$$

Psledнji član u ovom izrazu ćemo zanemariti jer je masa količine tečnosti M reda veličine 1 gr., dok efektivna masa elementarne ekscitacije može da bude u najboljem slučaju reda veličine mase atoma. Posle ove aproksimacije $\frac{\vec{P}^2}{2M} \sim 0$, dobijamo da je:

$$E = E_0 + \vec{P}\vec{V} + \mathcal{E}_{\vec{p}} \qquad (I.1.3)$$

Pošto u slučaju da postoji trenje mora biti na osnovu (I.1.2) $E - E_0 < 0$ to iz (I.1.3) sledi sledeći uslov za postojanje trenja tečnosti sa zidovima kapilara.

$$\vec{P}\vec{V} + \mathcal{E}_{\vec{p}} < 0 \qquad (I.1.4)$$

Optimalan slučaj za egzistenciju trenja je očigledno onaj gde su vektori $\vec{P}$ i $\vec{V}$ suprotno usmereni. Prema tome ovaj optimalan uslov za postojanje trenja glasi:

$$\mathcal{E}_{\vec{P}} - PV < 0 \quad ; \quad P = |\vec{P}| \quad ; \quad V = |\vec{V}|$$

ili

$$\frac{\mathcal{E}_{\vec{P}}}{P} < V \qquad (I.1.5)$$

Napomenimo da je ovde V kao intenzitet vektora pozitivna veličina i ne može biti ravna nuli jer se inače tečnost nebi kretala.

Pošto relacija (I.1.5) predstavlja uslov da trenje u tečnosti mora da postoji, očigledno je da njoj suprotna relacija

$$\frac{\mathcal{E}_{\vec{P}}}{P} > V$$

predstavlja uslov da se tečnost kreće bez trenja. Obično se ovaj poslednji uslov pravi još stroži pa se kao uslov za kretanje tečnosti bez trenja uzima

$$\min \frac{\mathcal{E}_{\vec{P}}}{P} > 0 \qquad (I.1.6)$$

Na levoj strani se uzima minimum da bi uslov bio nezavisan od impulsa, dok se na desnoj strani zbog proizvoljnosti brzine V (koju u eksperimentalnim uslovima možemo uvek da odredimo da bude takva kakva nam konvenira), može staviti i nula čime je samo odražena činjenica da minimum fazne brzine elementarnih ekscitacija mora biti pozitivna veličina.

Prema tome tečnost će se kretati bez trenja tj. imaćemo fenomen superfluidnosti samo u onim slučajevima kada se usled trenja u tečnosti pojavljuju takve elementarne ekscitacije čiji je minimum fazne brzine pozitivna veličina. Tada grubo govoreći elementarne ekscitacije služe tečnosti kao izolacija od zidova suda.

Pojava superfluidnosti kao što je već rečeno otkrivena je u tečnom ${}_2He^4$ čiji atomi imaju ukupan spin nula. Izotop ${}_2He^3$ čiji je $S=\frac{1}{2}$ nije pokazivao superfluidna svojstva. Ovo je dalo ideju Bogoljubovu da fenomen superfluidnosti objasni bozonskim karakterom atoma ${}_2He^4$.

Polazne ideje Bogoljubova baziraju na dvema fizičkim činjenicama.

a) Boze čestice mogu da se skupljaju u neograničenom broju u jednom kvantnom stanju.

b) Postoji opšta težnja u prirodi da sistem zauzme stanje najniže energije.

Ovde očigledno sledi zaključak da atomi ${}_2He^4$ čija je kinetička energija $\frac{\vec{p}^2}{2m}$ zauzimaju gotovo svi stanje najniže energije a ta najniža energija odgovara impulsu $\vec{P}=0$, činjenica da gotovo svi atomi ${}_2He^4$ imaju impuls nula uslovljena je njihovim bozonskim karakterom.

Ako sa N označimo ukupan broj atoma ${}_2He^4$ u sistemu (taj broj je reda 10^{+24} za 1 gramaatom ${}_2He^4$) a sa No označimo broj atoma koji imaju impuls nula onda je očigledno:

$$N_0 \approx N \tag{I.1.7}$$

Tačnija relacija glasi:

$$N = b_0^+ b_0 + \sum_{\vec{p} \neq 0} b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}} = N_0 + \sum_{\vec{p} \neq 0} b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}}$$
$$\sum_{\vec{p} \neq 0} b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}} \ll b_0^+ b_0 \tag{I.1.8}$$

Ovde je $b_0^+ b_0$ bozonski operator broja atoma $_2He^4$ koji imaju impuls nula, a $b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}}$ broj atoma $_2He^4$ čiji je impuls različit od nule.

Bozoni koji se nalaze u stanju sa impulsom ravnim nuli nazivaju se kondenzantni bozoni a svi oni zajedno obrazuju tzv. Boze-kondenzat.

Bozoni sa impulsom različitim od nule su nadkondenzantni bozoni.

Ako sistem atoma $_2He^4$ shvatimo kao sistem bozona sa dvočestičnim interakcijama onda se hamiltonijan ovakvog sistema u reprezentaciji druge kvantizacije, može napisati u obliku:

$$H = \sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}} + \frac{1}{2N} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{p}_3 \vec{p}_4} W(\vec{p}_1 - \vec{p}_3) b_{\vec{p}_1}^+ b_{\vec{p}_2}^+ b_{\vec{p}_3} b_{\vec{p}_4} \delta_{\vec{p}_1+\vec{p}_2, \vec{p}_3+\vec{p}_4} \tag{I.1.9}$$

gde je m - masa atoma $_2He^4$ i $W(\vec{p}_1 - \vec{p}_3)$ furije lik interakcija izmedju helijumovih atoma.

Pre nego što predjemo na analizu hamiltonijana (I.1.9) mi ćemo izvršiti jednu aproksimaciju koja se zasniva na činjenici da se gotovo svi atomi $_2He^4$ nalaze u kondenzatu.

$$b_0^+ b_0 = N_0 \sim 10^{24}$$

$$b_0 b_0^+ = N_0 + 1 \approx N_0 \sim 10^{24}$$

odavde sledi da je:

$$b_0^+ b_0 = b_0 b_0^+$$

što znači da operatori kondenzantnih bozona komutiraju tj. ponašaju se kao obični brojevi. Ako još predpostavimo da su to realni brojevi onda očigledno važi:

$$b_0^+ b_0 = b_0 b_0^+ = b_0 b_0 = b_0^+ b_0^+ = N_0 \qquad \text{(I.1.10)}$$

Operatori $b_{\vec{p}}^+$ i $b_{\vec{p}}$ nadkondenzantni bozona pošto njih ima malo nisu brojevi već operatori.

U hamiltonijanu (I.1.9) mi ćemo izdvojiti članove sa impulsom $\vec{P}=0$ i članove sa impulsom $\vec{P}\neq 0$, tom prilikom nećemo uzimati u obzir članove gde su tri impulsa različita od nule jer oni daju popravke na spektar tek u drugoj aproksimaciji teorije perturbacije. Prvi član hamiltonijana može se napisati na sledeći način:

$$\sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}} = \sum_{\vec{p}\neq 0} \frac{p^2}{2m} b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}}$$

U drugom članu delove hamiltonijana izdvojićemo po sledećoj šemi:

$\vec{p}_1$	$\vec{p}_2$	$\vec{p}_3$	$\vec{p}_4$
0	0	0	0
$\vec{p}_1 \neq 0$	$\vec{p}_2 \neq 0$	0	0
$\vec{p}_1 \neq 0$	0	$\vec{p}_3 \neq 0$	0
$\vec{p}_1 \neq 0$	0	0	$\vec{p}_4 \neq 0$
0	$\vec{p}_2 \neq 0$	$\vec{p}_3 \neq 0$	0
0	$\vec{p}_2 \neq 0$	0	$\vec{p}_4 \neq 0$
0	0	$\vec{p}_3 \neq 0$	$\vec{p}_4 \neq 0$
$\vec{p}_1 \neq 0$	$\vec{p}_2 \neq 0$	$\vec{p}_3 \neq 0$	$\vec{p}_4 \neq 0$

Pošto u ovoj šemi nisu uzeti članovi sa tri impulsa različita od nule dalja teorija biće tačna samo u prvoj aproksimaciji teorije perturbacije. Osim toga odbacićemo član gde su sva četiri impulsa različita od nule, jer on daje popravke proporcionalne koncentraciji nad kondenzantni bozona a te popravke su male jer je broj nadkondenzantnih bozona kao što znamo mali.

Zadržavajući se na pet prvih vrsta gornje šeme hamiltonijan (I.1.9) možemo napisati u obliku:

$$H = \frac{1}{2}\frac{N_0}{N} W(0) + \sum_{\vec{p}\neq 0}\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{N_0}{N} W(\vec{p})\right] b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}} +$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{\vec{p}=0}\frac{N_0}{N} W(\vec{p})\left(b^+_{\vec{p}} b^+_{-\vec{p}} + b_{-\vec{p}} b_{\vec{p}}\right) +$$

$$+ \frac{N_0}{N} W(0) \sum_{\vec{p}=0} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}}$$

Ako uzmemo u obzir da je:

$$N_0 = N - \sum_{\vec{p}\neq 0} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}}$$

i zanemarimo kvadrate male veličine $\sum_{\vec{p}\neq 0} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}}$, imamo približno:

$$\frac{1}{2}\frac{N_0^2}{N}W(0) = \frac{1}{2}\frac{W(0)}{N}\left(N^2 - 2N\sum_{\vec{p}\neq 0} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}}\right) =$$

$$= \frac{1}{2} N W(0) - W(0)\sum_{\vec{p}\neq 0} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}} \, , \quad i$$

$$\frac{N_0}{N} W(0)\sum_{\vec{p}\neq 0} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}} = \left(1 - \frac{1}{N}\sum_{\vec{p}\neq 0} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}}\right) W(0) \sum_{\vec{p}\neq 0} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}} \approx$$

$$\approx W(0)\sum_{\vec{p}\neq 0} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}}$$

Odavde je jasno, da je konačan oblik hamiltonijana:

$$H = \frac{1}{2} N W(0) + \sum_{\vec{p}\neq 0}{}' \left[\frac{p^2}{2m} + \frac{N_0}{N} W(\vec{p})\right] b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{p}\neq 0}\frac{N_0}{N} W(\vec{p}) \cdot \left(b^+_{\vec{p}} b^+_{-\vec{p}} + b_{-\vec{p}} b_{\vec{p}}\right) \qquad \text{(I.1.11)}$$

Hamiltonijan (I.1.11) dijagonalizovaćemo prelazeći na nove Boze operatore $C_{\vec{p}}$ i $C_{\vec{p}}^+$ pomoću transformacije:

$$b_{\vec{p}} = u_{\vec{p}} C_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} C^+_{-\vec{p}} \qquad \text{(I.1.12)}$$

gde su u i v realne i parne funkcije. Da bi ova proksimacija bila kanonička tj. da bi operatori C bili Boze operatori na funkcije u i v treba zadati uslov kanoničnosti.

Na osnovu (I.1.12) imamo:

$$b_{\vec p} = u_{\vec p} C_{\vec p} + v_{\vec p} C^+_{-\vec p}$$
$$b^+_{\vec p} = u_{\vec p} C^+_{\vec p} + v_{\vec p} C_{-\vec p}$$

tj.

$$1 = [b_{\vec p}, b^+_{\vec p}] = u^2_{\vec p} [C_{\vec p}, C^+_{\vec p}] + v^2_{\vec p} [C^+_{-\vec p}, C_{-\vec p}] + u_{\vec p} v_{\vec p} [C_{\vec p}, C_{-\vec p}] +$$
$$+ u_{\vec p} v_{\vec p} [C^+_{-\vec p}, C^+_{\vec p}]$$

Da bi operatori C bili Boze operatori mora biti:

$$[C_{\vec p}, C^+_{\vec p}] = 1; \; [C^+_{-\vec p}, C_{-\vec p}] = -1; \; [C_{\vec p}, C_{-\vec p}] = [C^+_{-\vec p}, C^+_{\vec p}] = 0$$

pa se poslednja jednačina svodi na:

$$u^2_{\vec p} \overset{-}{\cancel{+}} v^2_{\vec p} = 1 \qquad \text{(I.1.13)}$$

Ako u hamiltonijanu (I.1.11) izvršimo zamenu (I.1.12) dobijamo sledeći izraz:

$$H = \frac{1}{2} N W(0) + \sum_{\vec p \neq 0} \left[\alpha_{\vec p} v^2_{\vec p} + \beta_{\vec p} u_{\vec p} v_{\vec p} \right] +$$
$$+ \sum_{\vec p \neq 0} \left[\alpha_{\vec p} \left(u^2_{\vec p} + v^2_{\vec p} \right) + 2 \beta_{\vec p} u_{\vec p} v_{\vec p} \right] C^+_{\vec p} C_{\vec p} +$$
$$+ \sum_{\vec p \neq 0} \left[\alpha_{\vec p} u_{\vec p} v_{\vec p} + \frac{1}{2} \beta_{\vec p} \left(u^2_{\vec p} + v^2_{\vec p} \right) \right] \left(C^+_{\vec p} C^+_{-\vec p} + C_{-\vec p} C_{\vec p} \right)$$

gde je

$$\alpha_{\vec p} = \frac{P_2}{2m} + \frac{N_0}{N} W(\vec p); \quad \beta_{\vec p} = \frac{N_0}{N} W(\vec p) \qquad \text{(I.1.14)}$$

Da bi se oslobodili nedijagonalnih članova po operatorima C u poslednjem hamiltonijanu moramo na funkciju u i v postaviti sledeći uslov:

$$\alpha_{\vec{p}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} + \frac{1}{2}\beta_{\vec{p}}\left(u_{\vec{p}}^2 + v_{\vec{p}}^2\right) = 0 \tag{I.1.15}$$

Kombinujući (I.1.15) i (I.1.13) dobijamo:

$$\left.\begin{aligned} u_{\vec{p}}^2 &= \frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_{\vec{p}}}{\sqrt{\alpha_p^2 - B_p^2}} + 1\right); \quad v_{\vec{p}}^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_{\vec{p}}}{\sqrt{\alpha_p^2 - B_p^2}} - 1\right) \\ u_p^2 + v_p^2 &= \frac{\alpha_{\vec{p}}}{\sqrt{\alpha_{\vec{p}}^2 - B_{\vec{p}}^2}}; \quad u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} = -\frac{1}{2}\frac{\beta_{\vec{p}}}{\sqrt{\alpha_{\vec{p}}^2 - B_{\vec{p}}^2}} \end{aligned}\right\} \tag{I.1.16}$$

Ako ove rezultate zamenimo u hamiltonijanu izraženom u operatorima C dobijamo:

$$H = \frac{1}{2} N W(0) + \sum_{\vec{p} \neq 0}\left\{\frac{1}{2}\mathcal{E}_{\vec{p}} - \alpha_{\vec{p}}\right\} + \sum_{\vec{p} \neq 0} \mathcal{E}_{\vec{p}} C_{\vec{p}}^{+} C_{\vec{p}} \tag{I.1.17}$$

gde je:

$$\mathcal{E}_{\vec{p}} = \sqrt{\alpha_{\vec{p}}^2 - \beta_{\vec{p}}^2} = \sqrt{\left(\frac{p^2}{2m}\right)^2 + \frac{N_0}{N} W(p) \frac{p^2}{m}} \tag{I.1.18}$$

Poslednji izraz predstavlja energiju elementarnih ekscitacija u tečnom $_2He^4$. Ako umesto $W(\vec{p})$ uzmemo neku srednju vrednost ove veličine koju ćemo označiti sa $\overline{W}$, koja u modelu tvrdih sfera treba da bude pozitivna i proporcionalna dužini rastojanja onda se zakon disperzije za elementarnu ekscitaciju u tečnom ${}_2He^4$ može napisati kao:

$$\mathcal{E}_{\vec{P}} = P\sqrt{\frac{P^2}{4m^2} + \frac{N_0}{mN}\overline{W}} \tag{I.1.19}$$

Odavde je fazna brzina:

$$\frac{\mathcal{E}_{\vec{P}}}{P} = \sqrt{\frac{P^2}{4m^2} + \frac{N_0}{N}\frac{\overline{W}}{m}} \tag{I.1.20}$$

Ova funkcija očigledno ima minimum za P=0 i vrednost tog minimuma je:

$$\min \frac{\mathcal{E}_P}{P} = \sqrt{\frac{N_0}{N}\frac{\overline{W}}{m}} = C_{He^4} \tag{I.1.21}$$

Kao što vidimo minimum fazne brzine elementarnih ekscitacija u tečnom ${}_2He^4$ je pozitivna veličina $\sqrt{\frac{N_0}{N}\frac{\overline{W}}{m}}$, koja predstavlja brzinu zvuka u tečnom ${}_2He^4$.

Eksperimentalno je nadjeno da C_{He^4} iznosi $240\frac{m}{sec}$.

Na osnovu (I.1.20) vidimo da je minimum fazne brzine u tečnom ${}_2He^4$ pozitivna veličina pa ovaj rezultat predstavlja obajašnjenje činjenice da je tečni ${}_2He^4$ superfluidan.

Na kraju treba napomenuti da u oblasti malih impulsa u izrazu (I.1.19) možemo zanemariti $\frac{P^2}{4m^2}$ u odnosu na $\frac{N_0}{Nm}\overline{W}$, pa je

$$\mathcal{E}_{\vec{P}} \cong P\sqrt{\frac{N_0}{N}\frac{\overline{W}}{m}} \tag{I.1.22}$$

tj. elementarne ekscitacije imaju zvučni zakon disperzije.

U slučaju velikih impulsa $\frac{N_0}{Nm}\overline{W}$ je daleko manje od $\frac{p^2}{4m^2}$, pa dobijamo:

$$\mathcal{E}_p \cong \frac{p^2}{2m} \qquad \text{(I.1.23)}$$

tj. elementarne ekscitacije imaju kvadratni zakon disperzije. U odnosu na polufenomenološku teoriju Landaua vidimo da teorija Bogoljubova daje u oblasti malih impulsa da su elementarne ekscitacije fononi (zvučni zakon disperzije (I.1.22), dok u oblasti velikih impulsa elementarne ekscitacije imaju kvadratni zakon disperzije i odgovaraju tzv.Rotonima iz teorije Landaua.

I. 2. Superprovodljivost kao superfluidnost naelektrisanih čestica

Pojavu superprovodljivosti eksperimentalno je otkrio 1913 godine holandski fizičar Kamerling Ones. Ova pojava sastajala se u tome da su neki provodnici gubili otpor na temperaturama nešto višim od apsolutne nule. Treba naglasiti da se ovde nije radilo o nekom znatnom smanjenju otpora već o totalnom odsustvu otpora.

Sama pojava je svakako paradoksalna jer se na osnovu klasičnog zakona o promeni otpora sa temperaturom:

$$R = R_0(1+\alpha t) \qquad (I.2.1)$$

$$\alpha = \frac{1}{273}\ ; \quad t = T - 273$$

moglo očekivati da otpor potpuno izčezava na apsolutnoj nuli, a ne na nekoj višoj temperaturi.

U granicama klasične fizike ova pojava se nije mogla objasniti. Sa razvojem kvantne mehanike interes za objašnjenje ovog fenomena je naglo porastao ali se dosta dugo čekalo na njegovo konačno objašnjenje.

Otkrivanje pojave superfluidnosti u tečnom $_2He^4$ predstavljalo je prekretnicu u rešavanju problema superprovodljivosti. Počelo se sa teorijama koje su težile da problem superprovodljivosti svedu na problem superfluidnosti naelektrisanih čestica. Ovo je u osnovi bilo pravilno jer odsustvo otpora znači da se fluid slobodnih elektrona kreće kroz kristal (provodnik) bez trenja ili preciznije bez sudara sa jonima rešetke.

Ova ideja i jeste osnova savremene teorije superprovodljivosti u metalima. Mada je ovakav prilaz doveo istraživače do rešenja suštine problema superprovodljivosti ipak svi prateći problemi nisu bili ni iz daleka rešeni.

Ako se pravi neka analogija izmedju slobodnih elektrona i tečnog $_2He^4$, onda ako se ograničimo na pojavu kretanja bez trenja dolazimo do novog paradoksa. Kao što znamo superfluidnost tečnog $_2He^4$ je posledica činjenice da su atomi $_2He^4$ boze čestice. Sastavni elementi elektronskog gasa (elektroni) su fermi čestice pa prema tome njima ne dostaje ona bitna osobina koja omogućuje kretanje bez trenja, a to je mogućnost njihovog kondenzovanja na najnižem energetskom nivou.

Ovaj problem je rešavan u dve etape. Predpostavilo se da u elektronskom gasu pod izvesnim uslovima dolazi do sparivanja parnog broja elektrona sa suprotnim spinovima tj. do obrazovanja elektronskih kompleksa sa nultim spinom i da ovi kompleksi, pošto imaju bozonska svojstva mogu da se kondenzuju odakle je dalje sledilo da je superprovodljivost ustvari superfluidnost ovih elektronskih kompleksa sa suprotnim spinom.

Najverovatnije je bilo da su ovi kompleksi parovi elektrona sa suprotno usmerenim spinovima ali dugo nije moglo da se razjasni koji je to mehanizam koji dovodi do sparivanja elektrona i kakva sila drži na okupu par elektrona, jer poznato je da izmedju elektrona kao istoimenih naelektrisanja deluju odbojne Kulonove sile koje očigledno ne dozvoljavaju obrazovanje para.

Ovaj problem je rešio Frelih koji je pokazao da interakcija izmedju elektrona i fonona rešetke (sudari elektrona sa jonima) može pod izvesnim uslovima da izmedju elektrona izazove privlačne sile koje su veće od odbojnih Kulonovih sila. Ovim je bio rešen suštinski najveći problem - problem sparivanja elektrona u parove sa nultim spinom. Treba svakako podvući genialnost ove Frelihove ideje jer kao što smo već rekli elektron - fonon inerakcija je uzrok postojanja otpora.

On je medjutim pokazao da na niskim temperaturama ova ista interakcija deluje u obrnutom smeru tj. stvara uslove da se sistem elektrona kreće bez otpora. Na ovo ga je verovatno navela činjenica da su lošiji provodnici (jaka elektron - fonon interakcija) bili bolji superprovodnici nego provodnici sa jako malim otporom (npr. Cu Ag).

Sadašnja stanja teorije superprovodljivosti je sledeće:

a) Superprovodljivost je posledica obrazovanja elektronskih parova sa nultim spinom (kuperovski parovi). Ovi parovi imajući bozonsko svojstvo obrazuju kondenzat a elementarne ekscitacije u ovakvom sistemu kao i kod tečnog $_2He^4$ imaju pozitivni minimum fazne brzine, pa prema tome mogu da se kreću bez trenja.

b) Sam nastanak struje bez otpora može se predstaviti na sledeći način:

U kristalu se obrazuju kuperovski parovi čija je energija veze posledica elektron - fonon interakcije. Pri uključenju spoljašnjeg električnog polja par se razgradjuje i raspada na dva elektrona ali sa drugačijim zakonom disperzije od onoga koji imaju elektroni koji nisu nastali razgradjivanjem para. Običan slobodni elektron ima kinetičku energiju $\frac{p^2}{2m}$ i za ovaj zakon disperzije minimum fazne brzine je 0 pa on ne može da se kreće bez trenja. Elektron koji je nastao razgradjivanjem para pored kinetičke energije ima još i dodatak energije a to je otprilike polovina energije veze u paru. Ovakav zakon disperzije konstanta plus kinetička energija daje pozitivan minimum fazne brzine pa prema tome elektroni nastali razgradjivanjem para mogu da se kreću bez trenja, tj. oni dovode do pojave superprovodljivosti.

c) Fononi koji interagujući sa elektronima dovode do stvaranja parova sa druge strane kvare uslove za egzistenciju superprovodnog stanja. Pri povišenju temperature broj fonona u sistemu raste i ova toplotna energija smanjuje energiju veze para, tako da ova na nekoj kritičnoj temperaturi postaje ravna nuli. Čim je to tako očigledno je da ~~je~~ elektron gubi konstantni dodatak energije, minimum fazne brzine postaje ravan nuli i pojava superprovodljivosti izčezava.

Eksperimentalni podaci pokazuju da su za metale kritične temperature (one temperature na kojima energija veze para postaje ravna nuli) od 1^{o} - $10^{o}K$. Za legure i intermetalna jedinjenja ove kritične temperature su nešto više i idu do $20^{o}K$.

I. 3. Frelihova analiza hamiltonijana elektron - fonon interakcije

Hamiltonijan sistema elektrona koji se kreću u kristalnom polju može se napisati u sledećem obliku:

$$H=\sum_{\vec{K}} E_{\vec{K}}\, a^+_{\vec{K}} a_{\vec{K}} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\\(\vec{n}\neq\vec{m})}} V_{\vec{n}\vec{m}}\, a^+_{\vec{n}} a_{\vec{m}} \qquad (I.\ 3.\ 1)$$

U ovoj formuli upotrebljene su sledeće oznake:

$E_{\vec{K}} = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ - kinetička energija elektrona

$a^+_{\vec{K}}$ i $a_{\vec{K}}$ - kreacioni i anihilacioni elektronski operatori sa impulsom $\vec{K}$.

$V_{\vec{n}\vec{m}}$ - matrični elementi operatora kristalnog polja (to je potencijal koji stvaraju svi joni rešetke i svi elektroni osim jednog čije se kretanje razmatra).

$a^+_{\vec{m}}$ i $a_{\vec{m}}$ - kreiraju odnosno anihiliraju elektrone u čvorovima rešetke $\vec{n}$ i $\vec{m}$.

Hamiltonijan (I. 3. 1) napisan je pod predpostavkom da joni kristalne rešetke miruju u svojim ravnotežnim položajima. Ukoliko je temperatura različita od nule joni počinju da osciluju oko svojih ravnotežnih položaja i ovu činjenicu matematički možemo izraziti sledećim prelazom:

$$\vec{n} \to \vec{n} + \vec{u}_{\vec{n}}\ ; \quad \vec{m} \to \vec{m} + \vec{u}_{\vec{m}}$$

gde su $\vec{u}_{\vec{n}}$ i $\vec{u}_{\vec{m}}$ pomeraji jona iz ravnotežnog položaja i očigledno predstavljaju funkcije kordinata i vremena.

Pošto je operator kristalnog polja funkcija samo razlike vektora $\vec{n}$ i $\vec{m}$ možemo dalje pisati.

$$V_{\vec{n}\vec{m}} \equiv V(\vec{n}-\vec{m}) \longrightarrow V\left[(\vec{n}-\vec{m})+(\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{u}_{\vec{m}})\right]$$

Ako su temperature niske onda su pomeraji $\vec{u}_{\vec{n}}$ $\vec{u}_{\vec{m}}$ mali pa se funkcija V može razviti u red, pri čemu ćemo se zadržati na linearnim članovima po pomerajima.

$$V\left[(\vec{n}-\vec{m})+(\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{u}_{\vec{m}})\right] \cong V(\vec{n}-\vec{m})+(\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{u}_{\vec{m}})\nabla_{\vec{n}-\vec{m}}V(\vec{n}-\vec{m}) \qquad \text{(I. 3. 2)}$$

Ako (I. 3. 2) zamenimo u hamiltonijan (I. 3. 1) on dobija dopunski član koji karakteriše interakciju elektrona sa pomerajima rešetke ili kraće elektron - fonon interakciju. Znači formulu (I. 3. 1) možemo napisati u obliku:

$$\tilde{H} = H + H_{int} \qquad \text{(I. 3. 3)}$$

gde je

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} a^{+}_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}}{}' V(\vec{n}-\vec{m}) a^{+}_{\vec{n}} a_{\vec{m}} \qquad \text{(I. 3. 4)}$$

$$H_{int} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} \nabla_{\vec{n}-\vec{m}} V(\vec{n}-\vec{m}) a^{+}_{\vec{n}} a_{\vec{m}} (\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{u}_{\vec{m}}) \qquad \text{(I. 3. 5)}$$

Izraz (I. 3. 5) je hamiltonijan elektron - fonon interakcije.

Pre nego što predjemo na analizu hamiltonijana elektron - fonon interakcije ispitaćemo hamiltonijan H, koji je čisto elektronski.

Ako u (I. 3. 4) izvršimo Furije - transformacije operatora $a^+_{\vec{m}}$ i $a_{\vec{m}}$, tj. uzmemo:

$$a^+_{\vec{m}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} a^+_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}'\vec{n}}$$

$$a_{\vec{m}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}}$$; N-broj atoma u kristalu

onda imamo:

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}'\vec{k}} a^+_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} \sum_{\vec{n}\vec{m}} V(\vec{n}-\vec{m}) e^{i\vec{k}\vec{m} - i\vec{k}'\vec{n}}$$

Ako u sumi po $\vec{n}$ i $\vec{m}$ uvedemo zamenu $\vec{n}-\vec{m}=\vec{\ell}$ ona postaje:

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} V(\vec{n}-\vec{m}) e^{i\vec{k}\vec{m} - i\vec{k}'\vec{n}} = \sum_{\vec{\ell}\vec{m}} V(\vec{\ell}) e^{-i\vec{k}'\vec{\ell} + i\vec{m}(\vec{k}-\vec{k}')} =$$

$$= \sum_{\vec{\ell}} V(\vec{\ell}) e^{-i\vec{k}'\vec{\ell}} \sum_{\vec{m}} e^{i\vec{m}(\vec{k}-\vec{k}')}$$

Pošto je:

$$\sum_{\vec{m}} e^{i\vec{m}(\vec{k}-\vec{k}')} = N \delta_{\vec{k}',\vec{k}}$$

dobijamo konačno:

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} V(\vec{n}-\vec{m}) e^{i\vec{k}\vec{m}-i\vec{k}'\vec{n}} = N\sum_{\vec{\ell}} V(\vec{\ell}) e^{-i\vec{k}\vec{\ell}} \delta_{\vec{k}';\vec{k}}$$

Ako uvedemo oznaku:

$$\sum_{\vec{\ell}} V(\vec{\ell}) e^{\pm i\vec{k}\vec{\ell}} = V_{\vec{k}}$$

elektronski hamiltonijan postaje:

$$H=\sum_{\vec{k}} \left(E_{\vec{k}} + \frac{1}{2} V_{\vec{k}}\right) a^{+}_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \qquad (I.\ 3.\ 6)$$

Kao što vidimo usled ejdstva kristalnog polja slobodni elektroni menjaju svoj zakon disperzije tj. njihova kinetička energija $E_{\vec{k}}$ dobija popravku $\frac{1}{2}$ $V_{\vec{k}}$.

Ako kristal ima prostu kubnu strukturu i ako se ograničimo aproksimacijom najbližih suseda onda možemo pisati:

$$V_{\vec{k}} = 2V(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

gde je V interakcija izmedju najbližih suseda i a - konstanta rešetke. Za male talasne vektore možemo upotrebiti aproksimaciju:

$$\cos k_\alpha a \cong 1 - \frac{1}{2} k_\alpha^2 a^2$$

$$\alpha = x, y, z$$

pa je:

$$V_{\vec{k}} = 6V - Va^2 k^2$$

Prema tome, zakon disperzije za elektrone u kristalnom polju je:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = \frac{\partial H}{\partial a^{+}_{\vec{k}} a_{\vec{k}}} = E_{\vec{k}} + \frac{1}{2} V_{\vec{k}} \cong 3V + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{2} V a^2 k^2 =$$

$$= 3V + \left(\frac{1}{2m} - \frac{1}{2}\frac{Va^2}{\hbar^2}\right)\hbar^2 k^2 =$$

$$= 3V + \frac{\hbar^2 k^2}{\dfrac{1}{\dfrac{1}{2m} + \dfrac{Va^2}{2\hbar^2}}} = 3V + \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_{eff}}$$

gde je:

znači:

$$m_{eff} = \frac{1}{\dfrac{1}{m} + \dfrac{Va^2}{\hbar^2}} = \frac{m\hbar^2}{\hbar^2 + Va^2 m} = \frac{m}{1 + \dfrac{Va^2 m}{\hbar^2}}$$

$$m_{eff} = m\left(1 + \frac{Va^2 m}{\hbar^2}\right)^{-1} \qquad \text{(I. 3. 7)}$$

Kao što vidimo, u kristalnom polju energija elektrona ima oblik:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = 3V + \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_{eff}}$$

$$m_{eff} = m\left(1 + \frac{Va^2 m}{\hbar^2}\right)^{-1} \qquad \text{(I. 3. 8)}$$

Faktor 3V menja hemijski potencijal elektrona i kao što vidimo promenjena je i masa elektrona.

Prema tome kristalno polje menja hemijski potencijal elektrona i umesto njegove stvarne mase m daje mu tzv. efektivnu masu m_{eff}, koja je definisana formulom (I. 3. 7).

Hamiltonijan elektron-fonon interakcije zgodnije analizirati u impulsnom prostoru, pa ćemo zbog toga u izrazu (I. 3. 5) izvršiti sledeće furije transformacije:

$$V(\vec{n}-\vec{m})=\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_1(\vec{n}-\vec{m})}$$

$$a^+_{\vec{n}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}_2} a^+_{\vec{k}_2} e^{-i\vec{k}_2\vec{n}}$$

$$a_{\vec{m}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{m}}$$

dok ćemo pomeraje $\vec{u}_{\vec{n}}$ i $\vec{u}_{\vec{m}}$ razložiti po fononskim operatorima $b_{\vec{q}}$ i $b^+_{\vec{q}}$ na standardan način:

$$\vec{u}_{\vec{n}}=\sum_{\vec{q}j}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{q}j}}}\,\vec{l}_{\vec{q}j}\left(b_{-\vec{q}j}+b^+_{\vec{q}j}\right)e^{-i\vec{q}\vec{m}}$$

$$\vec{u}_{\vec{m}}=\sum_{\vec{q}j}\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{q}j}}}\,l_{\vec{q}j}\left(b_{-\vec{q}j}+b^+_{\vec{q}j}\right)e^{-i\vec{q}\vec{m}} \qquad \text{(I. 3. 9)}$$

U formulama (I. 3. 9) M je masa jona, indeks j označava tri polarizacije fonona (jednu longitudinalnu i dve transverzalne), vektori $\vec{l}_{\vec{q}j}$ su polarizacioni vektori i

$$\omega_{\vec{q}j}=C_j|\vec{q}|\equiv C_j q \qquad \text{(I. 3. 10)}$$

su frekvence za odgovarajuće polarizacije fonona (C_j su brzine prostiranja zvuka za longitudinalnu i dve transverzalne polarizacije).

Pošto na niskim temperaturama elektron interaguje isključivo sa longitudinalnim fononima mi ćemo u izrazima (I. 3. 9) izostaviti sumu po j i zadržati samo longitudinalnu komponentu. Oznake za ovu komponentu biće:

$$\omega_{\vec{q}j} \to \omega_{\vec{q}} = Cq \; ; \; \vec{l}_{\vec{q}j} \to \vec{l} \parallel \vec{q}$$

$$b_{\vec{q}j}, \; b^{+}_{\vec{q}j} \to b_{\vec{q}}^{+}, \; b_{\vec{q}}$$

ako još uzmemo u obzir da je

$$\nabla_{\vec{n}-\vec{m}} V(\vec{n}-\vec{m}) = \nabla_{\vec{n}-\vec{m}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_1(\vec{n}-\vec{m})} =$$

$$= \frac{i}{N} \sum_{\vec{k}_1} \vec{k}_1 V_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_1(\vec{n}-\vec{m})}$$

možemo konačno pisati

$$H_{int} = \frac{i}{2N^{5/2}} \sum_{\vec{k}\vec{q}\vec{k}_1\vec{k}_2} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}}}} \; \vec{k}_1 \vec{l}_{\vec{q}} V_{\vec{k}_1} a^{+}_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}} \left(b_{\vec{q}} + b^{+}_{\vec{q}} \right) \times$$

$$\times \sum_{\vec{n}\vec{m}} \left\{ e^{i\vec{n}(\vec{k}_1-\vec{k}_2-\vec{q})+i\vec{m}(-\vec{k}_1+\vec{k})} - e^{i\vec{n}(\vec{k}_1-\vec{k}_2)+im(-\vec{k}_1+\vec{k}-\vec{q})} \right\}$$

(I. 3. 11)

Pošto je:

$$\sum_{\substack{\vec{n}\vec{m} \\ i}} e^{i\vec{m}(\vec{k}_1-\vec{k}_2-\vec{q})+im(-\vec{k}_1+\vec{k})} = N^2 \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_1-\vec{q}} \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}} = N^2 \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}} \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}-\vec{q}}$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} e^{i\vec{n}(\vec{k}_1-\vec{k}_2)+i\vec{m}(-\vec{k}_1+\vec{k}-\vec{q})} = N^2 \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}-\vec{q}} = N^2 \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}-\vec{q}} \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}-\vec{q}}$$

posle zamene u (I. 3. 11) dobijamo:

$$H_{int} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}\vec{q}}{}' F(\vec{k},\vec{q})\, a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}} \left(b_{-\vec{q}} + b^{+}_{\vec{q}}\right) \qquad \text{(I. 3. 12)}$$

gde je:

$$F(\vec{k},\vec{q}) = \frac{1}{2}\, i \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}}}} \left[\vec{k}\,\vec{l}_{\vec{q}}\, V_{\vec{k}} - (\vec{k}-\vec{q})\,\vec{l}_{\vec{q}}\, V_{\vec{k}-\vec{q}}\right] \qquad \text{(I. 3. 13)}$$

Kompletan hamiltonijan sistema elektrona i fonona zajedno sa njihovom interakcijom možemo napisati u obliku:

$$H_{TOT} = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}}\, a^{+}_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}}{}' \hbar\omega_{\vec{k}}\, b^{+}_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}\vec{q}}{}' F(\vec{k},\vec{q})\, a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}} \left(b_{-\vec{q}} + b^{+}_{\vec{q}}\right) \qquad \text{(I. 3. 14)}$$

Drugi član u ovom izrazu je hamiltonijan fononskog polja bez uračunavanja nultih oscilacija. $\varepsilon_{\vec{k}}$ je redukovana energija elektrona usled prisustva kristalnog polja i ima oblik:

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_{eff}}\,; \quad m_{eff} = m\left(1 + \frac{V a^2 m}{\hbar^2}\right)^{-1} \qquad \text{(I. 3. 15)}$$

Kao što je rečeno u drugom paragrafu Frelihova ideja je bila da elektron - fonon interakcija dovodi do sparivanja elektrona tj. da ona izaziva neku efektivnu privlačnu elektron - elektron interakciju. Ovde ćemo izložiti Frelihov postupak kojim je dokazao da elektron - fonon interakcija stvara privlačnu elektron - elektron interakciju.

Pošto unitarna transformacija ne menja svojstvene vrednosti hamiltonijana, mi možemo izvršiti unitarnu transformaciju izraza (I. 3. 14).Unitarni operator odabraćemo u obliku:

$$\hat{U} = e^{-iS} \tag{I. 3. 16}$$

gde je S neki realan i mali operator. Ovo "mali" znači da njegove svojstvene vrednosti treba da budu mnogo manje od kinetičke energije elektrona a takodje i od energije fonona $\hbar\omega_{\vec{k}}$

Znači, hamiltonijan H_{TOT} i $H_{eq} = \hat{U} H_{TOT} \hat{U}^{-1}$ sa fizičke tačke gledišta daju iste rezultate. Ako uzmemo u obzir činjenicu da je S mali operator možemo razviti u red eksponent u (I. 3. 16) i zadržati se na članovima kvadratnim po S. Tada dobijamo:

$$H_{eq} = \hat{U} H_{TOT} \hat{U}^{-1} = e^{-iS} H_{TOT} e^{iS} \cong \left(1 - iS - \frac{1}{2} S^2\right) H_{TOT} \left(1 + iS - \frac{1}{2} S^2\right) \cong$$

$$\cong H_{TOT} + i H_{TOT} S - i S H_{TOT} + S H_{TOT} S - \frac{S^2 H_{TOT}}{2} - \frac{H_{TOT} S^2}{2}$$

Pošto je:

$$i H_{TOT} S - i S H_{TOT} = -i \left[S, H_{TOT}\right]$$ i

$$S H_{TOT} S - \frac{1}{2} S^2 H_{TOT} - \frac{1}{2} H_{TOT} S^2 = -\frac{1}{2} \left[S, \left[S, H_{TOT}\right]\right]$$

možemo konačno pisati

$$H_{eq} = H_{TOT} - i \left[S, H_{TOT}\right] - \frac{1}{2} \left[S, \left[S, H_{TOT}\right]\right] \tag{I. 3. 17}$$

Operator S odabraćemo u sledećem obliku:

$$S=\sum_{\vec{k}'\vec{q}'} X(\vec{k}',\vec{q}')\, a^{+}_{\vec{k}'-\vec{q}'}\, a_{\vec{k}'}\left(b_{-\vec{q}'}+b^{+}_{\vec{q}'}\right)$$

(I. 3. 18)

gde je $X(\vec{k}',\vec{q}')$ proizvoljna funkcija koju ćemo odrediti tako da eliminišemo hamiltonijan elektron - fonon interakcije iz izlaza (I. 3. 17).

Komutatori koji figurišu u izrazu (I. 3. 17) imaju sledeći oblik:

$$[S,H_{TOT}]=\sum_{\vec{k}\vec{q}}\Big\{X(\vec{k},\vec{q})\left(\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right) a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}}\, b_{-\vec{q}}+$$

$$+X(\vec{k},\vec{q})\left(\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right) a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}}\, b^{+}_{\vec{q}}\Big\}$$

(I. 3. 19)

$$[S,[S,H_{TOT}]]=\sum_{\vec{k}\vec{q}\vec{k}'} X(\vec{k},\vec{q})\, X(\vec{k}',-\vec{q})\left[\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right]\times$$

$$\times\, a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}}\, a^{+}_{\vec{k}'+\vec{q}}\, a_{\vec{k}'}-\sum_{\vec{k},\vec{q}\vec{k}'} X(\vec{k},\vec{q})\, X(\vec{k}',-\vec{q})\,\times$$

$$\times\left[\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right] a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}}\, a^{+}_{\vec{k}'+\vec{q}}\, a_{\vec{k}'}$$

(I. 3. 20)

Izraz (I. 3. 20) nije napisan tačno već su u njemu zanemareni članovi koji su proporcionalni proizvodima elektronskog i fononskog okupacionog broja tj. članovi tipa $a^+a\,C^+C$.

Zamenjujući (I. 3. 19) i (I. 3. 20) u (I. 3. 17) dobijamo konačan izraz za ekvivalentni hamiltonijan u obliku:

$$H_{eq}=\sum_{\vec{k}}{}' \mathcal{E}_{\vec{k}}\, a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}}{}' \hbar\omega_{\vec{k}}\, b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}\vec{q}} F(\vec{k},\vec{q})\, a^+_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}}\, b_{-\vec{q}}$$

$$+\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}\vec{q}}{}' F(\vec{k},\vec{q})\, a^+_{\vec{k}-\vec{q}}\, b^+_{\vec{q}} - i\sum_{\vec{k}\vec{q}} X(\vec{k}\vec{q})\left(\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\cdot$$

$$\cdot a^+_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}}\, b_{-\vec{q}} \; +$$

$$+ i\sum_{\vec{k}\vec{q}}{}' X(\vec{k},\vec{q})\left(\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}},-\hbar\omega_{\vec{q}}\right) a^+_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}}\, b^+_{\vec{q}} \; +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}}{}' X(\vec{k},\vec{q})\, X(\vec{k}',-\vec{q})\, a^+_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}}\, a_{\vec{k}'+\vec{q}},\, a_{\vec{k}'}\,\cdot$$

$$\cdot\left(\mathcal{E}_{\vec{k}'}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right) -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}}{}' X(\vec{k},\vec{q})\, X(\vec{k}',-\vec{q})\, a^+_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}}\, a_{\vec{k}'+\vec{q}}\, a_{\vec{k}'}\times$$

$$\times\left(\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right)$$

Ako se ograničimo na slučaj apsolutne nule, tada od celog dobijenog izraza mogu da proizvedu različit od nule efekat samo članovi koji u sebi sa desne strane sadrže kreacioni fononski operator. Drugim rečima ako se ograničimo procesima spontane emisije fonona umesto H_{eq} koristimo operator:

$h = H_{eq}|0_{\Phi}\rangle$ gde je $|0_{\Phi}\rangle$ - fononski vakuum

$$H_{eq}|0_{\Phi}\rangle \equiv h = \sum_{\vec{k}} \mathcal{E}_{\vec{k}} a^{+}_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}\vec{q}}{}' F(\vec{k}\vec{q})\, a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}} a_{\vec{k}} +$$

$$+ i \sum_{\vec{k}\vec{q}} X(\vec{k},\vec{q}) \left(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}\right) a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}} a_{\vec{k}} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}}{}' X(\vec{k},\vec{q}) X(\vec{k}',-\vec{q})\, a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}} a_{\vec{k}} a_{\vec{k}'+\vec{q}} a_{\vec{k}'} \times$$

$$\times \left(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}\right) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}\vec{k}'q}{}' X(\vec{k},\vec{q}) X(\vec{k}',-\vec{q}) \cdot$$

$$a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}} \overset{a_{\vec{k}}}{\cancel{a_{\vec{k}'+q}}}\, a_{\vec{k}'} \times$$

$$\times \left(\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_{\vec{k}-q} + \hbar\omega_{q}\right) \qquad \text{(I. 3. 21)}$$

Funkciju od $X(\vec{k},\vec{q})$ odredićemo tako da eliminišemo onaj deo hamiltonijana h koji je došao usled elektron - fonon interakcije. To znači da ćemo odrediti $X(\vec{k},\vec{q})$ u obliku:

$$X(\vec{k},\vec{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\, i F(\vec{k},\vec{q}) \cdot \frac{1}{\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}}$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{N}} \Phi(\vec{k},\vec{q}) \frac{1}{\mathcal{E}_{\vec{k}} - \mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}} \qquad \text{(I. 3. 22)}$$

gde je

$$\Phi(\vec{k},\vec{q}) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}}}} \left[\vec{k}\,\vec{\ell}_{\vec{q}} V_{\vec{k}} - (\vec{k}-\vec{q})\,\vec{\ell}_{\vec{q}} V_{\vec{k}-\vec{q}}\right] \qquad \text{(I. 3. 23)}$$

Za ovako odredjenu funkciju $X(\vec{k},\vec{q})$ hamiltonijan h se svodi na:

$$h=\sum_{\vec{k}}\mathcal{E}_{\vec{k}}a^{+}_{\vec{k}}a_{\vec{k}}+\frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}\vec{q}\vec{k}'}\frac{\Phi(\vec{k},\vec{q})\Phi(\vec{k}',-\vec{q})}{\mathcal{E}_{\vec{k}'}-\mathcal{E}_{\vec{k}'+\vec{q}}-\hbar\omega_{\vec{q}}}a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}}a^{+}_{\vec{k}'+\vec{q}}a_{\vec{k}'}-$$

$$-\frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}\vec{q}\vec{k}'}\frac{\Phi(\vec{k},\vec{q})\Phi(\vec{k}',-\vec{q})}{\mathcal{E}_{\vec{k}'}-\mathcal{E}_{\vec{k}'+q}-\hbar\omega_{\vec{q}}}\frac{\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar\omega_{\vec{q}}}{\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\hbar\omega_{\vec{q}}}a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}}a^{+}_{\vec{k}+q}a_{\vec{k}'}$$

(I. 3. 24)

Ako u poslednjem izrazu izvršimo zamenu sumacionog indeksa $\vec{k}'+\vec{q}=\vec{k}''$ onda se dobija sledeće:

$$h=\sum_{\vec{k}}\mathcal{E}_{\vec{k}}a^{+}_{\vec{k}}a_{\vec{k}}+\frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}\vec{q}\vec{k}''}\frac{\Phi(\vec{k},\vec{q})\Phi(\vec{k}''-\vec{q},-\vec{q})}{\mathcal{E}_{\vec{k}''-\vec{q}}-\mathcal{E}_{\vec{k}''}-\hbar\omega_{\vec{q}}}a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}}a^{+}_{\vec{k}''}a_{\vec{k}''-\vec{q}}-$$

$$-\frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}\vec{q}\vec{k}''}\frac{\Phi(\vec{k},\vec{q})\Phi(\vec{k}''-\vec{q},-\vec{q})}{\mathcal{E}_{\vec{k}''-\vec{q}}-\mathcal{E}_{\vec{k}''}-\hbar\omega_{\vec{q}}}\frac{\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar\omega_{\vec{q}}}{\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\hbar\omega_{\vec{q}}}a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}}a^{+}_{\vec{k}''}a_{\vec{k}''-\vec{q}}$$

(I. 3. 25)

Ako iz ukupnog hamiltonijana H izdvojimo samo jedan njegov deo δh koji se dobija kao onaj deo sume (I. 3. 25) u kome je $k''=k$ imamo

$$\delta h=\sum_{\vec{k}}\mathcal{E}_{\vec{k}}a^{+}_{\vec{k}}a_{\vec{k}}+\frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}\vec{q}}\frac{\Phi(\vec{k},\vec{q})\Phi(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})}{\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\mathcal{E}_{\vec{k}}-\hbar\omega_{\vec{q}}}a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}}a^{+}_{\vec{k}}a_{\vec{k}-\vec{q}}-$$

$$-\frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}\vec{q}}\frac{\Phi(\vec{k},\vec{q})\Phi(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})}{\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\mathcal{E}_{k}-\hbar\omega_{\vec{q}}}\frac{\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar\omega_{\vec{q}}}{\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\hbar\omega_{\vec{q}}}a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}}a^{+}_{\vec{k}}a_{\vec{k}-\vec{q}}$$

(I. 3. 26)

na osnovu formule (I. 3. 23) imamo:

$$\Phi(\vec{k}-\vec{q},-\vec{q})=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{-\vec{q}}}}\Big[(\vec{k}-\vec{q})\vec{\ell}_{-\vec{q}}V_{\vec{k}-\vec{q}}-$$

$$-(\vec{k}-\vec{q}+\vec{q})\ell_{-\vec{q}}V_{\vec{k}-\vec{q}+\vec{q}}\Big]=$$

$$=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}}}}\Big[(\vec{k}-\vec{q})\vec{\ell}_{\vec{q}}V_{\vec{k}-\vec{q}}-\vec{k}\vec{\ell}_{\vec{q}}V_{\vec{k}}\Big]=$$

$$=-\Phi(\vec{k},\vec{q})$$

(I. 3. 27)

Znači da formula (I. 3. 26) može da se napiše u obliku:

$$\delta h=\sum_{\vec{k}}\mathcal{E}_{\vec{k}}a^+_{\vec{k}}a_{\vec{k}}-\frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}\vec{q}}\frac{\Phi^2(\vec{k},\vec{q})}{\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\mathcal{E}_{\vec{k}}-\hbar\omega_{\vec{q}}}a^+_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}}a^+_{\vec{k}}a_{\vec{k}-\vec{q}}+$$

$$+\frac{1}{2N}\sum_{\vec{k},\vec{q}}\frac{\Phi^2(\vec{k},\vec{q})}{\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\mathcal{E}_{\vec{k}}-\hbar\omega_{\vec{q}}}\;\frac{\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar\omega_{\vec{q}}}{\mathcal{E}_{\vec{k}}-\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\hbar\omega_{\vec{q}}}a^+_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}}a^+_{\vec{k}}a_{\vec{k}-\vec{q}}$$

(I. 3. 28)

Ukoliko u poslednjem izrazu izvršimo komutiranje operatora i to sledeće:

$$a^+_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}}a^+_{\vec{k}}a_{\vec{k}-\vec{q}}=a^+_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}-\vec{q}}-a^+_{\vec{k}-\vec{q}}a^+_{\vec{k}}a_{\vec{k}}a_{\vec{k}-\vec{q}}=$$

$$=a^+_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}-\vec{q}}-a^+_{\vec{k}}a^+_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}}$$

i zanemarimo doprinos od člana $a^+_{\vec{k}-\vec{q}}a_{\vec{k}-\vec{q}}$ dijagonalnom delu hamiltonijana δh dobijamo:

$$\delta h=\sum_{\vec{k}}\mathcal{E}_{\vec{k}}a^+_{\vec{k}}a_{\vec{k}}+\frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}\vec{q}}\frac{\Phi^2(\vec{k},\vec{q})}{\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\mathcal{E}_{\vec{k}}-\hbar\omega_{\vec{q}}}\times$$

$$\times\left\{1-\frac{\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\mathcal{E}_{\vec{k}}+\hbar\omega_{\vec{q}}}{\mathcal{E}_{\vec{k}-\vec{q}}-\mathcal{E}_{\vec{k}}-\hbar\omega_{\vec{q}}}\right\} a^{+}_{\vec{k}}\, a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}} \tag{I. 3. 29}$$

Ako iz poslednjeg izraza izdvojimo samo onaj član gde je

$$\vec{k}-\vec{q}=-\vec{k}\,,\quad tj\quad \vec{q}=2\vec{k} \tag{I. 3. 30}$$

dobijamo, pošto je $\mathcal{E}_{-\vec{k}}=\mathcal{E}_{\vec{k}}$:

$$\delta(\delta H)=\sum_{\vec{k}}\mathcal{E}_{\vec{k}}\, a^{+}_{\vec{k}} a_{\vec{k}}-\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\frac{\bar{\Phi}^{2}(\vec{k},2\vec{k})}{\hbar\omega_{2\vec{k}}}\, a^{+}_{\vec{k}}\, a^{+}_{-\vec{k}}\, a_{-\vec{k}}\, a_{\vec{k}} \tag{I. 3. 31}$$

Kao što vidimo drugi član u poslednjem izrazu predstavlja privlačnu elektron - elektron interakciju zbog znaka (-). Vidimo takodje da privlačna interakcija postoji izmedju elektrona sa suprotnim impulsima. Ovo je sve u skladu s onim što je rečeno u drugom paragrafu ove glave.

Dugim računom u koji se ovde nećemo upuštati može se pokazati da je drugi član izraza (I. 3. 31) veći od svih ispuštenih delova hamiltonijana (I. 3. 25) a takodje i od kulonovskog odbijanja koje postoji izmedju elektrona u jednom uskom sloju impulsa oko graničnog impulsa fermi sfere.

I. 4. Model Bardina - Kupera i Šrifera i kanonična transformacija Bogoljubova

Na osnovu radova Freliha čiji su rezultati izloženi u prethodnom paragrafu Bardin, Kuper i Šrifer formulisali su svoj model superprovodnika. U njihovom modelu izmedju elektrona sa suprotnim impulsima u oblasti impulsa koja je bliska granici fermi sfere postoji privlačna sila koja ih vezuje u parove. Ti parovi nazivaju se kuperovski parovi, jer je Kuper dao proračun za energiju veze i ostale osobine takvog jednog para. Kao što je poznato elektroni imaju spin koji može biti $\pm \frac{1}{2}$ pa su Bardin, Kuper i Šrifer uzeli u obzir i efekte spin - spin interakcije izmedju elektrona. Kao što je poznato izmedju elektrona sa suprotnim spinovima deluju privlačne sile izmene dok izmedju elektrona sa paralelnim spinovima deluju odbojne sile. U tom smislu Bardin, Kuper i Šrifer su modifikovali rezultate Freliha (I. 3. 31) sumirajući interakciju po svim suprotno usmerenim spinovima.

Na osnovu ovakvih rasudjivanja dat je modelni hamiltonijan koji ima oblik:

$$H_{BCS} = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \left[a^{+}_{\vec{k}}(1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) + a^{+}_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2) \right] - $$

$$- \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q})\, a^{+}_{\vec{k}}(1/2)\, a^{+}_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{-\vec{q}}(-1/2)\, a_{\vec{q}}(1/2)$$

(I. 4. 1)

Funkcija $W(\vec{K},\vec{q})$ je pozitivna i parna $\left[W(\vec{K},\vec{q})=W(\vec{q},\vec{K})\right]$ u intervalu impulsa:

$$P_F - P_G \leq \hbar K \leq P_F + P_G$$
$$P_F - P_G \leq \hbar q \leq P_F + P_G \qquad (I.\ 4.\ 2)$$

gde je P_F granični impuls fermi sfere a P_G predstavlja polovinu debljine sloja oko graničnog impulsa P_F . Takodje važi uslov:

$$P_G \ll P_F \qquad (I.\ 4.\ 3)$$

Van intervala (I. 4. 2) prema modelu (BCS) funkcija je ravna nuli. Takodje se uzima da se u intervalu (I. 4. 2) ova funkcija sporo menja sa promenom impulsa, pa se u konkretnom računu često zamenjuje konstantom .

Analizu hamiltonijana (I. 4. 1) izvršićemo metodom koju je predložio Bogoljubov.

Od fermi operatora $a^+_{\vec{K}}(1/2)$ i $a^+_{-\vec{K}}(-1/2)$ on je prešao jednom kanoničnom transformacijom na nove fermi operatore, $A^+_{\vec{K}}(0)$ i $A_{\vec{K}}(1)$. Oblik ove transformacije je sledeći:

$$a_{\vec{K}}(1/2) = U_{\vec{K}} A_{\vec{K}}(0) + V_{\vec{K}} A^+_{\vec{K}}(1)$$
$$a_{-\vec{K}}(-1/2) = U_{\vec{K}} A_{\vec{K}}(1) - V_{\vec{K}} A^+_{\vec{K}}(0) \qquad (I.\ 4.\ 4)$$

$$a^+_{\vec{K}}(1/2) = U_{\vec{K}} A^+_{\vec{K}}(0) + V_{\vec{K}} A_{\vec{K}}(1)$$
$$a^+_{-\vec{K}}(-1/2) = U_{\vec{K}} A^+_{\vec{K}}(1) - V_{\vec{K}} A_{\vec{K}}(0)$$

Funkcije $U_{\vec{K}}$ i $V_{\vec{K}}$ su realne i parne. Da bi transformacija (I. 4. 4) bila kanonička, tj. da bi operatori A bili takodje fermi operatori funkcije $U_{\vec{K}}$ i $V_{\vec{K}}$ moraju da zadovoljavaju tzv. uslov kanoničnosti koji ćemo ovde izvesti.

Za operatore $a^{+}_{\vec{k}}(1/2)$ i $a_{\vec{k}}(1/2)$, pošto su oni fermi operatori, važi sledeći uslov:

$$a^{+}_{\vec{k}}(1/2)\,a_{\vec{k}}(1/2)+a_{\vec{k}}(1/2)\,a^{+}_{\vec{k}}(1/2)=1 \qquad \text{(I. 4. 5)}$$

S obzirom na (I. 4. 4) i (I. 4. 5) možemo pisati:

$$\left[u_{\vec{k}}A^{+}_{\vec{k}}(0)+v_{\vec{k}}A_{\vec{k}}(1)\right]\left[u_{\vec{k}}A_{\vec{k}}(0)+v_{\vec{k}}A^{+}_{\vec{k}}(1)\right]+$$

$$+\left[u_{\vec{k}}A_{\vec{k}}(0)+v_{\vec{k}}A^{+}_{\vec{k}}(1)\right]\left[u_{\vec{k}}A^{+}_{\vec{k}}(0)+v_{\vec{k}}A_{\vec{k}}(1)\right]=$$

$$=u^{2}_{\vec{k}}A^{+}_{\vec{k}}(0)A_{\vec{k}}(0)+u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}A^{+}_{\vec{k}}(0)A^{+}_{\vec{k}}(1)+u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}A_{\vec{k}}(1)A_{\vec{k}}(0)+ \qquad \text{(I. 4. 6)}$$

$$+v^{2}_{\vec{k}}A_{\vec{k}}(1)A^{+}_{\vec{k}}(1)+u^{2}_{\vec{k}}A_{\vec{k}}(0)A^{+}_{\vec{k}}(0)+u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}A_{\vec{k}}(0)A_{\vec{k}}(1)+$$

$$+u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}A^{+}_{\vec{k}}(1)A^{+}_{\vec{k}}(0)+v^{2}_{\vec{k}}A^{+}_{\vec{k}}(1)A_{\vec{k}}(1)=1$$

Ako postavimo zahtev da i operatori A budu fermi-operatori, onda za njih mora da važi:

$$\begin{aligned}
A_{\vec{k}}(0)A^{+}_{\vec{k}}(0)&=1-A^{+}_{\vec{k}}(0)A_{\vec{k}}(0)\\
A_{\vec{k}}(1)A^{+}_{\vec{k}}(1)&=1-A^{+}_{\vec{k}}(1)A_{\vec{k}}(1)\\
A_{\vec{k}}(0)A_{\vec{k}}(1)&=-A_{\vec{k}}(1)A_{\vec{k}}(0)\\
A^{+}_{\vec{k}}(0)A^{+}_{\vec{k}}(1)&=-A^{+}_{\vec{k}}(1)A^{+}_{\vec{k}}(0)
\end{aligned} \qquad \text{(I. 4. 7)}$$

Zamenom (I. 4. 7) u (I. 4. 6) dobijamo:

$$U_{\vec{k}}^2 + V_{\vec{k}}^2 = 1 \tag{I. 4. 8}$$

Ako formule (I. 4. 4) zamenimo u hamiltonijan (I. 4. 1) i zadržimo se samo na članovima kvadratnim po operatorima A ova formula postaje:

$$H_{BCS} = H_0 + H_d + H_{nd} \tag{I. 4. 9}$$

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} \left\{ 2E_{\vec{k}} V_{\vec{k}}^2 - U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q}) U_{\vec{q}} V_{\vec{q}} \right\} \tag{I. 4. 10}$$

$$H_d = \sum_{\vec{k}} \left\{ E_{\vec{k}} (U_{\vec{k}}^2 - V_{\vec{k}}^2) + 2U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q}) U_{\vec{q}} V_{\vec{q}} \right\} \cdot \left[A_{\vec{k}}^{+}(0) A_{\vec{k}}(0) + A_{\vec{k}}^{+}(1) A_{\vec{k}}(1) \right] \tag{I. 4. 11}$$

$$H_{nd} = \sum_{\vec{k}} \left\{ 2E_{\vec{k}} U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} - (U_{\vec{k}}^2 - V_{\vec{k}}^2) \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q}) U_{\vec{q}} V_{\vec{q}} \right\} \cdot \left[A_{\vec{k}}^{+}(0) A_{\vec{k}}^{+}(1) + A_{\vec{k}}(1) A_{\vec{k}}(0) \right] \tag{I. 4. 12}$$

Funkcije U i V odredićemo tako da nedijagonalni deo hamiltonijana, a to je H_{nd} bude ravan nuli. Ovo nam daje uslov:

$$2E_{\vec{k}} U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} - (U_{\vec{k}}^2 - V_{\vec{k}}^2) \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q}) U_{\vec{q}} V_{\vec{q}} = 0 \tag{I. 4. 13}$$

Ako uvedemo oznaku:

$$\Delta_{\vec{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q}) U_{\vec{q}} V_{\vec{q}} \tag{I. 4. 14}$$

onda se uslov (I. 4. 13) svodi na :

$$2E_{\vec{k}} U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} = (U_{\vec{k}}^2 - V_{\vec{k}}^2)\Delta_{\vec{k}} \qquad \text{(I. 4. 15)}$$

Pošto je na osnovu uslova kanoničnosti $V_{\vec{k}}^2 = 1 - U_{\vec{k}}^2$ to zamenom u (I. 4. 15) dobijamo :

$$2E_{\vec{k}} U_{\vec{k}} \sqrt{1 - U_{\vec{k}}^2} = (2U_{\vec{k}}^2 - 1)\Delta_{\vec{k}}$$

tako da su konačna rešenja za funkcije U i V data sa:

$$U_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{E_{\vec{k}}}{\sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}}\right)$$
$$V_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{E_{\vec{k}}}{\sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}}\right) \qquad \text{(I. 4. 16)}$$

Odavde sledi:

$$U_{\vec{k}}^2 - V_{\vec{k}}^2 = \frac{E_{\vec{k}}}{\sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}} \quad ; \quad U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} = +\frac{1}{2}\frac{\Delta_{\vec{k}}}{\sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}} \qquad \text{(I. 4. 17)}$$

Zamenom (I. 4. 17) i (I. 4. 14) u (I. 4. 10) i (I. 4. 11) dobijamo:

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} \left\{2E_{\vec{k}} V_{\vec{k}}^2 - U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}\right\} = \sum_{\vec{k}} \left\{E_{\vec{k}} - \frac{E_{\vec{k}}^2}{\sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}} - \frac{E_{\vec{k}}\Delta_{\vec{k}}}{2\sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}}\right\}$$

tj. konačno:

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}}\left(1 - \frac{2E_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}}}{2\sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}}\right) \qquad \text{(I. 4. 18)}$$

$$H_d = \sum_{\vec{k}} \left\{E_{\vec{k}}(U_{\vec{k}}^2 - V_{\vec{k}}^2) + 2U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}\right\}\left[A_{\vec{k}}^+(0) A_{\vec{k}}(0) + A_{\vec{k}}^+(1) A_{\vec{k}}(1)\right] =$$

$$= \sum_{\vec{K}} \left[\frac{E_{\vec{K}}^2}{\sqrt{E_{\vec{K}}^2 + \Delta_{\vec{K}}^2}} + \frac{\Delta_{\vec{K}}^2}{\sqrt{E_{\vec{K}}^2 + \Delta_{\vec{K}}^2}} \right] \left[A_{\vec{K}}^{+}(0) A_{\vec{K}}(0) + A_{\vec{K}}^{+}(1) A_{\vec{K}}(1) \right]$$

Konačan oblik, dijagonalnog dela hamiltonijana je:

$$H_d = \sum_{\vec{K}} \sqrt{E_{\vec{K}}^2 + \Delta_{\vec{K}}^2} \left[A_{\vec{K}}^{+}(0) A_{\vec{K}}(0) + A_{\vec{K}}^{+}(1) A_{\vec{K}}(1) \right] \qquad \text{(I. 4. 19)}$$

Na ovaj način dijagonalizovali smo hamiltonijan Bardina, Kupera i Šrifera.

Pre nego što predjemo na analizu spektra (I. 4. 19) ispitaćemo veličinu $\Delta_{\vec{K}}$ koja figuriše u izrazu za energiju elementarnih ekscitacija.

Pre svega energija slobodnih elektrona $E_{\vec{K}}$ biće data u tzv. reprezentaciji hemijskog potencijala μ . Znači:

$$E_{\vec{K}} = \frac{\hbar^2 K^2}{2 m^*} - \mu \qquad \text{(I. 4. 20)}$$

gde je m^* efektivna masa elektrona data formulom (I. 3. 7) i μ - hemijski potencijal elektrona, koji se približno može uzeti kao:

$$\mu = \frac{\hbar^2 K_F^2}{2 m^*} \quad ; \quad K_F = \frac{P_F}{\hbar} \qquad \text{(I. 4. 21)}$$

Tada je:

$$E_{\vec{K}} = \frac{\hbar^2}{2 m^*} \left(K^2 - K_F^2 \right) = \frac{\hbar^2}{2 m^*} \left(\vec{K} - \vec{K}_F \right) \left(\vec{K} + \vec{K}_F \right) \qquad \text{(I. 4. 22)}$$

Pošto ceo model ima smisla samo za uzani sloj impulsa, oko graničnog impulsa fermi - sfere to u formuli (I. 4. 22) možemo vektore približno zameniti njihovim intenzitetima

$$\vec{K} \approx K \qquad \vec{K}_F \approx K_F$$

i uzeti, približno

$$\vec{K} + K_F \approx 2K_F \tag{I. 4. 23}$$

Tada je

$$E_{\vec{K}} = \frac{\hbar^2}{m^*} K_F (K - K_F) \tag{I. 4. 24}$$

Pošto je

$$\frac{\hbar K_F}{m^*} = v_F$$ - brzina elektrona na granici

fermi - sfere, imamo konačno:

$$E_{\vec{K}} = \hbar v_F (K - K_F) \tag{I. 4. 25}$$

Već smo rekli da se funkcija $W(\vec{K},\vec{q})$ sporo menja u uskoj oblasti impulsa oko granice fermi - sfere i da se može zameniti konstantom tj.

$$W(\vec{K},\vec{q}) \approx W \tag{I. 4. 26}$$

Zamenom (I. 4. 17), (I. 4. 25) i (I. 4. 26) u (I. 4. 14) dobijamo:

$$\Delta_{\vec{k}} = \frac{W}{2N} \sum_{\vec{q}} \frac{\Delta_{\vec{q}}}{\sqrt{\hbar^2 v_F^2 (q-q_F)^2 + \Delta_{\vec{q}}^2}} \qquad \text{(I. 4. 27)}$$

Sledeća aproksimacija sastoji se u tome što se predpostavlja da i $\Delta_{\vec{k}}$ slabo zavisi od impulsa pa se približno uzima

$$\Delta_{\vec{k}} \approx \Delta \; ; \; \frac{\partial \Delta}{\partial k} = 0 \qquad \text{(I. 4. 28)}$$

što znači da ćemo u daljem računu uzimati da je Δ konstantna veličina. Ova aproksimacija svodi formulu (I. 4. 27) na:

$$1 = \frac{W}{2N} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{\hbar^2 v_F^2 (q-q_F)^2 + \Delta^2}} \qquad \text{(I. 4. 29)}$$

Očigledno je da dobijeni izraz ima smisla samo ako je $W > 0$, jer suma na desnoj strani jednačine ima sigurno pozitivnu vrednost. Sa druge strane pozitivnost veličine W, s obzirom na oblik hamiltonijana (I. 4. 1) označava da dosadašnji rezultati imaju smisla samo ako je interakcija izmedju elektrona privlačna.

Ovo predstavlja matematičko objašnjenje za ono što je fizički bilo očigledno a to je da za obrazovanje parova sa ukupnim spinom nula koji su odgovorni za efekat superprovodljivosti, izmedju elektrona mora da deluje privlačna interakcija. Od sume u (I. 4. 29) prećićemo na integral po pravilu

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} = \frac{1}{N}\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{q} = \frac{1}{N}\frac{Na^3}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_{q_F-q_G}^{q_F+q_G} q^2 dq$$

$$= \frac{a^3}{2\pi^2}\int_{q_F-q_G}^{q_F+q_G} q^2 dq$$

Ovde je a^3 zapremina elementarne ćelije kristala. Integraciju po uglovima mogli smo odmah da izvršimo jer izraz pod znakom sume u (I. 4. 29) zavisi samo od intenziteta q. Granice integracije po q uzete su na osnovu predpostavke (BCS) modela da je:

$$W(\vec{k},\vec{q}) = \begin{cases} W & q_F - q_G \leq q \leq q_F + q_G \\ 0 & \text{za } q < q_F - q_G \text{ i } q > q_F + q_G \end{cases} \tag{I. 4. 30}$$

Na osnovu ovoga jednačina (I. 4. 29) postaje:

$$1 = \frac{Wa^3}{4\pi^2}\int_{q_F-q_G}^{q_F+q_G} \frac{q^2 dq}{\sqrt{\hbar^2 v_F^2 (q-q_F)^2 + \Delta^2}} \tag{I. 4. 31}$$

Pošto se q menja u veoma uzanom sloju možemo uzeti približno

$$q^2 \approx q_F^2 \tag{I. 4. 32}$$

posle čega (I. 4. 31) postaje

$$1 = \frac{Wa^3 q_F^2}{4\pi^2} \int_{q_F - q_G}^{q_F + q_G} \frac{dq}{\sqrt{\hbar^2 v_F^2 (q - q_F)^2 + \Delta^2}} \qquad \text{(I. 4. 33)}$$

Ako uvedemo smenu

$$q - q_F = K$$

dobijamo:

$$1 = \frac{Wa^3 q_F^2}{4\pi^2} \int_{-q_G}^{q_G} \frac{dK}{\sqrt{\hbar^2 v_F^2 K^2 + \Delta^2}} =$$

$$= \frac{Wa^3 q_F^2}{4\pi^2 \hbar v_F} \int_{-q_G}^{q_G} \frac{dK}{\sqrt{K^2 + \left(\frac{\Delta}{\hbar v_F}\right)^2}} =$$

$$= \frac{Wa^3 q_F^2}{4\pi^2 \hbar v_F} \ln \left[K + \sqrt{K^2 + \left(\frac{\Delta}{\hbar v_F}\right)^2} \right] \Bigg|_{-q_G}^{q_G}$$

posle smene granica dobijamo

$$\ln \frac{q_G + \sqrt{q_G^2 + \left(\frac{\Delta}{\hbar v_F}\right)^2}}{-q_G + \sqrt{q_G^2 + \left(\frac{\Delta}{\hbar v_F}\right)^2}} = \frac{4\pi^2 \hbar v_F}{Wa^3 q_F^2} \qquad \text{(I. 4. 34)}$$

Prepostavićemo da je

$$q_G \gg \frac{\Delta}{\hbar v_F} \qquad \text{(I. 4. 35)}$$

Tada približno:

$$\sqrt{q_G^2 + \frac{\Delta^2}{\hbar^2 v_F^2}} = q_G \sqrt{1 + \frac{\Delta^2}{\hbar^2 v_F^2 q_G^2}} \cong q_G \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\hbar^2 v_F^2 q_G^2}\right) =$$

$$= q_G + \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\hbar^2 v_F^2 q_G}$$

Posle ovoga, relacija (I. 4. 34) postaje:

$$\ln\left(1 + \frac{4\hbar^2 v_F^2 q_G^2}{\Delta^2}\right) = \frac{4\pi^2 \hbar v_F}{W a^3 q_F^2}$$

(I.4. 36)

Na osnovu aproksimacije (I. 4. 35) u formuli (I. 4. 36) možemo uzeti da je

$$\frac{4\hbar^2 v_F^2 q_G^2}{\Delta^2} \gg 1$$

(I. 4.37)

i zanemariti jedinicu tada konačno dobijamo

$$\Delta = 2\hbar v_F q_G \, e^{-\frac{4\pi \hbar^2 v_F}{W a^3 q_F^2}}$$

(I. 4. 38)

Spektar elementarnih ekscitacija dobijamo iz formule (I. 4. 19) i to na sledeći način:

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}(0) = \frac{\partial H_d}{\partial A^+_{\vec{k}}(0) A_{\vec{k}}(0)} = \sqrt{E^2_{\vec{k}} + \Delta^2_{\vec{k}}}$$

$$\mathcal{E}_{\vec{k}}(1) = \frac{\partial H_d}{\partial A^+_{\vec{k}}(1) A_{\vec{k}}(1)} = \sqrt{E^2_{\vec{k}} + \Delta^2_{\vec{k}}}$$

Ovo znači da obe vrste fermiona $A_{(o)}$ i $A_{(1)}$ imaju iste zakone disperzije tj.

$$\mathcal{E}_{\vec{k}} = \sqrt{E^2_{\vec{k}} + \Delta^2_{\vec{k}}} \tag{I. 4. 39}$$

Ako u formuli (I. 4. 39) izvršimo aproksimacije (I. 4. 28) i (I. 4. 25) i uzmemo u obzir da je

$$\hbar (k - k_F) = P - P_F$$

dobijamo

$$\mathcal{E}_P = \sqrt{\Delta^2 + v_F^2 (P - P_F)^2} \tag{I. 4. 40}$$

Pokazaćemo sada da je za spektar tipa (I. 4. 40) ispunjen uslov kretanje bez trenja a kao što znamo ovaj uslov zahteva da minimum fazne brzine mora biti pozitivna veličina.

$$\frac{\mathcal{E}_P}{P} = \sqrt{\frac{\Delta^2}{P^2} + \frac{v_F^2}{P^2}(P - P_F)^2} \tag{I. 4. 41}$$

U skladu sa proksimacijom (I. 4. 32) uzećemo

$$P^2 \sim P_F^2 \tag{I. 4. 42}$$

pa dobijamo:

$$\frac{\mathcal{E}_P}{P} \approx \sqrt{\left(\frac{\Delta}{P_F}\right)^2 + \left(\frac{v_F}{P_F}\right)^2 (P - P_F)^2} \tag{I. 4. 43}$$

Odavde:

$$\frac{d}{dP}\frac{\mathcal{E}_P}{P}=\frac{\left(\frac{v_F}{P_F}\right)^2(P-P_F)}{\sqrt{\left(\frac{\Delta}{P_F}\right)^2+\left(\frac{v_F}{P_F}\right)^2(P-P_F)^2}}$$

tj.

$$\frac{d}{dP}\left(\frac{\mathcal{E}_P}{P}\right)=0 \quad \text{za} \quad P=P_F$$

(I. 4. 44)

a to znači, da je

$$\min\frac{\mathcal{E}_P}{P}=\frac{\Delta}{P_F}>0$$

(I. 4. 45)

Kao što vidimo minimum fazne brzine je pozitivan dokle god je veličina Δ (koja je kao što smo videli pozitivna) različita od nule. To znači da veličina Δ igra osnovnu ulogu u efektu superprovodljivosti.

Efekat superprovodnosti nastaje kada veličina Δ postane ravna nuli. Mi ćemo kasnije videti da Δ opada sa porastom temperature i da na nekoj temperaturi T_c postaje ravna nuli. Na ovoj temperaturi efekat superprovodljivosti prestaje.

Superprovodnik će imati višu kritičnu tačku T_c ukoliko je Δ , koje je dato formulom (I. 4. 38) veće.

Iz formule (I. 4. 38) vidi se da je Δ proporcionalno konstanti W efektivne elektron - elektron interakcije, zatim veličini graničnog impulsa fermi - sfere q_F

i debljini sloja q_G u kome izmedju elektrona deluje privlačna interakcija. Može se pokazati da je q_G proporcionalno Debajevoj frekvenci fonona pa se može zaključiti da će dobri superprovodnici morati da ispunjavaju sledeće uslove:

a) da imaju fermi - sferu velikog radiusa

b) da elektron fonon interakcija bude jaka (ovo kao što znamo povećava veličinu W)

c) da ima visoku Debajevu frekvencu što grubo govoreći znači da ima veliku gustinu.

Na osnovu teorije koja je ovde izložena efekat superprovodljivosti može se objasniti na sledeći način:

a) Na niskim temperaturama elektron-fonon interakcija dovodi do sparivanja elektrona u kuperovske parove koji se kondenzuju, ne na impulsu nula nego na impulsu P_F.

b) Superprovodnost se ne realizuje kretanjem kuperovskih parova već kretanjem elektrona, jer kao što znamo zakon disperzije (I. 4. 39) je zakon disperzije za fermi čestice.

c) Veličina Δ može se shvatiti kao energija veze dva elektrona u kuperovskom paru.

d) Superkonduktivni efekat se realizuje preko onih elektrona koji nastaju razgradjivanjem kuperovskog para, jer oni pored kinetičke energije nose sobom i deo energije veze (grubo uzeto $\frac{\Delta}{2}$) a za takav zakon disperzije elektrona zadovoljen je uslov kretanja bez trenja.

e) Razgradjivanje kuperovskog para postiže se spoljašnjim električnim poljem (ili magnetnim poljem), koje istovremeno dovodi do kretanja elektrona tj. do struje.

f) Elektroni koji nisu nastali razbijanjem kuperovskog para ne mogu biti superprovodni.

g) Energija veze Δ je funkcija temperature i opada sa njenim porastom. Kada ona postane ravna nuli efekat superprovodljivosti prestaje.

h) Ekeperimentalno je ustanovljeno da je kritična temperatura za čiste metale oko $10^{o}K$ a za legure i intermetalna jedinjenja oko $20^{o}K$. Do sada najbolji superprovodnik ima kritičnu temperaturu $22^{o}K$.

II. 1. Frelihov ekvivalentni hamiltonijan kao rezultat teorije perturbacije

Do Frelihovog ekvivalentnog hamiltonijana elektron - elektron interakcije koji smo dobili u trećem paragrafu prve glave, može se doći i na matematički jednostavniji način, ukoliko se matematički rezultat kombinuje sa eksperimentalnim činjenicama. Poćićemo od sledeće dve činjenice kao osnovne:

a) elektron fonon interakcija je jedini uzrok koji ne dopušta kretanje elektrona bez trenja (struju bez otpora);

b) struja teče bez otpora na niskim temepraturama (ovo je eksperimentalna činjenica koju kombinujemo sa računom).

Na osnovu gornje dve premise sledi očigledan zaključak:

U sistemu elektrona postoji neka reakcija koja kompenzuje dejstvo elektron - fonon interakcije.

Naš zadatak je da odredimo oblik i veličinu ove reakcije elektronskog,sistema na elektron - fonon interakciju.

Hamiltonijan elektron - fonon interakcije ima oblik (I. 3. 12).

$$H_{int} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}\vec{q}} F(\vec{k},\vec{q})\, a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}} \left(b_{-\vec{q}} + b^{+}_{\vec{q}} \right) \tag{II. 1. 1}$$

$$F(\vec{k},\vec{q}) = \frac{i}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}}}} \left[\vec{k}\,\vec{l}_{\vec{q}}\, V_{\vec{k}} - (\vec{k}-\vec{q})\,\vec{l}_{\vec{q}}\, V_{\vec{k}-\vec{q}} \right] \tag{II. 1. 2}$$

U prvoj aproksimaciji teorije perturbacije hamiltonijan (II. 1. 1) ne može da da popravke energiji sistema jer nema dijagonalnih elemenata (sadrži nejednak broj kreacionih i anihilacionih operatora). Popravke energiji sistema može da da tek u drugoj aproksimaciji teorije perturbacije. Mi ćemo se interesovati onom popravkom koju dobija elektronski sistem u slučaju kada fonona nema (popravka u fononskom vakuumu).

Tada nam nije potreban ceo hamiltonijan (II.1.1) već samo onaj njegov deo koji sadrži kreacioni fononski operator tj.

$$H_{int}^{eff} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}\vec{q}} F(\vec{k},\vec{q})\, a^{+}_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}}\, b^{+}_{\vec{q}} \tag{II. 1. 3}$$

Na osnovu opšte formule teorije perturbacije popravka koja se dobije u drugoj aproksimaciji ima oblik

$$\delta H = \sum_{m} \frac{\langle n|V|m\rangle\langle m|V|n\rangle}{E_n - E_m} \tag{II. 1. 4}$$

gde je:

$|n\rangle$ - početno stanje

$|m\rangle$ - intermedijalno stanje

V - perturbacija u našem slučaju H^{eff}_{int}.

E_n - energija početnog stanja

E_m - energija intermedijalnog stanja.

Mi ćemo razmatrati slučaj kada se u početnom stanju nalazi jedan elektron sa impulsom $\vec{K}$ i nema fonona niti elektrona sa impulsom $\vec{K} - \vec{q}$. Znači:

$$|n\rangle = |0^{(e)}_{\vec{K}-\vec{q}}\rangle |1^{(e)}_{\vec{K}}\rangle |0^{(\phi)}_{\vec{q}}\rangle \qquad \text{(II. 1. 5)}$$

očigledno je da je energija ovog stanja

$$E_n = \mathcal{E}_{\vec{K}} \qquad \text{(II. 1. 6)}$$

Na osnovu strukture hamiltonijana (II. 1. 3) vidi se da nas on prevodi u stanje u kome se nalaze jedan fonon sa impulsom $\vec{q}$, jedan elektron sa impulsom $\vec{K} - \vec{q}$ i nema elektrona sa impulsom $\vec{K}$. Znači:

$$|m\rangle = |1^{(e)}_{\vec{K}-\vec{q}}\rangle |0^{(e)}_{\vec{K}}\rangle |1^{(\phi)}_{\vec{q}}\rangle \qquad \text{(II. 1. 7)}$$

Energija ovoga stanja je:

$$E_m = \mathcal{E}_{\vec{K}-\vec{q}} + \hbar\omega_{\vec{q}} \qquad \text{(II. 1. 8)}$$

U formuli (II. 1. 4) mi ćemo izvršiti usrednjavanje samo po fononskim stanjima dok ćemo elektronske operatore ostaviti ne usrednjene. Tada broj δH postaje operator $\delta\hat{H}$ u elektronskom podprostoru.

U skladu sa ovim, pošto je $b^+_{\vec{q}}|0^{(\phi)}_{\vec{q}}\rangle = |0^{(\phi)}_{\vec{q}}\rangle$ možemo pisati

$$\langle m|H^{eff}_{int}|n\rangle \rightarrow \sum_{\vec{K}\vec{q}} F(\vec{K},\vec{q})\, a^+_{\vec{K}-\vec{q}}\, a_{\vec{K}} \qquad \text{(II. 1. 9)}$$

Pošto je

$$\langle n|V|m\rangle = \langle m|V|n\rangle^*$$

možemo, na osnovu (II. 1. 9) pisati:

$$\langle n|H_{int}^{eff}|m\rangle \rightarrow \sum_{\vec{K}'\vec{q}'} F^{*}(\vec{K}',\vec{q}')\, a_{\vec{K}'}^{+}\, a_{\vec{K}'-\vec{q}'} \tag{II. 1. 10}$$

Na osnovu (II. 1. 6) i (II. 1. 8) imenilac izraza (II.1.4) postaje $\mathcal{E}_{\vec{K}} - \mathcal{E}_{\vec{K}-\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}$.

Znači u drugoj aproksimaciji teorije perturbacije elektron - fonon interakcija izaziva elektron - elektron interakciju sledećeg oblika:

$$\delta\hat{H} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{K}\vec{q}\vec{K}'\vec{q}'} \frac{F^{*}(\vec{K}',\vec{q}')F(\vec{K},\vec{q})}{\mathcal{E}_{\vec{K}} - \mathcal{E}_{\vec{K}-\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}}\, a_{\vec{K}'}^{+} a_{\vec{K}'-\vec{q}'} a_{\vec{K}-\vec{q}}^{+} a_{\vec{K}} \tag{II. 1. 11}$$

U poslednjoj sumi ograničićemo se samo onim delovima koji mogu biti dijagonalni, a to znači da ćemo zadržati samo onaj deo sume u kome je $\vec{K}' = \vec{K}$ i $\vec{q}' = \vec{q}$. Onda dobijamo:

$$\delta\hat{H}_d = \frac{1}{N}\sum_{\vec{K}\vec{q}} \frac{|F(\vec{K},\vec{q})|^2}{\mathcal{E}_{\vec{K}} - \mathcal{E}_{\vec{K}-\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}}\, a_{\vec{K}}^{+} a_{\vec{K}-\vec{q}} a_{\vec{K}-\vec{q}}^{+} a_{\vec{K}} \tag{II. 1. 12}$$

Ako u izrazu (II. 1. 12) ispermutujemo dva srednja operatora $a_{\vec{K}-\vec{q}}\, a_{\vec{K}-\vec{q}}^{+} = 1 - a_{\vec{K}-\vec{q}}^{+} a_{\vec{K}-\vec{q}}$ i odbacimo kvadratni deo koji dolazi od jedinice formula (II. 1. 12) postaje

$$\delta\hat{H}_d = -\frac{1}{N}\sum_{\vec{K}\vec{q}} \frac{|F(\vec{K},\vec{q})|^2}{\mathcal{E}_{\vec{K}} - \mathcal{E}_{\vec{K}-\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}}\, a_{\vec{K}}^{+} a_{\vec{K}-\vec{q}}^{+} a_{\vec{K}-\vec{q}} a_{\vec{K}} \tag{II. 1. 13}$$

Ako iz sume (II. 1. 13) izdvojimo samo one članove za koje je $\vec{q} = 2\vec{K}$ formula (II. 1. 13) postaje:

$$\delta(\delta \hat{H}_d) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{|F(\vec{k}, 2\vec{k})|^2}{\hbar \omega_{2\vec{k}}} a^+_{\vec{k}} a^+_{-\vec{k}} a_{-\vec{k}} a_{\vec{k}} \tag{II. 1. 14}$$

Kao što vidimo elektron - fonon interakcija dovodi do efektivne elektron - elektron interakcije za elektrone sa suprotno usmerenim impulsima koja je odbojna. Na osnovu naše premise (a) uzrok pojave otpora je postojanje hamiltonijana (II. 1. 14). Na osnovu premise (b), pošto se zna da otpora nema, u elektronskom sistemu se mora pojaviti reakcija koja tačno kompenzuje ono što do otpora dovodi. Na osnovu formule (II. 1. 14) očigledno je da ta reakcija mora biti ista kao $\delta(\delta \hat{H}_d)$ po veličini a suprotna po znaku. Znači reakcija elektronskog podsistema na elektron - fonon interakciju ima oblik:

$$\delta \hat{H}_R = -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{|F(\vec{k}, 2\vec{k})|^2}{\hbar \omega_{2\vec{k}}} a^+_{\vec{k}} a^+_{-\vec{k}} a_{-\vec{k}} a_{\vec{k}} \tag{II. 1. 15}$$

i ova reakcija omogućuje kretanje elektrona bez otpora.

Kao što vidimo formula (II. 1. 15) je tačno ista kao i interakcioni član Frelihove formule (I. 3. 31).

Kao što vidimo ovakav postupak u kome se kombinuju eksperimentalne činjenice sa teorijom može da nas dovede do istih zaključaka kao i strogo teorijski prilaz kakav je izvršio Frelih. Mada izloženi prilaz nije toliko strog, on nam omogućava da mnogo brže dodjemo do ispravnih rezultata i kao takav može da posluži kao brza ocena fizičke situacije i u nekim drugim analognim slučajevima.

II. 2. Prelaz na Pauli operatore u modelu Bardina, Kupera i Šrifera

Model Bardina, Kupera i Šrifera detaljno smo analizirali u četvrtom paragrafu prve glave i to u fermionskoj reprezentaciji. Za našu dalju analizu modela mnogo je bolje preći na Pauli operatora, jer u ovoj reprezentaciji termodinamička analiza modela je mnogo jednostavnija.

Hamiltonijan modela BCS ima oblik:

$$H_{BCS}=\sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}}\left[a^{+}_{\vec{k}}(1/2)\,a_{\vec{k}}(1/2)+a^{+}_{-\vec{k}}(-1/2)\,a_{-\vec{k}}(-1/2)\right]-$$

$$-\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q})\,a^{+}_{\vec{k}}(1/2)\,a^{+}_{-\vec{k}}(-1/2)\,a_{-\vec{q}}(-1/2)\,a_{\vec{q}}(1/2) \tag{II. 2. 1}$$

Već prvi pogled na ovaj hamiltonijan dovodi nas do zaključka da se od fermi operatora a^{+} i a može preći na neke nove operatore koji će biti umnošci para fermi operatora.

Ako uvedemo dva skupa kvantnih brojeva i to:

$$\vec{K};\frac{1}{2} \quad \text{i} \quad -\vec{K};-\frac{1}{2} \tag{II. 2. 2}$$

onda je za ova dva skupa kvantnih brojeva celokupni fermionski prostor sledećeg oblika:

$$\mathcal{H}=\Big\{\,|0_{\vec{k};1/2}\,0_{-\vec{k};-1/2}\rangle;\ |1_{\vec{k};1/2}\,1_{-\vec{k};-1/2}\rangle;$$

$$|0_{\vec{k};1/2}\,1_{-\vec{k};-1/2}\rangle;\ |1_{\vec{k};1/2}\,0_{-\vec{k};-1/2}\rangle\Big\} \tag{II. 2. 3}$$

Očigledno je takodje da hamiltonijan (II. 2. 1) ostaje zatvoren u podprostoru $\mathcal{H}_1$ ukupnog prostora $\mathcal{H}$, pri čemu je $\mathcal{H}_1$ dato kao:

$$\mathcal{H}_1 = \left\{ \left| 0_{\vec{k};1/2}\, 0_{-\vec{k};-1/2} \right\rangle ; \left| 1_{\vec{k};1/2}\, 1_{-\vec{k},-1/2} \right\rangle \right\} \tag{II. 2. 4}$$

Ako uvedemo sledeće operatore:

$$P^+_{\vec{k}} = a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a^+_{-\vec{k}}(-1/2)$$

$$P_{\vec{k}} = a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) \tag{II. 2. 5}$$

onda se lako vidi da su oni u podprostoru $\mathcal{H}_2$

$$\mathcal{H}_2 = \left\{ \left| 0_{\vec{k};1/2}\, 1_{-\vec{k};-1/2} \right\rangle ; \left| 1_{\vec{k};1/2}\, 0_{-\vec{k};-1/2} \right\rangle \right\} \tag{II. 2. 6}$$

indentički ravni nuli, dok u podprostoru $\mathcal{H}_1$ nisu ravni nuli i delujući na stanje iz ovog podprostora uvek daju stanje iz tog istog podprostora. Takodje je očigledno da u podprostoru $\mathcal{H}_1$ važi sledeća relacija;

$$a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) = a^+_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2) \tag{II. 2. 7}$$

Ako formiramo operator $P^+_k P_k$, onda sledi:

$$P^+_{\vec{k}} P_{\vec{k}} = a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a^+_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) =$$

$$= a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) - a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a^+_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) =$$

$$= a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)$$

(II. 2. 8)

Poslednji stav ove relacije dobijen je na osnovu činjenice da je operator $a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a^+_{-\vec{k}}(-\frac{1}{2})\, a_{\vec{k}}(1/2)$ indentički ravan nuli u podprostoru $\mathcal{H}_1$. Na osnovu (II. 2. 8) i (II. 2. 7) očigledno sledi da je u $\mathcal{H}_1$

$$a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) = a^+_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2) = P^+_{\vec{k}} P_{\vec{k}}$$

(II. 2. 9)

Pošto nas hamiltonijan H_{BCS}, ne izvodi iz podprostora $\mathcal{H}_1$ i pošto su operatori P ravni nuli u podprostoru $\mathcal{H}_2$ mi se u daljoj analizi možemo ograničiti samo na podprostor $\mathcal{H}_1$ u kome, s obzirom na (II. 2. 5) i (II. 2. 9) možemo pisati:

$$H_{BCS} = \sum_{\vec{k}} 2E_{\vec{k}} P^+_{\vec{k}} P_{\vec{k}} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q})\, P^+_{\vec{k}} P_{\vec{q}}$$

(II. 2. 10)

Za dalji račun potrebno je pronaći kakve komutacione relacije zadovoljavaju operatori P.

Ako obrazujemo antikomutator:

$$P^+_{\vec{k}} P_{\vec{k}} + P_{\vec{k}} P^+_{\vec{k}} = a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a^+_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) +$$

$$+ a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)\, a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a^+_{-\vec{k}}(-1/2) =$$

$$= a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) + a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a^+_{-\vec{k}}(-1/2) \; -$$

$$- a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a^+_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) -$$

$$- a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)\, a^+_{-\vec{k}}(-1/2) =$$

$$= 1 + a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) - a^+_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2) = 1$$

Poslednji stav je dobijen na osnovu činjenice da su operatori $a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a^+_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)$ i $a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)\, a^+_{-\vec{k}}(-1/2)$ ravni nuli u $\mathcal{H}_1$ i da u $\mathcal{H}_1$ važi da je $a^+_{\vec{k}}(1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) = a^+_{-\vec{k}}(-\frac{1}{2})\, a_{-\vec{k}}(-1/2)$

Prema tome imamo:

$$P^+_{\vec{k}} P_{\vec{k}} + P_{\vec{k}} P^+_{\vec{k}} = 1 \qquad \text{(II. 2. 11)}$$

Potražimo operator $P^2_{\vec{k}}$.

$$P^2_{\vec{k}} = a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)$$

očigledno je da je u $\mathcal{H}_1$ ovaj operator indentički ravan nuli, pa zaključujemo:

$$P^2_{\vec{k}} = P^{+2}_{\vec{k}} = 0 \qquad \text{(II. 2. 12)}$$

Ispitajmo sada vrednost komutatora

$$P_{\vec{k}} P^+_{\vec{q}} - P^+_{\vec{q}} P_{\vec{k}} \quad ; \quad (\vec{k} \neq \vec{q})$$

Ako eksplicitno ispišemo ovaj komutator dobijamo:

$$P_{\vec{k}} P^+_{\vec{q}} - P^+_{\vec{q}} P_{\vec{k}} = a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)\, a^+_{\vec{q}}(1/2)\, a^+_{-\vec{q}}(-1/2) -$$

$$- a^+_{\vec{q}}(1/2)\, a^+_{-\vec{q}}(-1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) =$$

$$= a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)\, a^{+}_{\vec{q}}(1/2)\, a^{+}_{-\vec{q}}(-1/2) -$$

$$- a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)\, a^{+}_{\vec{q}}(1/2)\, a^{+}_{-\vec{q}}(-1/2) = 0$$

Znači:

$$P_{\vec{k}} P^{+}_{\vec{q}} - P^{+}_{\vec{q}} P_{\vec{k}} = 0 \qquad \text{(II. 2. 13)}$$

Takodje:

$$P_{\vec{k}} P_{\vec{q}} - P_{\vec{q}} P_{\vec{k}} = a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)\, a_{-\vec{q}}(-1/2)\, a_{\vec{q}}(1/2) -$$

$\vec{k} \neq \vec{q}$

$$- a_{-q}(-1/2)\, a_{q}(1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) =$$

$$= a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)\, a_{-\vec{q}}(-1/2)\, a_{\vec{q}}(1/2) - a_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2)\, a_{-\vec{q}}(-1/2)\, a_{\vec{q}}(1/2) = 0$$

Ako sve dobijene rezultate rezimiramo izlazi da operatori P zadovoljavaju sledeće komutacione relacije.

$$[P_{\vec{k}}, P^{+}_{\vec{q}}] = (1 - 2P^{+}_{\vec{k}} P_{\vec{k}})\,\delta_{\vec{k},\vec{q}} \quad ; \quad P^{2}_{\vec{k}} = P^{+2}_{\vec{k}} = 0$$

$$[P_{\vec{k}}, P_{\vec{q}}] = [P^{+}_{\vec{k}}, P^{+}_{\vec{q}}] = 0 \qquad \text{(II. 2. 14)}$$

$$P^{+}_{\vec{k}} P_{\vec{k}} = a^{+}_{\vec{k}}(1/2)\, a_{\vec{k}}(1/2) = a^{+}_{-\vec{k}}(-1/2)\, a_{-\vec{k}}(-1/2)$$

Operatori sa ovakvim komutacionim relacijama nazivaju se Pauli operatori. Prema tome hamiltonijan BCS modela može se izraziti preko Pauli operatora i on ima oblik u ovoj reprezentaciji koji je dat jednačinom (II. 2. 10).

Ako želimo da izvršimo analizu hamiltonijana (II. 2. 10) slično onoj koja je izvršena u četvrtom paragrafu prve glave, mi treba jenom kanoničnom transformacijom da predjemo od Pauli operatora $P_{\vec{k}}$ na nove Pauli operatore $Q_{\vec{k}}$.

Lako je proveriti da je kanonička transformacija sledeća:

$$P_{\vec{k}} = \sqrt{\Theta_{\vec{k}} W_{\vec{k}}}\left(1 - Q^{+}_{\vec{k}} Q_{\vec{k}}\right) + \Theta_{\vec{k}} Q_{\vec{k}} - W_{\vec{k}} Q^{+}_{\vec{k}}$$
$$\left(\Theta_{\vec{k}} + W_{\vec{k}}\right)^{2} = 1 \qquad \text{(II. 2. 15)}$$

Ako (II. 2. 15) zamenimo u hamiltonijan (II. 2. 10) dobićemo sledeći rezultat:

$$W_{\vec{k}\vec{q}} \to W(\vec{k}\vec{q}) \quad i \quad P^{+}_{\vec{k}} \to Q^{+}_{\vec{k}} \qquad P_{\vec{k}} \to Q_{\vec{k}}$$

$$H = H_0 + H_1 + H_{2d} + H_{2nd} + H_3 + H_4 \qquad \text{(II. 2. 16)}$$

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} \Big\{ 2E_{\vec{k}} W_{\vec{k}} \left(\Theta_{\vec{k}} + W_{\vec{k}}\right) - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} W(\vec{k}\vec{q}) \sqrt{\Theta_{\vec{k}} W_{\vec{k}} \Theta_{\vec{q}} W_{\vec{q}}} \qquad \text{(II. 2. 17)}$$

$$H_1 = \sum_{\vec{k}} \Big\{ 2E_{\vec{k}} \left(\Theta_{\vec{k}} + W_{\vec{k}}\right) \sqrt{\Theta_{\vec{k}} W_{\vec{k}}} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} W(\vec{k}\vec{q}) \left(\Theta_{\vec{k}} - W_{\vec{k}}\right) \sqrt{\Theta_{\vec{q}} W_{\vec{q}}} \Big\}$$
$$\cdot \left(P^{+}_{\vec{k}} + P_{\vec{k}}\right) \qquad \text{(II. 2. 18)}$$

$$H_{2d} = \sum_{\vec{k}} \Big\{ 2E_{\vec{k}} \left(\Theta^{2}_{\vec{k}} - W^{2}_{\vec{k}}\right) + \frac{4}{N} \sum_{\vec{q}} W(\vec{k}\vec{q}) \sqrt{\Theta_{\vec{k}} W_{\vec{k}} \Theta_{\vec{q}} W_{\vec{q}}} \Big\} P^{+}_{\vec{k}} P_{\vec{k}} \qquad \text{(II. 2. 19)}$$

$$H_{2nd} = \sum_{\vec{k}} \Big\{ P^{+}_{\vec{k}} P_{\vec{q}} \Big[-\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} W(\vec{k}\vec{q}) \left(\Theta_{\vec{k}} \Theta_{\vec{q}} + W_{\vec{k}} W_{\vec{q}}\right) \Big] +$$

$$+\left(P^+_{\vec{k}}P^+_{\vec{q}}+P_{\vec{q}}P_{\vec{k}}\right)\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}W(\vec{k}\vec{q})\Theta_{\vec{k}}\omega_{\vec{q}}\Big\} \qquad (II.2.20)$$

$$H_3=\frac{2}{N}\sum_{\vec{k}}\left(\Theta_{\vec{k}}-\omega_{\vec{k}}\right)\sqrt{\Theta_{\vec{q}}\,\omega_{\vec{q}}}\left(P^+_{\vec{k}}P^+_{\vec{q}}P_{\vec{q}}+P^+_{\vec{q}}P_{\vec{q}}P_{\vec{k}}\right)\cdot W(\vec{k}\vec{q}) \qquad (II.2.21)$$

$$H_4=-\frac{4}{N}\sum_{\vec{k}\vec{q}}W(\vec{k}\vec{q})\sqrt{\Theta_{\vec{k}}\,\omega_{\vec{k}}\,\Theta_{\vec{q}}\,\omega_{\vec{q}}}\;P^+_{\vec{k}}P_{\vec{k}}P^+_{\vec{q}}P_{\vec{q}} \qquad (II.2.22)$$

Kao što vidimo kompletan hamiltonijan sistema sadrži član koji je linearan po Pauli operatoru Q. Ovo znači da hamiltonijan nije kako se to kaže "stabilizovan", što drugim rečima znači da mu energija osnovnog stanja nije dobro definisana. Pošto se u (II. 2. 16) nalaze proizvoljne funkcije θ i ω i mi ih možemo odrediti tako da hamiltonijan (II. 2. 16) postane stabilan, a to znači da ćemo izjednačiti sa nulom koeficijente proprocionalnosti ispred operatora Q^+ i Q u hamiltonijanu H_1. Ovo nas dovodi do uslova:

$$2E_{\vec{k}}\left(\Theta_{\vec{k}}+\omega_{\vec{k}}\right)\sqrt{\Theta_{\vec{k}}\,\omega_{\vec{k}}}-\left(\Theta_{\vec{k}}-\omega_{\vec{k}}\right)\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}W(\vec{k},\vec{q})\sqrt{\Theta_{\vec{q}}\,\omega_{\vec{q}}}=0 \qquad (II.\ 2.\ 23)$$

Ako uvedemo oznaku:

$$\Delta_{\vec{k}}=\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}W(\vec{k},\vec{q})\sqrt{\Theta_{\vec{q}}\,\omega_{\vec{q}}} \qquad (II.\ 2.\ 24)$$

i iskoristimo uslov (II. 2. 15)

$$\Theta_{\vec{k}}+\omega_{\vec{k}}=1 \qquad (II.\ 2.\ 25)$$

jednačina (II. 2. 23) svodi se na:

$$2E_{\vec{k}}\sqrt{\theta_{\vec{k}} w_{\vec{k}}} - (\theta_{\vec{k}} - w_{\vec{k}})\Delta_{\vec{k}} = 0 \qquad \text{(II. 2. 26)}$$

Rešavajući sistem jednačina (II. 2. 25) i (II. 2. 26) dobijamo:

$$\theta_{\vec{k}} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{E_{\vec{k}}}{\sqrt{\Delta_{\vec{k}}^2 + \mathcal{E}_{\vec{k}}^2}}\right) ; \quad w_{\vec{k}} = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{E_{\vec{k}}}{\sqrt{\Delta_{\vec{k}}^2 + \mathcal{E}_{\vec{k}}^2}}\right) \qquad \text{(II. 2. 27)}$$

pošto je na osnovu (II. 2. 27)

$$\theta_{\vec{k}} - w_{\vec{k}} = \frac{E_{\vec{k}}}{\sqrt{\Delta_{\vec{k}}^2 + E_{\vec{k}}^2}} ; \quad \sqrt{\theta_{\vec{k}} w_{\vec{k}}} = \frac{1}{2}\,\frac{\Delta_{\vec{k}}}{\sqrt{\Delta_{\vec{k}}^2 + E_{\vec{k}}^2}} \qquad \text{(II. 2. 28)}$$

dijagonalni deo kompletnog hamiltonijana H_{2d} postaje:

$$H_{2d} = \sum_{\vec{k}} 2\sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}\; Q_{\vec{k}}^{+} Q_{\vec{k}} =$$

$$= \sum_{\vec{k}} \sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}\; Q_{\vec{k}}^{+} Q_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}\; Q_{-\vec{k}}^{+} Q_{-\vec{k}} \qquad \text{(II. 2. 29)}$$

Kao što vidimo dobili smo isti rezultat za spektar elementarnih ekscitacija koji daje i teorija Bardina, Kupera i Šrifera. Razlika se sastoji u tome što superfluidno kretanje po ovoj slici ne vrše dva tipa fermi pobudjenja već paulionska pobudjenja sa suprotno usmerenim impulsima.

Na osnovu (II. 2. 24), (II. 2. 27) i (II. 2. 28) potpuno je očigledno da se gep $\Delta_{\vec{k}}$ dobija na isti način i ima istu vrednost kao i u teoriji Bardina, Kupera i Šrifera tj.

$$\Delta = 2\hbar v_F\, \mathcal{G}_G\, e^{-\frac{4\pi\hbar^2 v_F}{W a^3 q_F^2}} \tag{II. 2. 30}$$

Konačan zaključak je da se rezultati teorije Bardina, Kupera i Šrifera mogu dobiti na drugi način. Način koji je izložen ovde matematički je podesniji za analizu termodinamičkih karakteristika superprovodnika, koju ćemo izvršiti u sledećem paragrafu.

II. 3. Temperaturska analiza spektra u Pauli - reprezentaciji

Ako želimo da izvršimo termodinamičku analizu sistema opisanog hamiltonijanom (II. 2. 16) onda treba da ocenimo koji članovi ovog hamiltonijana daju bitne doprinose termodinamičkim veličinama sistema. Lako je videti, posle stabilizacije koju smo izvršili u prethodnom paragrafu da su to članovi H_{2d} i H_4.

Pošto ovakav hamiltonijan ima smisla samo u uzanom sloju impulsa oko graničnog impulsa fermi sfere P_F, mi ćemo prethodno izvršiti neke aproksimacije koje će u mnogome uprostiti račun. Poćićemo od izraza za energiju elementarnih ekscitacija:

$$\mathcal{E}_{\vec{p}} = \sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2} = \sqrt{\left[\frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k_F^2)\right]^2 + \Delta_{\vec{k}}^2} \tag{II. 3. 1}$$

Kao što znamo (vidi I. 4), gep $\Delta_{\vec{k}}$ slabo zavisi od $\vec{k}$ pa možemo pisati:

$$\Delta_{\vec{k}} \simeq \Delta = \mathrm{const} \tag{II. 3. 2}$$

Osim toga

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k_F^2) = \frac{\hbar}{2m}(k + k_F)\hbar(k - k_F)$$

i koristeći aproksimaciju

$$k + k_F \simeq 2k_F \quad \text{i} \quad \hbar(k - k_F) \simeq P_G \tag{II. 3. 3}$$

možemo uzeti:

$$E_{\vec{k}} \approx v_F p_G \qquad \text{(II. 3. 4)}$$

Znači da je izraz za energiju elementarnih ekscitacija, koji ćemo dalje koristiti

$$\mathcal{E}_p = \sqrt{v_F^2 p_G^2 + \Delta^2} \equiv \mathcal{E} = \text{const} \qquad \text{(II. 3. 5)}$$

Takodjer znamo da se interakcija $W(\vec{k},\vec{q})$ zamenjuje konstantnom vrednošću W.

S obzirom na ovo, možemo pisati:

$$\sqrt{\theta_{\vec{k}} W_{\vec{k}}} = \frac{1}{2} \frac{\Delta_{\vec{k}}}{\sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}} \cong \frac{1}{2} \frac{\Delta}{\mathcal{E}} = \text{const} \qquad \text{(II. 3. 6)}$$

Tada možemo pisati efektivni hamiltonijan:

$$H_{eff} = \sum_{\vec{k}} \sqrt{E_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2} \left(Q_{\vec{k}}^+ Q_{\vec{k}} + Q_{-\vec{k}}^+ Q_{-\vec{k}} \right)$$

$$- \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q}) \sqrt{\theta_{\vec{k}} W_{\vec{k}} \theta_{\vec{q}} W_{\vec{q}}} \left(Q_{\vec{k}}^+ Q_{\vec{k}} Q_{\vec{q}}^+ Q_{\vec{q}} + Q_{-\vec{k}}^+ Q_{-\vec{k}} Q_{\vec{q}}^+ Q_{-\vec{q}} \right)$$

$$\approx \mathcal{E} \sum_{\vec{k}} \left(Q_{\vec{k}}^+ Q_{\vec{k}} + Q_{-\vec{k}}^+ Q_{-\vec{k}} \right) -$$

$$- \frac{1}{2} \frac{\Delta^2 W}{\mathcal{E}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{q}} \left(Q_{\vec{k}}^+ Q_{\vec{k}} Q_{\vec{q}}^+ Q_{\vec{q}} + Q_{-\vec{k}}^+ Q_{-\vec{k}} Q_{-\vec{q}}^+ Q_{-\vec{q}} \right) \qquad \text{(II. 3. 7)}$$

Pošto kao što vidimo, elementarne ekscitacije sa pozitivnim i negativnim impulsima imaju sve iste karakteristike dalje ćemo analizirati samo jednu vrstu elementarnih ekscitacija, recimo one koje imaju pozitivan impuls. To znači da ćemo ispitati termodinamička svojstva sistema čiji je hamiltonijan:

$$H^{(+)}_{eff} = \mathcal{E}\sum_{\vec{k}} Q^{+}_{\vec{k}} Q_{\vec{k}} - \frac{\Delta^2 W}{\mathcal{E}} \frac{1}{2N} \sum_{\substack{\vec{k}\vec{q} \\ \vec{k} \neq \vec{q}}} Q^{+}_{\vec{k}} Q_{\vec{k}} Q^{+}_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} \qquad \text{(II. 3. 8)}$$

Analizu hamiltonijana izvršićemo primenjujući metod funkcije Grina. Posmatraćemo funkciju Grina:

$$G(\vec{p}) = \langle\langle Q_{\vec{p}} | Q^{+}_{\vec{p}} \rangle\rangle \qquad \text{(II. 3. 9)}$$

Jednačina za ovu funkciju Grina glasi:

$$E \langle\langle Q_{\vec{p}} | Q^{+}_{\vec{p}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \langle 1 - 2 Q^{+}_{\vec{p}} Q_{\vec{p}} \rangle + \langle\langle [Q_{\vec{p}}, H^{(+)}_{eff}] | Q^{+}_{\vec{p}} \rangle\rangle$$

(II. 3. 10)

Treba odmah naglasiti da pošto u hamiltonijanu (II. 3. 8) figurišu konstante $\mathcal{E}$, Δ i W to srednji broj pauliona ne zavisi od impulsa, tj.

$$\frac{\partial}{\partial \vec{p}} \langle Q^{+}_{\vec{p}} Q_{\vec{p}} \rangle = 0 \; ; \; \langle Q^{+}_{\vec{p}} Q_{\vec{p}} \rangle = \langle Q^{+} Q \rangle = const. \qquad \text{(II. 3. 11)}$$

Pošto je komutator operatora Q_p sa $H^{(+)}_{eff}$ sledećeg oblika:

$$[Q_{\vec{p}}, H^{(+)}_{eff}] = \mathcal{E} Q_{\vec{p}} - \frac{\Delta^2 W}{\mathcal{E}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} Q^{+}_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} Q_{\vec{p}}$$

(II. 3. 12)

jednačina (II. 3. 10) postaje:

$$(E-\mathcal{E})\langle\langle Q_{\vec{p}} | Q^{+}_{\vec{p}} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\{1 - 2\langle Q^{+}_{\vec{p}} Q_{\vec{p}}\} - \qquad \text{(II. 3. 13)}$$
$$- \frac{\Delta^2 W}{\mathcal{E}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \langle\langle Q^{+}_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} Q_{\vec{p}} | Q^{+}_{\vec{p}} \rangle\rangle$$

Višu funkciju Grina koja figuriše u ovoj jednačini „rascepićemo" koristeći Vikovu teoremu tj. uzećemo približno:

$$\langle\langle Q^{+}_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} Q_{\vec{p}} | Q^{+}_{\vec{p}} \rangle\rangle \simeq \langle Q^{+}_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} \rangle \langle\langle Q_{\vec{p}} | Q^{+}_{\vec{p}} \rangle\rangle + \qquad \text{(II. 3. 14)}$$
$$+ \langle Q^{+}_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} \rangle \langle\langle Q_{\vec{p}} | Q^{+}_{\vec{p}} \rangle\rangle \delta_{\vec{q},\vec{p}}$$

Zbog pojave kronekerovog simbola drugi član izraza (II. 3. 14) daje zanemarljivo mali doprinos pa ćemo ga odbaciti. S obzirom na ovo jednačinu (II. 3. 13) možemo pisati kao:

$$(E-\mathcal{E})\langle\langle Q_{\vec{p}} | Q^{+}_{\vec{p}} \rangle\rangle =$$
$$= \frac{i}{2\pi}\left(1 - 2\langle Q^{+}_{\vec{p}} Q_{\vec{p}} \rangle\right) - \frac{\Delta^2 W}{\mathcal{E}^2} \langle\langle Q_{\vec{p}} | Q^{+}_{\vec{p}} \rangle\rangle \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}}{}' \langle Q^{+}_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} \rangle \qquad \text{(II. 3. 15)}$$

Ako uzmemo u obzir da $\langle Q^{+}_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} \rangle$ ne zavisi od $\vec{q}$, i takodje i činjenicu da se na osnovu relacija

$$\Delta_{\vec{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} W(\vec{k},\vec{q}) \sqrt{\Theta_{\vec{q}} \omega_{\vec{q}}} \qquad i \qquad \sqrt{\Theta_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}}} = \frac{1}{2} \frac{\Delta_{\vec{k}}}{\mathcal{E}_{\vec{k}}}$$

i ovde izvršenih aproksimacija može uzeti:

$$\frac{W\Delta}{\mathcal{E}} = 2\Delta \qquad \text{(II. 3. 16)}$$

jednačina (II. 3. 15) postaje:

$$\left[E-\left(\mathcal{E}-\frac{2\Delta^2}{\mathcal{E}}\langle Q^+Q\rangle\right)\right]\langle\langle Q_{\vec{p}}|Q^+_{\vec{p}}\rangle\rangle=\frac{i}{2\pi}\left(1-2\langle Q^+Q\rangle\right.$$

(II. 3. 17)

Pol funkcije Grina odredjuje energiju elementarnih ekscitacija i ona je na osnovu (II. 3. 17)

$$E=\mathcal{E}-\frac{2\Delta^2}{\mathcal{E}}\langle Q^+Q\rangle$$

(II. 3. 18)

Kao što vidimo energija zavisi od temperature, jer srednji broj $\langle Q^+Q\rangle$ zavisi od temperature.

Da bismo našli srednji broj $\langle Q^+Q\rangle$ koristićemo spektralnu intenzivnost funkcije Grina (II. 3. 17)

$$J(E)=\frac{1-2\langle Q^+Q\rangle}{e^{\frac{E}{\theta}}-1}$$

(II. 3. 19)

Na osnovu ovoga dobijamo:

$$\langle Q^+Q\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}J(E)\,dE=\frac{1-2\langle Q^+Q\rangle}{e^{\frac{E}{\theta}}-1}$$

(II. 3. 20)

što posle sredjivanja daje konačno:

$$\langle Q^+Q\rangle=\frac{1}{e^{\frac{\mathcal{E}-\frac{2\Delta^2}{\mathcal{E}}\langle Q^+Q\rangle}{\theta}}+1}$$

(II. 3. 21)

Kao što vidimo za srednji broj pauliona dobija se implicitna jednačina u kojoj je $\Theta = K_B T$ - temperatura u energetskim jedinicama. Na ovom mestu zgodno je uvesti parametar uredjenosti sistema:

$$\sigma = 1 - 2 \langle Q^+ Q \rangle \tag{II. 3. 22}$$

analogno onome što se čini u teoriji feromagnetizma. Na osnovu (II. 3. 21) i (II. 3. 22) možemo napisati sledeću jednačinu za σ.

$$\sigma = \operatorname{tghyp} \left\{ \frac{\mathcal{E}}{2\Theta} - \frac{\Delta^2 (1-\sigma)}{2\mathcal{E}\Theta} \right\} \tag{II. 3. 23}$$

Formulu (II. 3. 18) možemo izraziti preko σ na sledeći način:

$$E = \mathcal{E} - \frac{\Delta^2}{\mathcal{E}} (1 - \sigma) \tag{II. 3. 24}$$

Analizu ovih formula izvršićemo u oblasti visokih i niskih temperatura.

a) Niske temperature.

Na niskim temperaturama parametar uredjenosti blizak je jedinici. Koristeći ovu činjenicu izvršićemo iteraciju formule (II. 3. 23) i paralelno pisati rezultate koji se dobijaju za energiju prema formuli (II. 3. 24).

Ako uzmemo da je u nultoj aproksimaciji

$$\sigma^{(0)} = 1 \tag{II. 3. 25}$$

onda je

$$E^{(0)} = \mathcal{E} \tag{II. 3. 26}$$

Ovaj rezultat odgovara spektru koji se dobija na apsolutnoj nuli. U prvoj aproksimaciji (zamenjujući vrednost $\iota^{(0)}=1$ na desnoj strani jednačine (II. 3. 23) dobijamo):

$$\iota^{(1)} = th\frac{\varepsilon}{2\Theta} \qquad \text{(II. 3. 27)}$$

Ovoj vrednosti za ι odgovara, prema formuli (II. 3. 24) popravljena energija

$$E^{(1)} = \varepsilon - \frac{\Delta^2}{\varepsilon}\left(1 - th\frac{\varepsilon}{2\Theta}\right) \qquad \text{(II. 3. 28)}$$

Pošto funkcija $th\frac{\varepsilon}{2\Theta}$ sa porastom Θ opada od $1 \to 0$ očigledno je da energija elementarnih ekscitacija opada sa porastom temperature.

b) Visoke temperature

U oblasti visokih temperatura parametar uredjenosti se može napisati u obliku:

$$y = th(x+y) \qquad \text{(II. 3. 29)}$$

gde je:

$$x = \frac{\varepsilon^2-\Delta^2}{2\varepsilon\Theta}\ ; \quad y = \frac{\Delta^2\iota}{2\varepsilon\Theta} \qquad y \ll x \qquad \text{(II. 3. 30)}$$

Veličina y je mnogo manja od x jer u oblasti visokih temperatura parametar uredjenosti postaje blizak nuli.

Na osnovu formule:

$$th(x+y) = \frac{th x + th y}{1 + th x\, th y} \qquad \text{(II. 3. 31)}$$

možemo pisati:

$$\frac{1}{\iota} = \frac{1+t_0t_1}{t_0+t_1}\ ; \quad t_0 = th x\ ; \quad t_1 = th y\ ; \quad t_1 \ll t_0 \qquad \text{(II. 3. 32)}$$

Posle prostih transformacija dobijamo:

$$\frac{1}{b} = \frac{1}{t_o}\left[1 + (1-t_o^2)\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\left(\frac{t_1}{t_o}\right)^n\right] \qquad (II.\ 3.\ 33)$$

Ako se ograničimo linearnom aproksimacijom po malom parametru $\frac{t_o}{t_1}$ i iskoristimo aproksimaciju:

$$t_1 = th\, y \approx y = \frac{\Delta^2 b}{2\mathcal{E}\Theta} \qquad (II.\ 3.\ 34)$$

formula (II. 3. 33) postaje:

$$\frac{1}{b} = \frac{1}{t_o}\left[1 - (1-t_o^2)\frac{1}{t_o}\frac{\Delta^2 b}{2\mathcal{E}\Theta}\right] \qquad (II.\ 3.\ 35)$$

Ovu jednačinu rešavćemo metodom iteracija.

Ako uzmemo da je u nultoj aproksimaciji

$$b^{(0)} = t_o$$

onda u sledećoj aproksimaciji dobijamo

$$\frac{1}{b} = \frac{1}{t_o}\left[1 - (1-t_o^2)\frac{\Delta^2}{2\mathcal{E}\Theta}\right]$$

ili:

$$b = \frac{t_o}{1-(1-t_o^2)\frac{\Delta^2}{2\mathcal{E}\Delta}} \cong t_o\left[1 + (1-t_o^2)\frac{\Delta^2}{2\mathcal{E}\Delta}\right] \qquad (II.\ 3.\ 36)$$

Ako još izvršimo aproksimaciju:

$$t_o = th\, X \approx X = \frac{\mathcal{E}^2-\Delta^2}{2\mathcal{E}\Theta} \qquad (II.\ 3.\ 37)$$

dobijamo:

$$b = \frac{\mathcal{E}^2-\Delta^2}{2\mathcal{E}\Theta}\left[1 + \frac{\Delta^2}{2\mathcal{E}\Theta} - \left(\frac{\mathcal{E}^2-\Delta^2}{2\mathcal{E}\Theta}\right)^2\right]$$

Zamenjujući izraz $\left(\frac{\mathcal{E}^2-\Delta^2}{2\mathcal{E}\Theta}\right)^2$ imamo:

$$b=\frac{\mathcal{E}^2-\Delta^2}{2\mathcal{E}\Theta}\left(1+\frac{\Delta^2}{2\mathcal{E}\Theta}\right)\cong\frac{\mathcal{E}^2-\Delta^2}{2\mathcal{E}\Theta}\frac{1}{1-\frac{\Delta^2}{2\mathcal{E}\Theta}} \qquad (II.\ 3.\ 38)$$

Ako uvedemo kritičnu temperaturu na kojoj parametar uredjenosti dobija singularitet

$$\Theta_c=\frac{\Delta^2}{2\mathcal{E}} \qquad (II.\ 3.\ 39)$$

izraz za b može se napisati kao:

$$b=\left(\frac{1}{2}\mathcal{E}-\Theta_c\right)\frac{1}{\Theta-\Theta_c} \qquad (II.\ 3.\ 40)$$

Kao što vidimo parametar uredjenosti superprovodnika ponaša se analogno magnetnoj susceptibilnosti tj. po zakonu koji predstavlja analogiju Kiri - Vajsovog zakona. To znači da je fazni prelaz iz superkonduktivnog stanja u stanje obične provodljivosti u stvari fazni prelaz druge vrste.

Kombinujući formule (II. 3. 24) i (II. 3. 40) za energiju dobijamo izraz:

$$E=\mathcal{E}-2\Theta_c+\frac{1}{2}\frac{\Delta^2-4\Theta_c^2}{\Theta-\Theta_c} \qquad (II.\ 3.\ 41)$$

kao što vidimo i energija ima singularitet za $\Theta=\Theta_c$.

Veza izmedju kritične temperature i superkonduktivnog gepa Δ data je sa

$$\Theta_c=\frac{\Delta^2}{2\sqrt{P_G^2 V_F^2+\Delta^2}} \qquad (II.\ 3.\ 42)$$

Ovu formulu možemo analizirati u dva granična slučaja. U prvom graničnom slučaju predpostavićemo da je

$$P_G V_F \gg \Delta \qquad \text{(II. 3. 43)}$$

tada se formula (II. 3. 42) svodi na

$$\Theta_c^{(1)} = \frac{\Delta^2}{2 P_G V_F} \qquad \text{(II. 3. 44)}$$

Kao što vidimo Θ_c je veće i superprovodnik ostaje superprovodan do viših temperatura ako je gep veći a debljina impulsnog sloja P_G i brzina elektrona na fermi sferi V_F manji.

Razmotrimo sada drugi granični slučaj (koji se u praksi dosta retko realizuje) a to je:

$$\Delta \gg P_G V_F \qquad \text{(II. 3. 45)}$$

Tada na osnovu (II. 3. 42) dobijamo

$$\Theta_c^{(2)} = \frac{\Delta}{2} \qquad \text{(II. 3. 46)}$$

Kao što vidimo u ovom graničnom slučaju kritična temperatura ne zavisi od P_G i V_F već samo od veličine gep i to raste sa porastom gepa.

U ovom graničnom slučaju formula za parametar uredjenosti, pošto možemo uzeti $\mathcal{E} \approx \Delta$ postaje:

$$\sigma = th \frac{\Delta \sigma}{2\Theta} \qquad \text{(II. 3. 47)}$$

U oblasti visokih temperatura je $\sigma \approx 0$, pa se $th \frac{\Delta\sigma}{2\Theta}$ može razviti u red:

$$th \frac{\Delta \sigma}{2\Theta} \cong \frac{\Delta \sigma}{2\Theta} - \frac{1}{3}\left(\frac{\Delta}{2\Theta}\right)^3 \sigma^3 \qquad \text{(II. 3. 48)}$$

Zamenom (II. 3. 48) u (II. 3. 47) dobijamo:

$$b = \sqrt{3\left(\frac{2\theta}{\Delta}\right)^2}\sqrt{\frac{\Delta}{2\theta}-1}$$

što se svodi na

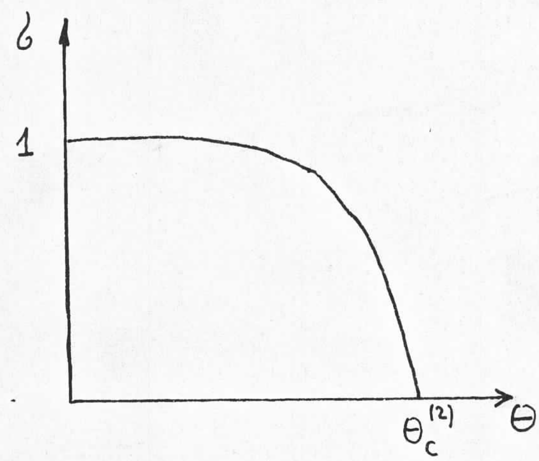
$$b = \sqrt{3}\sqrt{\frac{\theta_c^{(2)}}{\theta}-1} \qquad \text{(II. 3. 49)}$$

Odavde se lako vidi da je:

$$\left(\frac{\partial b}{\partial \theta}\right)_{\theta=\theta_c} \longrightarrow \infty \qquad \text{(II. 3. 50)}$$

i na osnovu ovoga vidimo da je fazni prelaz u superprovodniku ustvari fazni prelaz druge vrste i da je u potpunosti analogan faznom prelazu iz feromagnetne u paramagnetnu fazu.

Izraz (II. 3. 49) grafički se može predstaviti na sledeći način:



Z A K L J U Č A K

Osnovni rezultati ovde izvršenih analiza mogu se ukratko izložiti na sledeći način:

1) Ocena mogućnosti egzistencije superprovodnog stanja, može se izvršiti daleko prostije nego što je to Frelih učinio u svom originalnom radu, i to primenom metoda teorije perturbacije. Ovo ima praktični značaj naročito u onim slučajevima kada do superprovodnog stanja može da dovede interakcija elektrona sa nekim drugim elementarnim ekscitacijama, a ne samo sa fononima.

2) Model Bardina, Kupera i Šrifera analiziran je u novoj, paulionskoj reprezentaciji i ova je omogućila da se termodinamička svojstva superprovodnika ispitaju sa mnogo manje matematičkih komplikacija.

3) Rezultati termodinamičke analize pokazuju da se može provesti puna analogija izmedju feromagnetika i superprovodnika. Kod superprovodnika postoji analog Kiri - Vajsovog zakona, a u izvesnim slučajevima i analog faznog prelaza iz feromagnetne u paramagnetnu fazu. Baš zahvaljujući ovim analogijama nesumljivo je da fazni prelaz iz superprovodnog u normalno stanje predstavlja fazni prelaz druge vrste.

4) Što se tiče mogućnosti realizacije visoko temperaturskog superprovodnika, rezultati koji su ovde do-

bijeni pokazuju da treba ići na konstrukciju takvih materijala kod kojih zavisnost energije superprovodnik ekscitacija od veličine fermi sfere i veličine Debajevske frekvence treba da bude veoma slaba.

MATEMATIČKI DODATAK

Elementi teorije dvovremenskih temperaturskih funkcija Grina

Funkcija Grina za dva operatora $A(\vec{r},t)$ i $B(\vec{r}',t')$ definiše se na sledeći način:

$$\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = \theta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle \tag{A. 1. 1}$$

Gde simbol $\langle\langle \ldots \rangle\rangle$ označava uredjivanje operatora po vremenu i oznaku srednje vrednosti po Gibs-ovom ansamblu tj.

$$\langle\hat{F}\rangle = \frac{S_p \hat{F} e^{-\beta\hat{H}}}{S_p e^{-\beta H}}$$

$\beta = K_B T$; H - hamiltonijan sistema a $\Theta(t-t')$ je Hevisajdova funkcija, definisana na sledeći način:

$$\Theta(t-t') = \begin{cases} 1 & \text{za } t>t' \\ 0 & \text{za } t<t' \end{cases} \tag{A. 1. 2}$$

Diferencirajući (A. 1. 1) jednom po t a drugi put po t' i uzimajući u obzir da je izvod Hevisajdove funkcije δ funkcija dobijamo respektivno:

$$\frac{d}{dt}\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = \delta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle +$$

$$+\Theta(t-t')\langle[\frac{d}{dt}\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle$$

$$\frac{d}{dt'}\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = -\delta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle +$$

$$+\theta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t)\frac{d}{dt'}\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle$$

Na osnovu Hajzenbergovih jednačina kretanja imamo:

$$i\frac{d\hat{A}(\vec{r},t)}{dt}=[\hat{A},\hat{H}]_t \;;\; i\frac{d\hat{B}(\vec{r}',t')}{dt'}=[\hat{B},\hat{H}]_{t'}$$

pa se poslednje dve jednačine svode:

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle\hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle=i\delta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle+$$

$$+\theta(t-t')\langle[[\hat{A},\hat{H}]_t,\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle$$

(A. 1. 3)

$$i\frac{d}{dt'}\langle\langle\hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle=-i\delta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t)]\rangle$$

$$+\theta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),[\hat{B},\hat{H}]_{t'}\rangle$$

(A. 1. 4)

izrazi

$$\theta(t-t')\langle[[\hat{A},\hat{H}]_t,\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle$$

i

$$\theta(t-t')\langle[\hat{A}(\vec{r},t),[\hat{B},\hat{H}]_{t'}]\rangle$$

predstavljaju na osnovu polazne definicije (A. 1. 1) neke nove funkcije Grina, tako da jednačine (A. 1. 3) i (A. 1. 4) glase:

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle\hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle=i\delta(t-t')K(\vec{r}-\vec{r}')\;+$$

$$+\langle\langle [\hat{A},\hat{H}]_{\vec{r},t} | \hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle$$

(A. 1. 5)

$$i\frac{d}{dt'}\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = -i\delta(t-t')K(\vec{r}-\vec{r}') +$$

$$+ \langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|[\hat{B},\hat{H}]_{\vec{r}',t'}\rangle\rangle \tag{A. 1. 6}$$

gde je:

$$K(\vec{r}-\vec{r}') = \langle [\hat{A}(\vec{r},t),\hat{B}(\vec{r}',t')]\rangle$$

(A. 1. 7)

Ako izvršimo Furije transformacije:

$$\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3\vec{P}dE\,\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{P}} \times$$

$$\times\, e^{i\vec{P}(\vec{r}-\vec{r}')-iE(t-t')}$$

$$\langle\langle [\hat{A},\hat{H}]_{\vec{r},t}|\hat{B}(\vec{r}',t')\rangle\rangle = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3\vec{P}dE\,\langle\langle [\hat{A},\hat{H}]|\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{P}} \times$$

$$\times\, e^{i\vec{P}(\vec{r}-\vec{r}')-iE(t-t')}$$

$$\langle\langle \hat{A}(\vec{r},t)|[\hat{B},\hat{H}]_{\vec{r}',t'}\rangle\rangle = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3\vec{P}dE\,\langle\langle \hat{A}|[\hat{B},\hat{H}]\rangle\rangle_{E,\vec{P}} \times$$

$$\times\, e^{i\vec{P}(\vec{r}-\vec{r}')-iE(t-t')}$$

$$K(\vec{r}-\vec{r}\,')=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{p}\,K(\vec{p})\,e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}\,')}$$

$$\delta(t-t')=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dE\,e^{iE(t-t')}$$

i ovo uvrstimo u (A. 1. 5) i (A. 1. 6) dobijamo osnovni sistem jednačina za funkcije Grina u obliku:

$$E\langle\langle\hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{p}}=\frac{i}{2\pi}K(\vec{p})+\langle\langle[\hat{A},\hat{H}]|\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{p}} \tag{A. 1. 8}$$

$$E\langle\langle\hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{p}}=\frac{i}{2\pi}K(\vec{p})-\langle\langle\hat{A}|[\hat{B},\hat{H}]\rangle\rangle_{E,\vec{p}} \tag{A. 1. 9}$$

U ovim jednačinama $\vec{P}$ predstavlja impuls. U praksi se može koristiti ili jednačina (A.1.8) ili jednačina (A.1.9), a nekada je zgodno kombinovati obadve. Sam način rešavanja sastoji se obično u tome da se funkcija Grina koja figuriše na desnoj strani jednačine (A. 1. 8) nekom opravdanom aproksimacijom izrazi preko funkcije koja figuriše na levoj strani jednačine (A. 1. 8) i da se na taj način u jednačini pojavi samo jedna funkcija Grina po kojoj se može jednačina rešiti.

Realni deo pola funkcije Grina $\langle\langle\hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{p}}$ u E ravni predstavlja energiju elementarnih ekscitacija, a imaginarni deo pola u kompleksnoj ravni predstavlja recipročno vreme života elementarnih ekscitacija.

Od interesa je da se definiše spektralna intenzivnost funkcije Grina $\langle\langle\hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle_{E,\vec{p}}$ i ona ima oblik:

$$\mathcal{J}(\vec{P},E)=\frac{K(\vec{P})}{e^{\frac{E}{\Theta}}-1}\,\delta(E-E_{\vec{k}}) \qquad \text{(A. 1. 10)}$$

gde je: $\Theta = K_B T$

i $E_{\vec{k}}$ - realni deo pola funkcije Grina.

Preko spektralne intenzivnosti može se naći srednja vrednost proizvoda dva operatora po Gips-ovom ansamblu i to na sledeći način:

$$\langle\hat{B}\hat{A}\rangle=\frac{S_p\hat{B}\hat{A}e^{-\beta\hat{H}}}{S_p e^{-\beta H}}=\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{J}(\vec{P},E)\,dE=\frac{K(\vec{P})}{e^{\frac{E_{\vec{k}}}{\Theta}}-1} \qquad \text{(A. 1. 11)}$$

Formula (A. 1. 11) omogućava nam da bilo kakav problem koji rešavamo metodom funkcije Grina rešimo u zatvorenoj formi, tj. pored poznavanja energije elementarnih ekscitacija i njihovog vremena života, mi na osnovu formule (A.1.11) regulišemo i pitanje statistike elementarnih ekscitacija.

LITERATURA

ɔоголюбов ЖЭТФ 34, 58 (1958)

ıоголюбов, В.В. Толмачев, Д.В. Ширков
ый метод в теории сверхпроводимости"
ва 1958

öhlich Proc. Roy. Soc. A215, 291-298 (1952)

rdeen, L. Cooper, J. Schreiffer
s. Rev. 108, 1175-1204 (1957)

Kuper Adv. Phys. 8, 29, 1-44 (1959)

Давыдов „Квантовая механика"
рМЛ Москва 1962