

Fyzika mnohých častíc

verzia 16.12.2020

Richard Hlubina
Univerzita Komenského Bratislava,
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

Predhovor

Čo už treba vedieť

Táto prednáška voľne nadväzuje na bakalársku prednášku *Úvod do fyziky materiálov* a magisterské prednášky *Štruktúra a mechanické vlastnosti materiálov* a *Elektrické a optické vlastnosti materiálov*. Prednáška beží paralelne s prednáškou *Magnetické vlastnosti tuhých látok a supravodivosť*, ktorá sa venuje podobným fyzikálnym systémom, ale z iného zorného uhla. Z technického hľadiska nevyžadujeme žiadne špeciálne poznatky, okrem znalosti formalizmu druhého kvantovania a metódy Hartreeho-Focka.

Čo sa možno naučíte

V týchto prednáškach sledujeme dvojaké ciele. Prvou úlohou je zasadiť už známe výsledky do všeobecnejšieho rámca, v ktorom kľúčovú úlohu hrajú pojmy **narušenia symetrie** a **adiabatickej kontinuity**. Druhou úlohou je demonštrovať použitie spomínaných pojmov pri štúdiu magnetizmu, supratekutosti a supravodivosti.

Odkazy na iné texty

V prednáške sa odvolávam na nasledovné texty z iných úrovní:

“Úvod do fyziky tuhých látok”: prednáška číslo n citovaná ako I. n

“Elektrické a optické vlastnosti tuhých látok”: prednáška číslo n citovaná ako II. n

“Teória kondenzovaných látok”: prednáška číslo n citovaná ako IV. n

Poznámka o voľbe jednotiek a o konvenciách

1. V skriptách používame jednotky SI. Jedinou výnimkou je absolútna teplota, ktorú chápeme ako veličinu s rozmerom energie.
2. Náboj elektrónu označujeme $-e$, t.j. predpokladáme, že $e > 0$.
3. Pod frekvenciou rozumieme kruhovú frekvenciu.

Podmienky na udelenie kreditov

Ak ide o výberový predmet:

séria 20 domácich úloh; za každú sériu možno získať maximálne 1 bod

Ak ide o povinne voliteľný predmet:

ústna skúška; maximálne 20 bodov

Hodnotenie:

A: ≥ 18 bodov

B: ≥ 16 bodov

C: ≥ 14 bodov

D: ≥ 12 bodov

E: ≥ 10 bodov

FX: < 10 bodov

Obsah

1	Efektívne modely	4
2	Symetrie a zákony zachovania	7
3	Heisenbergov model: exaktné výsledky	11
4	Heisenbergov model: spinové vlny	15
5	Heisenbergov model: spontánne narušenie symetrie	19
6	Magnetická anizotropia a Isingov model	23
7	Model XY a kvantová kvapalina spinov	26
8	Zovšeobecnená tuhosť	29
9	Prechod Kosterlitz-Thoulessa	33
10	Supratekuté hélium	37
11	Josephsonove rovnice	40
12	Teória Bogolubova	44
13	Teória Bogolubova a supratekuté hélium	48
14	Supravodivosť: základné fakty	52
15	Supravodivosť: efektívna interakcia	58
16	Cooperova nestabilita a renormalizačná grupa	62
17	Teória BCS	66
18	Termodynamika supravodičov	70
19	Spektroskopia supravodičov	74
20	Topologické defekty	79
21	Topologické izolanty	83
22	Záver	87
23	Dodatok	92
24	Literatúra	96

1 Efektívne modely

V tejto prednáške zavedieme pojem podstatných a nepodstatných stupňov voľnosti. Ukážeme tiež, že eliminácia nepodstatných stupňov voľnosti vo všeobecnosti mení tvar modelu pre podstatné stupne voľnosti.

Podstatné a nepodstatné stupne voľnosti

Pri riešení konkrétnych fyzikálnych úloh vždy postupujeme tak, že vesmír rozdelíme na skúmaný systém a na okolie. Predpokladáme pritom, že stupne voľnosti popisujúce okolie sú nepodstatné a preto ich do našich úvah nezahŕňame. Podstatnými sú potom stupne voľnosti skúmaného systému.

Často sa však používa aj menej triviálna deľba stupňov voľnosti na podstatné a nepodstatné. Vo fyzike tuhých látok napríklad obvykle neprihliadame na to, že jadrá pozostávajú z nukleónov a tie zase z kvarkov. Vnútorne stupne voľnosti jadier pokladáme za irelevantné, pretože sa obvykle zaujímame o procesy pri takých excitačných energiách (alebo teplotách), pri ktorých môžeme predpokladať, že jadrové stupne voľnosti sú v ich základnom stave.¹ Z toho istého dôvodu pri štúdiu elektrónových vlastností obvykle môžeme zanedbať prítomnosť plne obsadených hlboko ležiacich a celkom prázdnych vysoko ležiacich pásov.

Efektívny model

Vráťme sa na chvíľu k problému semiklasickej dynamiky elektrónov, ktorý sme skúmali v II.3. V jedoelektrónovom priblížení máme riešiť Schrödingerovu rovnicu (SchR) s hamiltoniánom

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x}) + U(\mathbf{x}),$$

kde $V(\mathbf{x})$ je periodický mriežkový potenciál a $U(\mathbf{x})$ je slabé vonkajšie pole. V II.3 sme ukázali, že v dostatočne slabých poliach sa možno obmedziť na pohyb vnútri jedného pásu a výsledkom eliminácie ostatných pásov je možnosť popísať pohyb elektrónu novým (tzv. efektívnym) hamiltoniánom

$$H_{\text{eff}} = \varepsilon_n(-i\nabla) + U(\mathbf{x}),$$

kde $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ je disperzný zákon ponechaného pásu n . Všimnime si, že pri eliminácii nepodstatných stupňov voľnosti (v našom prípade Wannierových orbitálov pre pásy $m \neq n$) došlo k zmene tvaru hamiltoniánu pre ponechané stupne voľnosti (Wannierove orbitály pásu n).

K zmene tvaru modelu pri eliminácii stupňov voľnosti dochádza prakticky vždy. Ďalším nám už známym príkladom je napríklad eliminácia fonónových stupňov voľnosti vo zviazanom elektrón-fonónovom probléme, ktorej výsledkom bola renormalizácia spektra elektrónov v blízkosti Fermiho plochy, pozri II.16. Systematickou procedúrou na elimináciu nepodstatných stupňov voľnosti je tzv. renormalizačná grupa, ktorej hlavnú ideu vyložíme v kapitole 16.

Efektívny model pre Mottov-Hubbardov izolant

Vo zvyšku tejto prednášky preskúmame konštrukciu efektívneho modelu v jednoduchej situácii, kedy elimináciu nepodstatných stupňov voľnosti možno vykonať priamočiarou aplikáciou poruchovej teórie.

Skúmame materiál s nedegenerovaným valenčným pásom popísaným Hubbardovým hamiltoniánom

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} \left(c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

kde operátory $c_{i\sigma}^{\dagger}$ a $c_{i\sigma}$ kreujú a anihilujú elektróny vo Wannierovom orbitáli v bode i mriežky. Wannierove orbitály v rôznych bodoch mriežky sú navzájom ortogonálne a tunelovaciu amplitúdu medzi najbližšími bodmi mriežky $\langle ij \rangle$ sme označili t . Predpokladali sme tiež, že Coulombova interakcia je extrémne tienená: konečné odpudzovanie U existuje iba pre elektróny na tom istom bode mriežky.

Predpokladajme navyše, že počet elektrónov N vo valenčnom páse je totožný s počtom $\mathcal{N}$ mriežkových bodov, $N = \mathcal{N}$, a že model sa nachádza v limite silnej väzby $t \ll U$. V takom prípade je prirodzené

¹Tento argument neplatí pre jadrá s nenulovým spinom. V tomto prípade sú však rôzne natočenia jadrových spinov tiež väčšinou irelevantné, okrem prípadov kedy skúmame napr. jadrovú magnetickú rezonanciu alebo jadrový magnetizmus.

za neporušenú časť hamiltoniánu vziať operátor $H_0 = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$. Spektrum neporušeného problému teda vyzerá nasledovne:

- $E = 0$: každý bod mriežky obsadený práve jedným elektrónom; táto degenerovaná hladina obsahuje 2^N spinových konfigurácií $|\mu\rangle$
- $E = U$: oproti $E = 0$ mriežka obsahuje jeden dvojnásobne obsadený bod (dublón) a jeden prázdny bod (holón); degenerovaná hladina
- $E = 2U$: oproti $E = U$ mriežka obsahuje ďalší holón-dublónový pár; degenerovaná hladina
- ...

Očakávame, že kinetická energia $H' = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma})$ sníme degenerácie jednotlivých hladín, ale pre malé t základný stav zostane izolantom.

Poruchová teória v degenerovanom prípade

Nech $|\mu\rangle$ sú vlastné stavy neporušeného hamiltoniánu H_0 s energiou $E_{\mu} = 0$ a nech $|n\rangle$ sú všetky ostatné vlastné stavy H_0 s energiami $E_n > 0$. Vlastné stavy $|\psi\rangle$ hamiltoniánu H , t.j. stavy spĺňajúce SchR $H|\psi\rangle = \mathcal{E}|\psi\rangle$ s vlastnou energiou $\mathcal{E}$ rozviňme do úplného systému stavov

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu} c_{\mu} |\mu\rangle + \sum_n c_n |n\rangle.$$

Dosadením tohto rozvoja do SchR dostaneme systém rovníc pre koeficienty c_{μ} a c_n :

$$(\mathcal{E} - E_{\mu})c_{\mu} = \sum_{\mu'} H'_{\mu\mu'} c_{\mu'} + \sum_n H'_{\mu n} c_n, \quad (2)$$

$$(\mathcal{E} - E_n)c_n = \sum_{\mu'} H'_{n\mu'} c_{\mu'} + \sum_{n'} H'_{nn'} c_{n'}, \quad (3)$$

kde sme zaviedli označenie $H'_{\mu\mu'} = \langle \mu | H' | \mu' \rangle$ a podobne pre ostatné kombinácie indexov.

Nášim cieľom je nájsť korekcie k energii E_{μ} do druhého rádu v t . Budeme predpokladať, že koeficienty c_{μ} sú veľké, rádu t^0 , kým ostatné koeficienty c_n sú nanajvýš rádu t^1 . O porušenej energii $\mathcal{E}$ budeme predpokladať, že korekcia $\mathcal{E} - E_{\mu}$ je nanajvýš rádu t^1 , a preto rozdiel $\mathcal{E} - E_n$ je veľký, rádu t^0 . Podľa rovnice (3) preto koeficient c_n do rádu t^1 možno písať ako

$$c_n \approx \frac{1}{\mathcal{E} - E_n} \sum_{\mu'} H'_{n\mu'} c_{\mu'} \approx \frac{1}{E_{\mu} - E_n} \sum_{\mu'} H'_{n\mu'} c_{\mu'}.$$

Dosadením tohto výsledku do rovnice (2) dostaneme rovnicu platnú do rádu t^2 :

$$(\mathcal{E} - E_{\mu})c_{\mu} = \sum_{\mu'} \left[H'_{\mu\mu'} + \sum_n H'_{\mu n} \frac{1}{E_{\mu} - E_n} H'_{n\mu'} \right] c_{\mu'}. \quad (4)$$

Táto rovnica určuje, ako sa pod vplyvom poruchy zmenia energie degenerovaných základných stavov $|\mu\rangle$: rôzne lineárne kombinácie popísané koeficientmi c_{μ} budú mať rôzne energie. Všimnime si, že rovnicu (4) možno zapísať ako SchR v podpriestore základných stavov, $[E_{\mu} + H_{\text{eff}}] |\psi\rangle = \mathcal{E} |\psi\rangle$, kde sme zaviedli nasledovný efektívny hamiltonián, ktorý pôsobí v podpriestore základných stavov:

$$H_{\text{eff}} = H' + \sum_n \frac{H' |n\rangle \langle n| H'}{E_{\mu} - E_n},$$

kde sumácia beží cez všetky excitované stavy $|n\rangle$. Úloha o rozštiepení degenerovanej hladiny sa teda redukuje na diagonalizáciu efektívneho Hamiltoniánu H_{eff} v podpriestore základných stavov. Tento podpriestor je obvykle podstatne menší ako celý Hilbertov priestor úlohy (pozri cvičenia).

Poruchová teória pre Hubbardov model

V Hubbardovom modeli pre všetky dvojice stavov $|\mu\rangle, |\mu'\rangle$ zo základného podpriestoru platí $\langle\mu'|H'|\mu\rangle = 0$. Naviac, $\langle n|H'|\mu\rangle \neq 0$ platí iba pre stavy $|n\rangle$ s práve jedným holón-dublónovým párom, preto energetický menovateľ v H_{eff} je zakaždým $E_n - E_\mu = U$. Pre maticové elementy efektívneho hamiltoniánu preto dostávame

$$\langle\mu'|H_{\text{eff}}|\mu\rangle = -\frac{1}{U} \sum_n \langle\mu'|H'|n\rangle \langle n|H'|\mu\rangle = -\frac{1}{U} \langle\mu'| (H')^2 |\mu\rangle,$$

kde v druhom kroku sme sumu cez $|n\rangle$ rozšírili na všetky stavy Hilbertovho priestoru (čím sme výsledok nezmenili!) a následne sme využili ich úplnosť. Na tomto mieste je vhodné si všimnúť, že operátor H' presúva elektróny pozdĺž liniek $\langle ij\rangle$. Je však zrejmé, že maticový element $\langle\mu'| (H')^2 |\mu\rangle$ bude nenulový, len ak jeden z operátorov H' presunie elektróny povedzme z bodu i do bodu j , kým druhý z operátorov H' ich vráti naspäť (spin elektrónov sa pritom môže preklopiť). Preto maticové elementy H_{eff} možno písať ako sumu operátorov na linkách $\langle ij\rangle$, t.j. $\langle\mu'|H_{\text{eff}}|\mu\rangle = \sum_{\langle ij\rangle} \langle\mu'|X_{ij}|\mu\rangle$, kde sme zaviedli operátor

$$X_{ij} = -\frac{t^2}{U} \sum_{\sigma, \sigma'} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{j\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} c_{i\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} \right).$$

Použitím komutačných vzťahov pre fermióny ďalej ľahko nahliadneme, že

$$-\sum_{\sigma, \sigma'} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{j\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} c_{i\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} \right) = 2 \sum_{\sigma, \sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{i\sigma'} - \sum_{\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \right).$$

Všimnime si, že maticové elementy druhého člena na pravej strane medzi všetkými dvojicami stavov $|\mu\rangle, |\mu'\rangle$ zo základného podpriestoru sú rovné -2 , preto v tomto podpriestore možno písať

$$X_{ij} = \frac{2t^2}{U} \sum_{\sigma, \sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma} c_{i\sigma'} - \frac{2t^2}{U}.$$

Keďže stavy $|\mu\rangle$ sú spinovými konfiguráciami, očakávame, že operátor X_{ij} sa bude dať alternatívne zapísať pomocou operátorov spinu $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} c_{i\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta}$.² Vhodnou voľbou sa zdá byť skalárny súčin $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$, pretože tento operátor nezávisí od voľby súradnicovej sústavy v spinovom priestore. Na jeho vyhodnotenie použijeme tzv. Fierzovu identitu $\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\gamma\delta} = 2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}$, pomocou ktorej dostaneme

$$\frac{4t^2}{U} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \frac{t^2}{U} \sum_{\alpha, \beta} \left(2c_{i\alpha}^\dagger c_{i\beta} c_{j\beta}^\dagger c_{j\alpha} - c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} c_{j\beta}^\dagger c_{j\beta} \right) \rightarrow \frac{2t^2}{U} \sum_{\alpha, \beta} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta}^\dagger c_{j\alpha} c_{i\beta} - \frac{t^2}{U},$$

kde šípka znázorňuje rovnosť v podpriestore vlastných stavov. Porovnanie s výrazom pre X_{ij} teda dáva

$$X_{ij} = J \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right),$$

kde $J = 4t^2/U$. Efektívnym modelom pre Mottov-Hubbardov izolant (až na nezaujímavý konštantný posun energie) je teda antiferomagnetický Heisenbergov model

$$H_{\text{eff}} = J \sum_{\langle ij\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (5)$$

s výmennou konštantou J . Stojí za zmienku, že efektívny model (5) má celkom iný tvar ako pôvodný model (1): novými stupňami voľnosti sú kvantové spiny $1/2$, kým pôvodnými stupňami voľnosti boli elektróny nesúce ako spin, tak aj náboj. Eliminované teda boli reálne nábojové fluktuácie a ponechali sme (do druhého rádu poruchovej teórie) iba virtuálne nábojové fluktuácie, ktoré generujú výmennú konštantu J .

²Pozri dodatok.

Hamiltonián (5) definuje tzv. Heisenbergov model. Pre $J > 0$ treba očakávať, že susedné spiny majú tendenciu usporiadať sa navzájom protibežne. V takomto prípade hovoríme o antiferomagnetickom Heisenbergovom modeli (AFMH model).

Cvičenia

1. Ukážte, že operátory $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2}c_{i\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta}$ spĺňajú komutačné vzťahy pre moment hybnosti.
2. Dokážte Fierzovu identitu.
3. Porovnajme vysokoteplotné entropie pre nasledujúce modely s $\mathcal{N} \gg 1$ mriežkovými bodmi: (a) Heisenbergov model, (b) Hubbardov model pri polovičnom zaplnení. Návod: použite Stirlingov vzorec.
4. Ukážte, že Lennardovu-Jonesovu interakciu možno chápať ako efektívnu interakciu medzi atómami inertných plynov. Ktoré stupne voľnosti sme pritom zanedbali? Ako vyzerá pôvodný hamiltonián obsahujúci aj zanedbané stupne voľnosti?

2 Symetrie a zákony zachovania

V tejto prednáške vysvetlíme, čo rozumieme pod symetriou systému a popíšeme fyzikálne dôsledky symetrií. Nakoniec preskúame symetrie AFMH modelu.

Transformácia stavov systému

Stavy skúmaného systému označme $|\psi\rangle$. Pri manipulácii so systémom (napríklad pri otočení alebo posunutí) sa stavy systému navzájom transformujú. V Zelenej učebnici (kapitola 13) sa táto zmena interpretuje tak, že otočené alebo posunuté prístroje vyrábajú otočené alebo posunuté stavy. Zmena stavov pri manipulácii nech je popísaná operátorom U , t.j. stav $|\psi\rangle$ nech sa transformuje na stav $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$. V našich úvahách sa obmedzíme na skúmanie tzv. globálnych manipulácií, ktoré nemenia vzdialenosti medzi časticami. Nezaujíma sa teda napr. o permutácie identických častíc.

Pred manipuláciou bola pravdepodobnosť, že systém pripravený v stave $|\psi\rangle$ nájdeme v stave $|\phi\rangle$, daná štvorcom $|\langle\phi|\psi\rangle|^2$ prekryvu týchto stavov. Po manipulácii sa táto pravdepodobnosť nemá zmeniť, teda pre všetky dvojice stavov $|\psi\rangle$ a $|\phi\rangle$ má platiť

$$|\langle\phi'|\psi'\rangle|^2 = |\langle\phi|\psi\rangle|^2.$$

Podľa Wignerovej vety existujú len 2 možnosti: alebo je operátor U unitárny a pri vhodnej voľbe fáz platí $\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$, alebo je operátor U antiunitárny a pri vhodnej voľbe fáz platí $\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\phi\rangle$. V unitárnom prípade je U lineárny operátor a z podmienky $\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi|U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$ vyplýva $U^\dagger U = UU^\dagger = 1$.³ Antiunitárnemu prípadu sa budeme podrobnejšie venovať neskôr.

Ak manipulácia U parametricky závisí od jednej alebo viacerých spojitých premenných, potom takúto manipuláciu nazývame spojitou. Na druhej strane, ak existuje nanajvýš spočítateľný počet manipulácií U daného typu, takéto manipulácie nazveme diskretnými.

Množina manipulácií spolu s operáciou skladania vytvára grupu.⁴ Spojité manipulácie nutne obsahujú identitu $U = 1$ ako limitný prípad. Ale operátor $U = 1$ je unitárny, preto pre všetky spojitú manipulácie musí byť operátor U unitárny. Antiunitárnymi operátormi U teda môžu byť popísané iba diskretné manipulácie. Najdôležitejším príkladom manipulácie s antiunitárnym U je tzv. inverzia času, ktorej sa budeme venovať neskôr. Až do odvolania preto budeme predpokladať, že operátor U je unitárny.

Nech maticové elementy operátora X pred manipuláciou sú $\langle\chi|X|\psi\rangle$. Aby sa tieto maticové elementy pri manipulácii nezmenili, musí platiť, že po manipulácii veličine X zodpovedá operátor $X' = UXU^\dagger$. Naozaj, v takom prípade bude platiť

$$\langle\chi'|X'|\psi'\rangle = \langle\chi|U^\dagger X' U|\psi\rangle = \langle\chi|U^\dagger U X U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\chi|X|\psi\rangle,$$

³Výsledok $UU^\dagger = 1$ vyplýva z pozorovania, že $U^\dagger$ je ľavou inverznou maticou k U a zo známej skutočnosti, že pravá a ľavá inverzná matica sú totožné.

⁴Striktne vzaté, treba rozlišovať medzi manipuláciami (s prvkami g) a operátormi $U(g)$. Grupou vytvárajú manipulácie g , kým operátory $U(g)$ tvoria (vo všeobecnom prípade iba tzv. projektívnu) reprezentáciu tejto grupy, pozri Zelenú učebnicu, str. 405.

kde v poslednom kroku sme využili, že U je unitárny operátor.

Symetria fyzikálneho systému

Skúmaný systém vyhlásime za symetrický voči manipulácii U , ak sa jeho hamiltonián pri tejto manipulácii nezmení, t.j. ak platí $H' = UHU^\dagger = H$, alebo ekvivalentne $[U, H] = 0$. Manipuláciu U , voči ktorej je systém symetrický, nazývame symetriou systému.

Príklady: posunutie a otočenie systému

Teraz ukážeme, že ak $\mathbf{P}$ je operátor celkovej hybnosti študovaného systému, potom operátor posunutia o $\mathbf{a}$ možno vyjadriť v tvare $T(\mathbf{a}) = e^{i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar}$. Začnime prípadom jednej bezspinovej častice v $\mathbf{x}$ -reprezentácii. Nech stav pred posunutím je popísaný vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{x})$ a stav po posunutí má vlnovú funkciu $\psi(\mathbf{x} + \mathbf{a})$. Posunutú vlnovú funkciu možno dostať Taylorovým rozvojom pôvodnej vlnovej funkcie:

$$\psi(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = \psi(\mathbf{x}) + (\mathbf{a} \cdot \nabla) \psi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2!} (\mathbf{a} \cdot \nabla)^2 \psi(\mathbf{x}) + \dots = e^{\mathbf{a} \cdot \nabla} \psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}/\hbar} \psi(\mathbf{x}),$$

pretože $\mathbf{P} = -i\hbar \nabla$. Dôkaz pre N -časticovú vlnovú funkciu $\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ beží analogicky:

$$\psi(\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}, \dots, \mathbf{x}_N + \mathbf{a}) = e^{\mathbf{a} \cdot \sum_{i=1}^N \nabla_i} \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = e^{i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}/\hbar} \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N),$$

pretože $\mathbf{P} = -i\hbar \sum_{i=1}^N \nabla_i$. Ak má byť študovaný systém symetrický voči všetkým posunutiam, musí pre všetky $\mathbf{a}$ operátor posunutia komutovať s hamiltoniánom, $[T(\mathbf{a}), H] = 0$. Napríklad voľbou infinitesimálne malých posunutí o $\mathbf{a}$ ľahko ukážeme, že potom musia všetky komponenty operátora hybnosti komutovať s hamiltoniánom, $[\mathbf{P}, H] = 0$. Stredné hodnoty operátorov, ktoré komutujú s hamiltoniánom, sa však v čase nemenia. Teda v translačne invariantnom systéme je hybnosť zachovávacou sa veličinou⁵ a vlastné stavy takýchto systémov možno zvoliť tak, že sú zároveň vlastnými stavmi operátora celkovej hybnosti.

Analogickým postupom možno ukázať, že v systémoch s operátorom celkového momentu hybnosti $\mathbf{J}$ je $R(\boldsymbol{\alpha}) = e^{i\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{J}/\hbar}$ operátorom otočenia o uhol α okolo osi v smere vektora $\boldsymbol{\alpha}$. Ak je študovaný systém symetrický voči otočeniam, vzťah $[R(\boldsymbol{\alpha}), H] = 0$ musí platiť pre všetky $\boldsymbol{\alpha}$. Preto musí platiť $[\mathbf{J}, H] = 0$ pre všetky zložky $\mathbf{J}$. Keďže (na rozdiel od hybnosti) zložky operátora momentu hybnosti navzájom nekomutujú, v rotačne symetrickom systéme sa nemôžu súčasne zachovať všetky zložky $\mathbf{J}$. Vlastné stavy systému však možno charakterizovať veľkosťou momentu hybnosti $\mathbf{J}^2$ a jednou z jeho zložiek, povedzme J^z , pretože platí $[H, \mathbf{J}^2] = [H, J^z] = [J^z, \mathbf{J}^2] = 0$.

Výsledky pre posunutie a otočenie možno zovšeobecniť: vo funkcionálnej analýze sa ukazuje, že každý unitárny operátor U možno zapísať v tvare $U = e^{iA}$, kde A je hermitovský operátor. Preto ak U je symetriou systému, potom platí $[A, H] = 0$ a veličina popísaná operátorom A sa zachováva (je tzv. integrálom pohybu).

Spektrálne dôsledky symetrie

Najprv dokážeme fyzikálne očividné tvrdenie, že ak sú dva vlastné stavy systému zviazané operáciou symetrie, potom ich vlastné energie musia byť rovnaké. Naozaj, nech $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ a nech $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Počítajme energiu stavu $|\psi'\rangle$:

$$H|\psi'\rangle = HU|\psi\rangle = UH|\psi\rangle = UE|\psi\rangle = E|\psi'\rangle,$$

kde sme v druhom kroku využili, že $[U, H] = 0$. Teória reprezentácií nám (pre známu grupu symetrie) naviac umožňuje povedať, aké sú možné degenerácie (t.j. násobnosti) energetických hladín. Možné degenerácie sú pritom dané iba grupou symetrie systému a nezávisia od explicitného tvaru hamiltoniánu.

Druhý výsledok, ktorý dokážeme, možno použiť na redukciu numerickej náročnosti riešenia Schrödingerovej rovnice pre systémy s integrálmi pohybu A . Ukážeme, že maticové elementy hamiltoniánu medzi stavmi s rôznymi vlastnými hodnotami $\alpha \neq \beta$ operátora A (t.j. medzi stavmi "s rôznymi symetriami") sú nulové. Naozaj, nech $A|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle$ a $A|\phi\rangle = \beta|\phi\rangle$. Počítajme maticový element

⁵Niekedy máme do činenia so systémami, ktoré sú symetrické pri posunutí iba v niektorých smeroch. Zložky hybnosti sa potom zachovávajú iba v symetrických smeroch.

$\langle \phi | [A, H] | \psi \rangle = \langle \phi | (AH - HA) | \psi \rangle$. Pretože A je integrálom pohybu, výsledkom musí byť 0. Ak však využijeme, že stavy $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ sú vlastnými stavmi A , z druhého vyjadrenia dostaneme

$$0 = (\alpha - \beta) \langle \phi | H | \psi \rangle.$$

Ale keďže $\alpha \neq \beta$, musí byť $\langle \phi | H | \psi \rangle = 0$, v zhode s naším očakávaním. Preto hamiltonián možno diagonalizovať postupne v podpriestoroch s rôznymi symetriami. Podobne ako pri diskusii o degenerácii hladín, teória reprezentácií umožňuje podobné úvahy dotiahnuť oveľa ďalej.

Priestorová inverzia

Mnoho fyzikálnych úloh, napríklad tá o pohybe elektrónu v atóme vodíka, vykazujú tzv. symetriu voči priestorovej inverzii. Ide o príklad diskkrétnej symetrie popísanej unitárnym operátorom U_P . Žiadame, aby transformačné vlastnosti operátorov polohy, hybnosti a spinu častice i pri priestorovej symetrii boli nasledovné:

$$\mathbf{r}'_i = U_P \mathbf{r}_i U_P^\dagger = -\mathbf{r}_i, \quad \mathbf{p}'_i = U_P \mathbf{p}_i U_P^\dagger = -\mathbf{p}_i, \quad \mathbf{S}'_i = U_P \mathbf{S}_i U_P^\dagger = \mathbf{S}_i. \quad (6)$$

Pôsobenie na operátory $\mathbf{r}_i$ a $\mathbf{p}_i$ je prirodzené: pri invertovaní zmenia znamienko všetky polohy (merané od centra inverzie). Následne zmenia znamienko aj rýchlosti častíc. Pre moment hybnosti $\mathbf{L}_i = \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i$ preto musí platiť $U_P \mathbf{L}_i U_P^\dagger = \mathbf{L}_i$ a transformačné vlastnosti spinu sú dôsledkom pozorovania, že spin je vnútorný moment hybnosti. Vektory, ktoré pri inverzii menia znamienko, nazývame polárnymi, kým vektory nemeniace znamienko nazývame axiálnymi.

Stojí za zmienku, že komutačné vzťahy medzi transformovanými polohami $\mathbf{r}'_i$ a hybnosťami $\mathbf{p}'_i$ sú rovnaké ako vzťahy medzi $\mathbf{r}_i$ a $\mathbf{p}_i$ v neinvertovanom systéme, $[\mathbf{r}'_i, \mathbf{p}'_j] = [\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_j]$, ako aj má byť.

Keďže dve po sebe nasledujúce inverzie zodpovedajú identickej transformácii, žiadame, aby platilo $U_P^2 = 1$, čiže $U_P^{-1} = U_P$. Ale z unitarity vyplýva, že $U_P^{-1} = U_P^\dagger$, teda $U_P = U_P^\dagger$ a operátor U_P je hermitovský. Tento operátor preto zodpovedá fyzikálnej veličine - (priestorovej) parite.

Ak pre nejaký problém platí, že jeho hamiltonián H zapísaný pomocou dynamických premenných $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{p}_i$ a $\mathbf{S}_i$ sa pri priestorovej inverzii (voči pevne zvolenému počiatku) nezmení, t.j. ak platí $H = U_P H U_P^\dagger$, potom o tomto probléme povieme, že je symetrický voči inverzii. Vlastné stavy takéhoto systému možno charakterizovať vlastnou hodnotou P operátora U_P , tzv. paritou stavu. Ľahko nahliadneme, že prípustné sú iba dve hodnoty parity $P = \pm 1$. Naozaj, nech $U_P |\psi\rangle = P |\psi\rangle$. Potom $U_P^2 |\psi\rangle = P^2 |\psi\rangle$, ale keďže $U_P^2 = 1$, musí platiť $P^2 = 1$.

Nakoniec prepíšeme vzťahy (6) v jazyku druhého kvantovania pre elektróny. Za bázu jednočasticových stavov vezmeme Wannierove orbitály v mriežkových bodoch $\mathbf{R}$ a obmedzíme sa na stavy z jediného pásu. Nech pre jednoduchosť je parita Wannierových orbitálov (tzv. vnútorná parita) $P = +1$. Potom vzťahy (6) možno zapísať ako transformačné vzťahy pre kreačné a anihilačné operátory pre elektróny v orbitáli $\mathbf{R}$ a s priemetom spinu $\sigma = \pm 1$:

$$\left(c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger \right)' = U_P c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger U_P^\dagger = c_{-\mathbf{R}\sigma}^\dagger, \quad (c_{\mathbf{R}\sigma})' = U_P c_{\mathbf{R}\sigma} U_P^\dagger = c_{-\mathbf{R}\sigma}. \quad (7)$$

Ak naviac uvažíme, že fyzikálne vákuum má paritu 1, t.j. $U_P |0\rangle = |0\rangle$, vzťahy (7) nám povedia nielen ako sa transformujú operátory, ale aj stavy systému.

Obrátenie času

Ďalšou často študovanou diskrétnou manipuláciou je operácia otočenia času $\mathcal{T}$. Pri tejto manipulácii žiadame, aby platili nasledovné transformačné vzťahy pre operátory polohy, hybnosti a spinu častice i :

$$\mathbf{r}'_i = \mathcal{T} \mathbf{r}_i \mathcal{T}^\dagger = \mathbf{r}_i, \quad \mathbf{p}'_i = \mathcal{T} \mathbf{p}_i \mathcal{T}^\dagger = -\mathbf{p}_i, \quad \mathbf{S}'_i = \mathcal{T} \mathbf{S}_i \mathcal{T}^\dagger = -\mathbf{S}_i. \quad (8)$$

Pri otočení času v nejakom okamihu sa totiž v tomto okamihu nezmenia polohy častíc, ale iba ich rýchlosti. Následne zmenia znamienko aj momenty hybnosti $\mathbf{L}_i = \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i$, a preto žiadame aj zmenu znamienka spinu.

Je tu však problém: skúmame napríklad operátorovú identitu $[x, p] = i\hbar$ pre jednu z častíc. Po obrátení času sa operátor $[x, p]$ transformuje nasledovne: $\mathcal{T}[x, p]\mathcal{T}^\dagger = [\mathcal{T}x\mathcal{T}^\dagger, \mathcal{T}p\mathcal{T}^\dagger] = [x, -p] = -i\hbar$. Na druhej strane, ak by operátor $\mathcal{T}$ bol unitárny, potom by sa c-číslo $i\hbar$ pri obrátení času nezmenilo,

$\mathcal{T}i\hbar\mathcal{T}^\dagger = i\hbar$. Teda po obrátení času by sa rovnosť operátorov $[x, p]$ a $i\hbar$ narušila. Uvidíme, že tento problém možno odstrániť, ak budeme predpokladať, že operátor $\mathcal{T}$ je antiunitárny.

Antilineárne operátory

Operátor $\mathcal{A}$ pôsobiaci v Hilbertovom priestore nazveme antilineárnym, ak pre všetky dvojice stavov $|\phi\rangle, |\chi\rangle$ z Hilbertovho priestoru a pre všetky dvojice komplexných čísel α, β platí

$$\mathcal{A}(\alpha|\phi\rangle + \beta|\chi\rangle) = \alpha^*\mathcal{A}|\phi\rangle + \beta^*\mathcal{A}|\chi\rangle = \alpha^*|\mathcal{A}\phi\rangle + \beta^*|\mathcal{A}\chi\rangle,$$

kde sme stavy $\mathcal{A}|\phi\rangle$ (kde operátor $\mathcal{A}$ pôsobí doprava) označili skráteno $|\mathcal{A}\phi\rangle$. V tomto texte budeme zakaždým predpokladať, že antilineárny operátor pôsobí doprava.⁶

V Hilbertovom priestore zvolíme ľubovoľnú úplnú ortonormálnu bázu s prvkami $|n\rangle, |m\rangle, \dots$. V tejto báze môžeme písať $\mathcal{A}|n\rangle = \sum_m \mathcal{A}_{mn}|m\rangle$, kde c-čísla $\mathcal{A}_{mn}$ sú maticové elementy $\mathcal{A}_{mn} = \langle m|\mathcal{A}n\rangle$. Pôsobenie antilineárneho operátora $\mathcal{A}$ na všeobecný stav $|\phi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$ je potom dané vzťahom $\mathcal{A}|\phi\rangle = \sum_{m,n} c_n^* \mathcal{A}_{mn}|m\rangle$.

Antilineárny operátor $\mathcal{A}^\dagger$ hermitovsky združený k operátoru $\mathcal{A}$ definujeme jeho pôsobením na bázoové vektory, $\mathcal{A}^\dagger|n\rangle = \sum_m \mathcal{A}_{nm}|m\rangle$. Všimnime si, že táto definícia sa líši od definície operátora hermitovsky združeného k lineárnemu operátoru. Pôsobenie antilineárneho operátora $\mathcal{A}^\dagger$ na všeobecný stav $|\psi\rangle = \sum_n d_n|n\rangle$ je potom dané vzťahom $\mathcal{A}^\dagger|\psi\rangle = \sum_{m,n} d_n^* \mathcal{A}_{nm}|m\rangle$. Odtiaľto ľahko nahliadneme, že platí

$$\langle\phi|\mathcal{A}^\dagger\psi\rangle = \langle\psi|\mathcal{A}\phi\rangle. \quad (9)$$

Antiunitárne operátory

Antilineárny operátor $\mathcal{U}$, pre ktorý platí $\mathcal{U}\mathcal{U}^\dagger = 1$, nazývame antiunitárnym operátorom. Pre každý stav $|\psi\rangle = \sum_n d_n|n\rangle$ má teda platiť, že $\mathcal{U}|\mathcal{U}^\dagger\psi\rangle = |\psi\rangle$. Rozvojom oboch strán tejto rovnosti do bázoových stavov ľahko nahliadneme, že matica koeficientov $\mathcal{U}_{mn}$ musí byť unitárna, $\sum_m \mathcal{U}_{km}\mathcal{U}_{nm}^* = \delta_{kn}$. Na druhej strane, z ekvivalentnej formulácie unitarity matice $\sum_m \mathcal{U}_{mk}\mathcal{U}_{mn}^* = \delta_{kn}$ explicitným výpočtom ľahko ukážeme, že pre všetky vektory $|\phi\rangle$ platí $\mathcal{U}^\dagger|\mathcal{U}\phi\rangle = |\phi\rangle$, čiže zároveň platí $\mathcal{U}^\dagger\mathcal{U} = 1$.

V ďalšom výklade využijeme dve vlastnosti antiunitárných operátorov $\mathcal{U}$:

- (i) ak c je obyčajné c-číslo, potom platí $\mathcal{U}c\mathcal{U}^\dagger = c^*\mathcal{U}\mathcal{U}^\dagger = c^*$;
- (ii) z rovnice (9) vyplýva, že pre skalárne súčiny platí $\langle\mathcal{U}\chi|\mathcal{U}\psi\rangle = \langle\psi|\mathcal{U}^\dagger\mathcal{U}\chi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle$.

Operátor obrátenia času

Nech $\mathcal{T}$ je antiunitárny operátor, ktorý spĺňa vzťahy (8). Ukážeme, že tento operátor realizuje obrátenie času. Naozaj, nech pri tejto manipulácii stavy $|\psi\rangle$ prejdú na stavy $|\psi'\rangle = |\mathcal{T}\psi\rangle$. Pre skalárne súčiny potom platí $\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\mathcal{T}\phi|\mathcal{T}\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle$, čiže štvorce prekryvov $|\langle\psi|\phi\rangle|^2$ zostávajú nezmenené, ako aj má byť.

Podobne operátorová identita $[x, p] = i\hbar$ nie je pri obrátení času narušená. Naozaj, pri obrátení času sa operátor $[x, p]$ transformuje nasledovne: $\mathcal{T}[x, p]\mathcal{T}^\dagger = [\mathcal{T}x\mathcal{T}^\dagger, \mathcal{T}p\mathcal{T}^\dagger] = [x, -p] = -i\hbar$. Na druhej strane, keďže operátor $\mathcal{T}$ je antiunitárny, c-číslo $i\hbar$ sa transformuje ako $\mathcal{T}i\hbar\mathcal{T}^\dagger = -i\hbar$. Preto rovnosť operátorov $[x, p]$ a $i\hbar$ nie je pri obrátení času narušená.

Dvakrát po sebe aplikovaná operácia obrátenia času $\mathcal{T}^2$ vracia systém do pôvodného stavu a musí byť rovná konštante. Dá sa ukázať (pozri cvičenie), že táto konštanta je rovná ± 1 , t.j. $\mathcal{T}^2 = \pm 1$.

Nakoniec opäť prepíšeme vzťahy (8) v jazyku druhého kvantovania pre elektróny v tej istej báze ako pri priestorovej inverzii:

$$(c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger)' = \mathcal{T}c_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger\mathcal{T}^\dagger = \sigma c_{\mathbf{R}-\sigma}^\dagger, \quad (c_{\mathbf{R}\sigma})' = \mathcal{T}c_{\mathbf{R}\sigma}\mathcal{T}^\dagger = \sigma c_{\mathbf{R}-\sigma}, \quad \text{const}' = \mathcal{T}\text{const}\mathcal{T}^\dagger = \text{const}^*. \quad (10)$$

Predpokladali sme pritom, že Wannierove orbitály sa pri časovej inverzii nezmenia. Ak naviac uvažíme, že pre fyzikálne vákuum platí $\mathcal{T}|0\rangle = |0\rangle$, vzťahy (10) nám opäť povedia nielen ako sa pri obrátení času

⁶Ľahko overíme, že súčin $\mathcal{A}\mathcal{B}$ dvoch antilineárných operátorov $\mathcal{A}, \mathcal{B}$ je lineárny operátor. Potom pri výpočte maticového elementu $\langle\psi|\mathcal{A}\mathcal{B}|\phi\rangle$ môžeme operátor $\mathcal{A}\mathcal{B}$ nechať pôsobiť doľava aj doprava a dostaneme rovnaký výsledok. Ak by sme tento maticový element chceli interpretovať pomocou pôsobenia $\mathcal{B}$ doprava s výsledkom $|\mathcal{B}\phi\rangle$ a pôsobenia $\mathcal{A}$ doľava s výsledkom $\langle\psi|\mathcal{A}|$, museli by sme žiadať, aby platil vzťah $\langle\psi|\mathcal{A}\mathcal{B}|\phi\rangle = [\langle\psi|\mathcal{A}|\mathcal{B}\phi\rangle]^*$, pretože ak $|\phi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$, potom v rozvoji $\langle\psi|\mathcal{A}\mathcal{B}|\phi\rangle$ figurujú koeficienty c_n , kým v rozvoji $|\mathcal{B}\phi\rangle$ figurujú koeficienty c_n^* . Ľahko overíme, že tento vťah bude splnený, ak pôsobenie doľava definujeme vzťahom $\langle\psi|\mathcal{A}|\chi\rangle \equiv [\langle\psi|\mathcal{A}\chi\rangle]^*$

transformujú operátory, ale aj stavy systému. Ľahko tiež možno overiť, že v systéme s N elektrónmi platí $\mathcal{T}^2 = (-1)^N$ (pozri cvičenia).

Symetrie AFMH modelu

Pomocou vzťahov (6,8) ľahko nahliadneme, že AFMH model je symetrický voči priestorovej symetrii aj voči obráteniu času. Naviac, ak model formulujeme na konečnej mriežke s periodickými okrajovými podmienkami, potom AFMH model je symetrický voči posunutiam $T_{\mathbf{a}}$, kde $\mathbf{a}$ je ľubovoľný mriežkový vektor. Dá sa ukázať, že v takom prípade možno vlastné stavy modelu charakterizovať pomocou kvázihybosti (pozri cvičenia).

Nakoniec preskúmame symetriu AFMH modelu voči otočeniam v spinovom priestore. Definujme operátor celkového spinu mriežky $\mathbf{S}_{\text{tot}} = \sum_i \mathbf{S}_i$. Ľahko sa nahliadne, že tento operátor spĺňa komutačné vzťahy pre spin (pozri cvičenia). V tomto odstavci ukážeme, že AFMH hamiltonián komutuje so všetkými zložkami operátora $\mathbf{S}_{\text{tot}}$, ako aj s operátorom $\mathbf{S}_{\text{tot}}^2 = (S_{\text{tot}}^x)^2 + (S_{\text{tot}}^y)^2 + (S_{\text{tot}}^z)^2$:

$$[H, \mathbf{S}_{\text{tot}}] = 0, \quad [H, \mathbf{S}_{\text{tot}}^2] = 0. \quad (11)$$

Keďže operátory spinu na rôznych mriežkových bodoch komutujú, prvý zo vzťahov (11) bude platiť, ak $[\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, S_i^k + S_j^k] = 0$ pre ľubovoľnú kartézsku zložku k spinu. Ak skalárny súčin zapíšeme po zložkách a použijeme Einsteinovu sumačnú konvenciu, dostaneme

$$[S_i^l S_j^l, S_i^k + S_j^k] = [S_i^l, S_i^k] S_j^l + S_i^l [S_j^l, S_j^k] = i\epsilon_{lkm} (S_i^m S_j^l + S_i^l S_j^m) = 0,$$

kde v druhej rovnosti sme využili komutačný vzťah $[S_i^l, S_i^k] = i\epsilon_{lkm} S_i^m$ pre operátory spinu, kde ϵ_{lkm} je úplne antisymetrický tenzor. V poslednej rovnosti sme využili, že tenzor ϵ_{lkm} je pri zámene indexov m a l antisymetrický, kým výraz $S_i^m S_j^l + S_i^l S_j^m$ je pri tejto operácii symetrický. Tým je prvý zo vzťahov (11) dokázaný. Zo vzťahu $[H, S_{\text{tot}}^k] = 0$ naviac triviálne vyplýva $[H, (S_{\text{tot}}^k)^2] = 0$, pretože $[H, (S_{\text{tot}}^k)^2] = H(S_{\text{tot}}^k)^2 - (S_{\text{tot}}^k)^2 H = S_{\text{tot}}^k H S_{\text{tot}}^k - S_{\text{tot}}^k H S_{\text{tot}}^k$. Teda druhý zo vzťahov (11) je jednoduchým dôsledkom prvého vzťahu. Tým je dôkaz komutačných vzťahov (11) je hotový.

Dôsledkom výsledku (11) a komutačného vzťahu $[\mathbf{S}_{\text{tot}}^2, S_{\text{tot}}^k] = 0$ je, že vlastné stavy AFMH modelu možno zvoliť ako vlastné stavy operátorov celkového spinu $\mathbf{S}_{\text{tot}}^2$ a jeho priemetu na zvolenú os, napr. S_{tot}^z .

Cvičenia

1. Ukážte, že ak štvorec antiunitárneho operátora je rovný konštante, potom táto konštanta je rovná $+1$ alebo -1 . Pomocou vzťahov (10) ukážte, že pre ľubovoľný báзовý stav $|\psi\rangle$ systému s N elektrónmi platí $\mathcal{T}^2|\psi\rangle = (-1)^N|\psi\rangle$, a preto $\mathcal{T}^2 = (-1)^N$.
2. Kramersova degenerácia. Ukážte, že v systéme s nepárnym počtom elektrónov, pre ktorý platí $[\mathcal{T}, H] = 0$, ku každému vlastnému stavu $|\psi\rangle$ systému existuje k nemu ortogonálny stav $|\psi'\rangle$ s tou istou vlastnou hodnotou energie.
3. Diskrétna translačná symetria AFMH modelu. Posunutie o mriežkový vektor $\mathbf{a}$ definujeme vzťahom $T_{\mathbf{a}} \mathbf{S}_{\mathbf{R}} T_{\mathbf{a}}^\dagger = \mathbf{S}_{\mathbf{R}+\mathbf{a}}$. Ukážte, že posunutie $T_{\mathbf{a}}$ je symetriou AFMH modelu s periodickými okrajovými podmienkami. Presvedčte sa, že prvky grupy posunutí navzájom komutujú. (Grupa posunutí je abelovská.) Podľa teórie reprezentácií možno pre abelovskú grupu zvoliť sadu báзовých stavov $|\mathbf{k}, \lambda\rangle$ kde $\hbar\mathbf{k}$ je tzv. kvázihybnosť a λ sú všetky ostatné kvantové čísla stavu (ako napr. S_{tot} a S_{tot}^z), pričom platí $T_{\mathbf{a}}|\mathbf{k}, \lambda\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}|\mathbf{k}, \lambda\rangle$. Ukážte, že kvázihybnosť $\hbar\mathbf{k}$ je definovaná modulo vektory recipročnej mriežky.
4. Dokážte, že operátor $\mathbf{S}_{\text{tot}}$ spĺňa komutačné pravidlá pre spin. Aké hodnoty S_{tot}^z pripadajú do úvahy na mriežke s párnym počtom $\mathcal{N}$ bodov?

3 Heisenbergov model: exaktné výsledky

V tejto a v dvoch nasledujúcich prednáškach budeme skúmať AFMH model (5) na mriežke, ktorá pozostáva z 2 podmriežok A a B s rovnakým počtom $\mathcal{N}/2$ spinov, pričom interagujú iba spiny z opačných podmriežok. Takúto mriežku budeme nazývať bipartitnou a jej koordinačné číslo označíme z . Okrem toho budeme predpokladať, že v uzloch mriežky sú spiny o veľkosti S . V predošlej prednáške

sme ukázali, že v efektívnom modeli pre jednopásový Hubbardov model sa realizuje $S = \frac{1}{2}$, ale dá sa čakať, že v komplikovanejších situáciách sa môžu vyskytnúť aj modely s vyšším spinom S .

Najprv ukážeme, že základný stav (kvantového) AFMH modelu nie je totožný s klasickým základným stavom. Potom sformulujeme niekoľko presných výsledkov pre skutočný základný stav modelu. Hlavným výsledkom je, že celkový spin základného stavu AFMH modelu na bipartitnej mriežke je nulový.

Explicitný tvar AFMH modelu

V ďalšom výklade bude často užitočné explicitne rozpísať skalárny súčin v definícii AFMH modelu (5). Tak dostaneme rozklad AFMH hamiltoniánu

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] = H_z + H_{\perp}, \quad (12)$$

kde H_z je hamiltonián tzv. Isingovho modelu a člen $H_{\perp}$, ktorý pochádza zo zložiek x, y skalárneho súčinu, je zapísaný pomocou tzv. zvyšovacích a znižovacích operátorov spinu, pozri dodatok.

Dvojspinový model

V tomto odstavci preskúmame základný stav dvojspinového modelu s hamiltoniánom $H = JS_1 \cdot S_2$. Využívajúc tvar hamiltoniánu (12) ľahko overíme, že ak spiny majú veľkosť S , potom energia klasického (Néelovho) základného stavu $|N\rangle = |+, -S\rangle$ je $\langle N|H|N\rangle = -JS^2$. Na druhej strane, presné riešenie dvojspinového modelu dostaneme nasledovným prepisom hamiltoniánu: $H = \frac{J}{2} (\mathbf{S}_{\text{tot}}^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2)$, kde sme zaviedli operátor celkového spinu $\mathbf{S}_{\text{tot}} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$. Je zrejmé, že v základnom stave nadobúda celkový spin minimálnu možnú hodnotu, $S_{\text{tot}} = 0$. Keďže $\mathbf{S}_1^2 = \mathbf{S}_2^2 = S(S+1)$, presná energia základného stavu je $E_0 = -JS(S+1)$. Ukázali sme teda, že Néelov stav nie je základným stavom dvojspinového AFMH modelu.

Model na mriežke

V tomto odstavci ukážeme, že Néelov stav $|N\rangle$ (t.j. stav so spinmi s priemetom $+S$ na podmriežke A a spinmi s priemetom $-S$ na podmriežke B) nie je vlastným stavom AFMH hamiltoniánu, čiže nemôže byť ani základným stavom. Našou úlohou bude ukázať, že stav $H|N\rangle$ nie je c-číselným násobkom stavu $|N\rangle$. Ľahko nahliadneme, že $H_z|N\rangle = -\frac{1}{2}\mathcal{N}zJS^2|N\rangle$, teda klasický stav $|N\rangle$ je vlastným stavom z-ovej časti Heisenbergovho modelu. Avšak pôsobenie operátora $H_{\perp}$ na stav $|N\rangle$ vyrába konfigurácie s priemetom spinu $S-1$ na podmriežke A a s priemetom spinu $-S+1$ na niektorom zo susedných bodov v podmriežke B, ktoré sú ortogonálne k $|N\rangle$. Preto $|N\rangle$ zjavne nie je vlastným stavom operátora $H_{\perp}$. Presný základný stav AFMH modelu je známy iba pre lineárnu retiazku spinov, pre viacrozmerné systémy však základný stav nie je známy.

Nerovnosti pre energiu základného stavu

Teraz ukážeme, že napriek tomu, že vlnovú funkciu základného stavu AFMH modelu nepoznáme, jeho energiu E_0 vieme odhadnúť pomerne dobre. Horný odhad energie základného stavu dostaneme porovnaním s vhodným variačným stavom - napr. s energiou Néelovho stavu $\langle N|H|N\rangle$, pre ktorú podľa predošlého odstavca platí $\langle N|H|N\rangle = \langle N|H_z|N\rangle = -\frac{1}{2}\mathcal{N}zJS^2$.

Dolný odhad E_0 dostaneme nasledovne. Pre každý mriežkový bod j definujeme operátor H_j ako tú časť Heisenbergovho modelu, do ktorej vstupuje spin $\mathbf{S}_j$. Hamiltonián potom možno písať ako súčet príspevkov H_j od jednotlivých mriežkových bodov j , $H = \frac{1}{2} \sum_j H_j$, kde faktor $\frac{1}{2}$ zohľadňuje, že v takomto rozklade je každá väzba započítaná dvakrát. Ak teraz energiu základného stavu hamiltoniánu H_j označíme ε , potom pre energiu základného stavu musí platiť $E_0 \geq \frac{1}{2}\mathcal{N}\varepsilon$.⁷

Teraz zostáva explicitne vypočítať ε . Ak definujeme operátor $\mathbf{L}_j = \sum_{\hat{\tau}} \mathbf{S}_{j+\hat{\tau}}$, kde suma prebieha cez z spinov susediacich s bodom j , potom hamiltonián H_j môžeme vyjadriť v tvare

$$H_j = JS_j \cdot \mathbf{L}_j = \frac{J}{2} [(\mathbf{S}_j + \mathbf{L}_j)^2 - S(S+1) - \mathbf{L}_j^2].$$

⁷ Ak totiž pre ľubovoľný stav celej mriežky $|\psi\rangle$ použijeme rozvoj $|\psi\rangle = \sum_{nk} c_{nk} |\psi_j^n\rangle |\phi^k\rangle$, kde $|\psi_j^n\rangle$ sú vlastné stavy operátora H_j a $|\phi^k\rangle$ je ľubovoľná ortonormálna báza pre mriežku s vylúčením bodu j a jeho najbližších susedov, potom ľahko nahliadneme, že platí $\langle \psi | H_j | \psi \rangle \geq \langle \psi_j^0 | H_j | \psi_j^0 \rangle = \varepsilon$, kde $|\psi_j^0\rangle$ je základný stav operátora H_j . Odtiaľto vyplýva $\langle \psi | H | \psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_j \langle \psi | H_j | \psi \rangle \geq \frac{\mathcal{N}}{2} \varepsilon$.

Nech veľkosť spinu $\mathbf{L}_j$ v základnom stave je m . Potom veľkosť spinu $\mathbf{S}_j + \mathbf{L}_j$ musí byť aspoň $l = |m - S|$. Energiu základného stavu dostaneme minimalizáciou $\varepsilon = \frac{J}{2} \min_m [l(l+1) - S(S+1) - m(m+1)]$. Ľahko nahliadneme (pozri cvičenia), že minimum sa realizuje pre maximálne možné $m = zS$ a energia v mimime je $\varepsilon = -JS(zS+1)$.

Kombináciou horného a dolného odhadu dostávame nasledovný exaktný výsledok pre energiu základného stavu:

$$\boxed{-\frac{\mathcal{N}z}{2}JS^2(1 + \frac{1}{zS}) \leq E_0 \leq -\frac{\mathcal{N}z}{2}JS^2.} \quad (13)$$

Relatívne korekcie energie oproti klasickému hornému odhadu teda môžu byť nanajvyš rádu $\frac{1}{zS}$. Tieto korekcie budú malé na mriežkach s vysokým koordinačným číslom z a pre veľké spiny S . Najväčšie kvantové korekcie možno naopak očakávať pre spiny $S = \frac{1}{2}$ na lineárnej retiazke, kde $z = 2$.

Vlnové funkcie v báze spinových konfigurácií

Odteraz budeme predpokladať, že Heisenbergov model popisuje spiny $S = \frac{1}{2}$. Budeme skúmať rozklady vlnových funkcií vlastných stavov do spinových konfigurácií $|\psi\rangle = \sum_{\mu} a_{\mu}|\mu\rangle$.

Začnime štúdiom maticových elementov $H_{\mu\mu'} = \langle\mu|H|\mu'\rangle$ Heisenbergovho hamiltoniánu v tejto báze. Keďže hamiltonián Heisenbergovho modelu môžeme zapísať v tvare $H = H_z + H_{\perp}$, pozri rovnicu (12), stačí separátne preskúmať maticové elementy H_z a $H_{\perp}$. Operátor H_z je zjavne diagonálny, keďže nepreklápa spiny: $\langle\mu'|H_z|\mu\rangle = E_{\mu}^z \delta_{\mu'\mu}$ s reálnou hodnotou energie E_{μ}^z . Výsledkom pôsobenia operátora $H_{\perp}$ na stav $|\mu\rangle$ je lineárna superpozícia stavov $|\mu'\rangle$, z ktorých každý vznikne preklopením dvojice spinov v rôznych podmriežkach. Maticové elementy $\langle\mu'|H_{\perp}|\mu\rangle$ teda nadobúdajú iba dve možné hodnoty: $\frac{J}{2}$, ak $|\mu'\rangle$ môže vzniknúť takýmto preklopením, alebo 0, ak takéto preklopenie neexistuje. Navyše zjavne platí $\langle\mu'|H_{\perp}|\mu\rangle = \langle\mu|H_{\perp}|\mu'\rangle$. To znamená, že matica $H_{\mu\mu'}$ je reálna a symetrická a všetky jej nediagonálne prvky sú nezáporné.

SchR pre vlnovú funkciu vlastného stavu $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ možno v báze spinových konfigurácií písať ako maticovú rovnicu

$$H_{\mu\mu'}a_{\mu'} = Ea_{\mu} \quad (14)$$

s reálnou vlastnou hodnotou E . Ak teraz rovnicu (14) sčítame (alebo odčítame a výsledok vydělíme imaginárnou jednotkou) s rovnicou k nej komplexne združenou, dostaneme nové vlastné vektory $a_{\mu} + a_{\mu}^*$ a $\frac{1}{i}(a_{\mu} - a_{\mu}^*)$ s tou istou vlastnou energiou, ktoré sú explicitne reálne. To znamená, že vlastné stavy v báze spinových konfigurácií možno voliť ako čisto reálne.

Marshallovo znamienkové pravidlo

Nech (normalizovaná) vlnová funkcia základného stavu AFMH modelu má tvar $|\psi\rangle = \sum_{\mu} a_{\mu}|\mu\rangle$. Pre strednú hodnotu energie základného stavu potom dostávame

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_{\mu} |a_{\mu}|^2 E_{\mu}^z + \frac{J}{2} \sum_{\mu} a_{\mu} \sum_{\mu'(\mu)} a_{\mu'}, \quad (15)$$

kde do sumy $\mu'(\mu)$ prispievajú iba tie konfigurácie $|\mu'\rangle$, ktoré môžu vzniknúť preklopením dvojice spinov v konfigurácii $|\mu\rangle$. Pýtajme sa teraz, aká voľba znamienok optimalizuje energiu $\langle\psi|H|\psi\rangle$ pri daných veľkostiach koeficientov $|a_{\mu}|$. Odpoveď dáva tzv. Marshallovo znamienkové pravidlo:

$$a_{\mu} = (-1)^{P(\mu)} \times |a_{\mu}|, \quad (16)$$

kde $P(\mu)$ je počet spinov $\uparrow$ na podmriežke A. Naozaj: keďže každé preklopenie spinov na bipartitnej mriežke mení počet spinov v podmriežke A, pri takejto voľbe znamienok vo výraze (15) platí $a_{\mu}a_{\mu'} = -|a_{\mu}||a_{\mu'}|$, čo (pre $J > 0$) zjavne minimalizuje strednú hodnotu $\langle\psi|H|\psi\rangle$.

Základné stavy v sektoroch s fixovaným S_{tot}^z

Skúmame normovaný základný stav v sektore s fixovanou hodnotou celkového spinu S_{tot}^z . V rozvoji takéhoto stavu do spinových konfigurácií môžu samozrejme vystupovať iba tie konfigurácie $|\mu\rangle$, ktoré majú predpísanú hodnotu S_{tot}^z . V tomto odstavci ukážeme, že žiaden z koeficientov a_{μ} pre prípustné konfigurácie nesmie byť nulový. Dôkaz urobíme sporom a pobeží v dvoch krokoch.

V prvom kroku predpokladajme, že pre niektorú z prípustných konfigurácií $|\mu\rangle$ platí $a_\mu = 0$. Ukážeme, že potom aj pre všetky konfigurácie $|\mu'\rangle$, do ktorých sa z $|\mu\rangle$ dá dostať preklopením dvojice spinov, musí platiť $a_{\mu'} = 0$. Toto pozorovanie plynie z rovnice (14), pretože na pravej strane dostaneme nulu a na ľavej strane dostaneme súčet koeficientov $a_{\mu'}$, pričom všetky z nich podľa Marshallovho pravidla musia mať rovnaké znamienka - teda musia byť nulové.

V druhom kroku si stačí uvedomiť, že z ľubovoľnej konfigurácie $|\mu\rangle$ sa dá dostať sériou preklopení dvojice spinov do ľubovoľnej inej konfigurácie $|\mu'\rangle$ v tom istom sektore S_{tot}^z , pozri cvičenia. Preto postupné aplikovanie kroku 1 vedie k záveru, že ak pre jednu z konfigurácií platí $a_\mu = 0$, potom všetky ostatné amplitúdy $a_{\mu'}$ v danom sektore musia byť tiež nulové. To však znamená, že pôvodný stav nebol normovaný. Dostali sme spor.

Model H_∞

Skúmame pomocný (nefyzikálny) model pre spiny $S = \frac{1}{2}$ na bipartitnej mriežke s $\mathcal{N}$ bodmi s hamiltoniánom

$$H_\infty = J \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j,$$

v ktorom všetky spiny z podmriežky A interagujú so všetkými spinmi z podmriežky B. Model teda obsahuje interakcie aj medzi nekonečne vzdialenými bodmi, odtiaľ jeho označenie H_∞ .

Ak zavedieme celkové spiny podmriežok $\mathbf{S}_A$, $\mathbf{S}_B$ a celkový spin celej mriežky $\mathbf{S}_{\text{tot}} = \mathbf{S}_A + \mathbf{S}_B$, ľahko nahliadneme, že podobne ako v dvojspinovom modeli platí

$$H_\infty = J \mathbf{S}_A \cdot \mathbf{S}_B = \frac{J}{2} [\mathbf{S}_{\text{tot}}^2 - \mathbf{S}_A^2 - \mathbf{S}_B^2].$$

Pre náš ďalší výklad je dôležité pozorovanie, že v sektore $S_{\text{tot}}^z = M$ je energia ďalekosahového modelu H_∞ minimalizovaná maximalizáciou $S_A = S_B = \mathcal{N}/4$ a minimalizáciou celkového spinu, $S_{\text{tot}} = M$.

Ľahko sa nahliadne, že SchR pre H_∞ má opäť tvar (14) a jediný rozdiel oproti AFMH modelu je, že matica $(H_\infty)_{\mu\mu'}$ obsahuje viac nediagonálnych prvkov. Preto pre základný stav $|\psi_\infty\rangle = \sum_\mu b_\mu |\mu\rangle$ modelu H_∞ opäť platí Marshallovo znamienkové pravidlo a všetky koeficienty b_μ sú nenulové.

Spin základného stavu

Keďže pre AFMH model ako aj pre H_∞ platí Marshallovo znamienkové pravidlo, ich základné stavy vo fixovanom sektore $S_{\text{tot}}^z = M$, t.j. $|\psi\rangle = \sum_\mu a_\mu |\mu\rangle$ a $|\psi_\infty\rangle = \sum_\mu b_\mu |\mu\rangle$, nemôžu byť navzájom kolmé. Naozaj, pri rovnakej znamienkovej konvencii bude platiť

$$\langle \psi_\infty | \psi \rangle = \sum_\mu b_\mu^* a_\mu = \sum_\mu |b_\mu| |a_\mu| > 0,$$

pretože všetky koeficienty $|a_\mu|$ aj $|b_\mu|$ musia byť nenulové.

Na druhej strane, vďaka rotačnej invariancii hamiltoniánov H a H_∞ musia mať stavy $|\psi\rangle$ a $|\psi_\infty\rangle$ ostré hodnoty celkového spinu. Tieto hodnoty označme S_{tot} a S_{tot}^∞ , pričom vieme, že $S_{\text{tot}}^\infty = M$. Skúmame veličinu $\langle \psi_\infty | \mathbf{S}_{\text{tot}}^2 | \psi \rangle$. Ak operátor $\mathbf{S}_{\text{tot}}^2$ necháme pôsobiť doprava, dostaneme $S_{\text{tot}}(S_{\text{tot}} + 1) \langle \psi_\infty | \psi \rangle$. Pri pôsobení doľava však ten istý výraz dá hodnotu $M(M + 1) \langle \psi_\infty | \psi \rangle$. Keďže $\langle \psi_\infty | \psi \rangle \neq 0$, aby sa oba výrazy rovnali, musí zjavne platiť $S_{\text{tot}} = M$. Teda základný stav Heisenbergovho modelu v sektore $S_{\text{tot}}^z = M$ nesie celkový spin $S_{\text{tot}} = M$, t.j. minimálnu možnú hodnotu v danom sektore. Ľahko sa naviac ukáže, že v sektore $S_{\text{tot}}^z = M$ existuje jediný stav, ktorý minimalizuje energiu. Dva rôzne degenerované základné stavy by totiž museli spĺňať Marshallovo pravidlo, a preto by nemohli byť navzájom ortogonálne.

Ostáva už len zistiť, ktorý sektor $S_{\text{tot}}^z = M$ dáva absolútne najnižšiu energiu AFMH modelu. Túto otázku možno jednoducho zodpovedať, ak si uvedomíme, že (vďaka rotačnej invariantnosti) energia nemôže závisieť od *priemetu* celkového spinu S_{tot}^z , ale iba od jeho *veľkosti* S_{tot} . Ukázali sme totiž, že v sektore $S_{\text{tot}}^z = M$, v ktorom sa nachádzajú stavy s celkovým spinom $S_{\text{tot}} \geq M$, je jediným optimálnym stavom stav $S_{\text{tot}} = M$. To však znamená, že energia základného stavu ako funkcia S_{tot} spĺňa nerovnosť

$$E_0(S_{\text{tot}}) < E_0(S'_{\text{tot}}), \quad \text{ak} \quad S_{\text{tot}} < S'_{\text{tot}}.$$

Teda energia AFMH modelu je (ostro) rastúcou funkciou S_{tot} a základný stav AFMH modelu na bipartitnej mriežke je singlet, tj. stav s celkovým spinom $S_{\text{tot}} = 0$.

Cvičenia

1. Nech $|N\rangle$ je Néelov stav. Lineárnou kombináciou koľkých spinových konfigurácií je stav $H|N\rangle$?
2. Nech m je násobkom S , ktorý nadobúda hodnoty od 0 po zS a nech $l = |m - S|$. Nájdite minimálnu možnú hodnotu energie $\varepsilon = \frac{J}{2} \min_m [l(l+1) - S(S+1) - m(m+1)]$.
3. Na štvorcovej mriežke dokážte, že z ľubovoľnej konfigurácie $|\mu\rangle$ sa dá dostať sériou preklopení dvojice susedných spinov do ľubovoľnej inej konfigurácie $|\mu'\rangle$ v tom istom sektore S_{tot}^z .
4. Vypočítajte veľkosť podpriestoru $S_{\text{tot}}^z = M$ pre systém $\mathcal{N}$ spinov $S = \frac{1}{2}$. Pre aké M je podpriestor najväčší? Porovnaj veľkosť tohto podpriestoru s veľkosťou celého Hilbertovho priestoru.

4 Heisenbergov model: spinové vlny

Verí sa,⁸ že základný stav AFMH modelu na hyperkubických 2D a 3D mriežkach možno popísať pomocou poruchovej teórie, vychádzajúc z neporušeného hamiltoniánu H_z s klasickým základným stavom (Néelov stav), ak $H_{\perp}$ vezmeme ako poruchu. V tejto prednáške skonštruujeme takúto poruchovú teóriu pre spiny veľkosti S . Otázke o hlbšom význame takto skonštruovaného základného stavu, napr. jeho symetriách, sa budeme venovať v nasledujúcej prednáške.

Bozónová reprezentácia spinov

Hilbertov priestor pre spin S v mriežkovom bode i pozostáva z $2S + 1$ stavov s rôznymi priemetmi na fixovanú os, v našom prípade os z : $S_i^z = S, S-1, \dots, -S+1, -S$. Nech v klasickom Néelovom stave je priemet spinu v danom mieste povedzme $S_i^z = S$. Po zapnutí poruchy $H_{\perp}$ budú v danom mieste okrem stavu $S_i^z = S$ s nenulovou (avšak menšou) pravdepodobnosťou prítomné aj ostatné priemety spinu.

Naším cieľom v tomto odstavci bude interpretovať $2S + 1$ spinových stavov ako bozónové stavy s $n_i = 0, 1, \dots, 2S$ bozónmi. Priradenie urobíme tak, že najpravdepodobnejšej hodnote spinu priradíme stav s 0 bozónmi. Počet bozónov potom bude popisovať odchýlku od klasického stavu v danom mriežkovom bode. Predpokladajme teda, že na podmriežke A platí $S_i^z \approx S$, kým na podmriežke B je $S_i^z \approx -S$. Spinové operátory budeme reprezentovať pomocou bozónových operátorov podľa Holsteina a Primakoffa, pričom explicitný tvar tejto reprezentácie závisí od podmriežky:

Bozónová reprezentácia spinu v bode i na podmriežke A

Namiesto trojice operátorov spinu $S_i^z, S_i^{\pm}$ zavedieme kreačné a anihilačné operátory $a_i^{\dagger}, a_i$, ktoré spĺňajú kánonické komutačné vzťahy pre bozóny. Pomocou týchto operátorov vyjadríme spinové operátory nasledovne:

$$S_i^z = S - a_i^{\dagger} a_i, \quad S_i^+ = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a_i^{\dagger} a_i}{2S}} a_i, \quad S_i^- = \sqrt{2S} a_i^{\dagger} \sqrt{1 - \frac{a_i^{\dagger} a_i}{2S}}. \quad (17)$$

V týchto vyjadreniach treba výrazy $\sqrt{1+x}$ rozumieť ako Taylorov rozvoj, t.j. $\sqrt{1+x} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \dots$. Priamym dosadením sa ľahko nahliadne, že ak operátory $a_i^{\dagger}, a_i$ spĺňajú bozónové komutačné vzťahy, potom operátory (17) spĺňajú komutačné vzťahy pre operátory spinu (pozri cvičenia).

Z vyjadrenia pre operátor S_i^z vyplýva, že $2S + 1$ stavov $S_i^z = S, S-1, \dots, -S+1, -S$ je reprezentovaných stavmi s $n_i = 0, 1, \dots, 2S$ a -bozónmi (znižovačmi spinu). V Hilbertovom priestore bozónov ale existujú aj (nefyzikálne) stavy s väčším počtom častíc, t.j. s menšou hodnotou S_i^z . Všimnime si však, že podľa (17) aplikácia znižovača S_i^- na stav s priemetom $S_i^z = -S$ dá nulu! Preto tieto stavy nie sú dosiahnuteľné a teória je konzistentná.

Bozónová reprezentácia spinu v bode j na podmriežke B

Namiesto trojice operátorov spinu $S_i^z, S_i^{\pm}$ zavedieme tentokrát bozónové kreačné a anihilačné operátory

⁸Okrem iného na základe numerických simulácií a difrakčných experimentov.

$b_i^\dagger, b_i$. Pomocou týchto operátorov vyjadríme spinové operátory nasledovne:

$$S_j^z = -S + b_j^\dagger b_j, \quad S_j^+ = \sqrt{2S} b_j^\dagger \sqrt{1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2S}}, \quad S_j^- = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2S}} b_j. \quad (18)$$

Opäť sa ľahko nahliadne, že ak operátory $b_i^\dagger, b_i$ spĺňajú bozónové komutačné vzťahy, potom operátory (18) spĺňajú komutačné vzťahy pre operátory spinu.

Z vyjadrenia pre operátor S_i^z vyplýva, že stavmi s $n_i = 0, 1, \dots, 2S$ b -bozónmi (zvyšovačmi spinu) je v tomto prípade reprezentovaných $2S + 1$ stavov $S_i^z = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S$. Z rovnakého dôvodu ako na podmriežke A nie sú stavy s väčším počtom bozónov dosiahnuteľné.

Heisenbergov model v bozónovej reprezentácii

Priblíženie spinových vln

Ak zavedieme z vektorov $\hat{\tau}$ spájajúcich zvolený mriežkový bod s jeho najbližšími susedmi, potom Heisenbergov model na mriežke s podmriežkami A a B možno zapísať v tvare

$$H = J \sum_{i \in A} \sum_{\hat{\tau}=1}^z \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+\hat{\tau}},$$

kde suma beží cez $\mathcal{N}/2$ bodov i v podmriežke A a body $i + \hat{\tau}$ ležia v podmriežke B. Všimnime si, že každá dvojica najbližších susedov je takto započítaná práve raz.

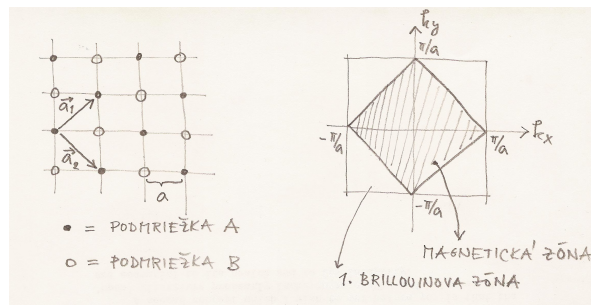
Naším cieľom bude popísať základný stav AFMH modelu a jeho excitácie s malými energiami. Budeme preto predpokladať, že iba málo spinov je excitovaných. Hamiltonián prepíšeme pomocou reprezentácie Holsteina-Primakoffa (17, 18) a výsledok rozvineme do kvadratických členov v operátoroch a, b . Takéto priblíženie nazývame priblížením spinových vln. Pôvod tohto názvu sa ozrejní neskôr. Ak využijeme vzťahy

$$S_i^z S_j^z \approx -S^2 + S(a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j), \quad \frac{1}{2} S_i^+ S_j^- \approx S a_i b_j, \quad \frac{1}{2} S_i^- S_j^+ \approx S a_i^\dagger b_j^\dagger,$$

dostaneme nasledovný kvadratický hamiltonián v operátoroch a, b :

$$H \approx -\frac{\mathcal{N}z}{2} JS^2 + JSz \left(\sum_{i \in A} a_i^\dagger a_i + \sum_{j \in B} b_j^\dagger b_j \right) + JS \sum_{i \in A} \sum_{\hat{\tau}=1}^z \left(a_i^\dagger b_{i+\hat{\tau}}^\dagger + a_i b_{i+\hat{\tau}} \right). \quad (19)$$

Prvý člen v hamiltoniáne (19) popisuje energiu klasického Néelovho stavu. Tretí člen popisuje kvantové korekcie spôsobené spinovými fluktuáciami $H_\perp$. Druhý člen zohľadňuje, že spinové fluktuácie zvyšujú Isingovu energiu H_z .



Obr. 1: Heisenbergov model na štvorcovej mriežke. Vľavo: reálny priestor. Vpravo: recipročný priestor.

Translačná invariantnosť

Pre konkrétnosť majme na chvíľu na mysli 2D hyperkubickú (t.j. štvorcovú) mriežku. Hoci AFMH model je invariantný voči posunutiam o ľubovoľné násobky vektorov $(a, 0)$ a $(0, a)$, klasický Néelov stav sa zreprodukuje iba pri posunutíach o násobky vektorov $\mathbf{a}_1 = (a, a)$ a $\mathbf{a}_2 = (a, -a)$, t.j. iba pri

tých posunutíach, ktoré prevádzajú podmriežku A do podmriežky A (a nie do B). Teda translačná symetria Néelovho stavu je nižšia než symetria AFMH modelu. Navyše, elementárna bunka Néelovho stavu s elementárnymi vektormi $\mathbf{a}_1$ a $\mathbf{a}_2$ obsahuje 2 body pôvodnej mriežky (po jednom z podmriežok A a B) a je oproti nej zrotovaná o 45° .

Vďaka translačnej invariantnosti AFMH modelu je výhodné definovať nasledovné Fourierove transformácie bozónových operátorov na podmriežkach A a B s $\mathcal{N}/2$ bodmi:

$$a_i^\dagger = \sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad b_j^\dagger = \sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} b_{\mathbf{k}}^\dagger.$$

Vlnový vektor $\mathbf{k}$ v týchto výrazoch leží v recipročnom priestore podmriežky A, t.j. v tzv. magnetickej zóne, ktorá je zrotovaná o 45° a má polovičný objem oproti Brillouinovej zóne pôvodnej mriežky. V magnetickej zóne sa nachádza $\mathcal{N}/2$ dovolených $\mathbf{k}$ -bodov a operátory $a_{\mathbf{k}}$ a $b_{\mathbf{k}}$ spĺňajú také isté bozónové komutačné vzťahy, ako operátory a_i a b_i (pozri cvičenia).

Po Fourierovej transformácii nadobudne hamiltonián v spinovo-vlnovom priblížení tvar⁹

$$H = -\frac{\mathcal{N}z}{2}JS^2 + JSz \sum_{\mathbf{k}} \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}) \right], \quad (20)$$

kde sme zaviedli označenie $\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\hat{\tau}} e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\tau}}$. Porovnanie výsledkov (19) a (20) ukazuje, že Fourierova transformácia odstránila podstatný problém hamiltoniánu (19), ktorým bolo vzájomné previazanie všetkých bozónových operátorov, a v hamiltoniáne (20) sú už zviazané iba módy $a_{\mathbf{k}}$ a $b_{-\mathbf{k}}^\dagger$.

Diagonalizácia spinovo-vlnového hamiltoniánu

Naším konečným cieľom bude zapísať hamiltonián (20) ako súčet voľných bozónových módov (alebo harmonických oscilátorov), podobne ako sa nám to podarilo pri skúmaní kmitov mriežky v harmonickom priblížení. Ak zavedieme stĺpcový vektor bozónových operátorov $x_{\mathbf{k}}$ a c-číselnú maticu $M_{\mathbf{k}}$ pomocou vzťahov

$$x_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}, \quad M_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 1 & \gamma_{\mathbf{k}} \\ \gamma_{\mathbf{k}} & 1 \end{pmatrix},$$

potom hamiltonián (20) môžeme formálne zapísať v maticovom tvare

$$H = -\frac{\mathcal{N}z}{2}JS(S+1) + JSz \sum_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}}^\dagger M_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}}. \quad (21)$$

Tu si treba všimnúť, že kvôli prehodeniu poradia operátorov $b_{-\mathbf{k}}^\dagger$ a $b_{-\mathbf{k}}$ oproti hamiltoniánu (20) sa zmenil aj prvý (c-číselný) člen v hamiltoniáne (21).

Ako uvidíme o chvíľu, ak chceme hamiltonián (21) zapísať ako súčet voľných bozónových módov, potrebujeme od módov $x_{\mathbf{k}}$ prejsť k novým módom $\xi_{\mathbf{k}}$, a to tak, aby hamiltonián zapísaný pomocou $\xi_{\mathbf{k}}$ bol diagonálny. V našom prípade diagonalizáciu zrealizujeme transformáciou $\xi_{\mathbf{k}} = U_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}}$ k dvojici nových bozónových operátorov α, β , vytvárajúcej nový stĺpcový vektor

$$\xi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix},$$

kde za transformačnú maticu vezmeme

$$U_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}.$$

Ľahko nahliadneme (pozri cvičenia), že transformácia od $x_{\mathbf{k}}$ ku $\xi_{\mathbf{k}}$ je kánonická (t.j. od bozónov k bozónom), ak pre reálne prvky matice $U_{\mathbf{k}}$ platí

$$u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1. \quad (22)$$

⁹S hamiltoniánmi podobného tvaru sa stretneme aj pri skúmaní supratekutosti a supravodivosti, zakaždým v priblížení stredného poľa.

Inverzná transformácia má tvar $x_{\mathbf{k}} = V_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}}$ s transformačnou maticou

$$V_{\mathbf{k}} = (U_{\mathbf{k}})^{-1} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}.$$

V operátoroch α, β tak hamiltonián (21) nadobudne tvar

$$H = -\frac{\mathcal{N}z}{2}JS(S+1) + JSz \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^{\dagger} V_{\mathbf{k}}^{\dagger} M_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}.$$

Doteraz sme nešpecifikovali tvar matíc $U_{\mathbf{k}}$ a $V_{\mathbf{k}}$. V ďalšom kroku zvolíme $V_{\mathbf{k}}$ tak, aby matica $V_{\mathbf{k}}^{\dagger} M_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}$ bola diagonálna. Explicitný výpočet ukazuje, že diagonálne prvky matice $V_{\mathbf{k}}^{\dagger} M_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}$ musia byť rovnaké. Žiadame preto, aby platil vzťah

$$JSz V_{\mathbf{k}}^{\dagger} M_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{1}, \quad (23)$$

kde $\mathbf{1}$ je jednotková matica.¹⁰ Tak dostaneme

$$H = -\frac{\mathcal{N}z}{2}JS(S+1) + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \xi_{\mathbf{k}} = -\frac{\mathcal{N}z}{2}JS(S+1) + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left(\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{-\mathbf{k}} \right).$$

Doteraz neznáme bezrozmerné koeficienty $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ a energie $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ nájdeme riešením systému rovníc (22,23). Tak dostaneme (pozri cvičenia)

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = JSz \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}, \quad u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}} + 1 \right), \quad v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}} - 1 \right), \quad (24)$$

kde volíme $u_{\mathbf{k}} > 0$ a $v_{\mathbf{k}} > 0$. Vďaka párnosti funkcie $\gamma_{\mathbf{k}} = \gamma_{-\mathbf{k}}$ zároveň platia vzťahy $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{-\mathbf{k}}$, $u_{\mathbf{k}} = u_{-\mathbf{k}}$ a $v_{\mathbf{k}} = v_{-\mathbf{k}}$. Po elementárnej úprave nakoniec dostaneme výsledný hamiltonián v spinovo-vlnovom priblížení:

$$\boxed{H = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left(\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}} \right)}. \quad (25)$$

Hamiltonián (25) popisuje systém voľných bozónov typu α a β . Základným stavom hamiltoniánu (25) je vákuum oboch typov bozónov, pričom energia základného stavu má hodnotu

$$E_0 = -\frac{\mathcal{N}z}{2}JS(S+\delta), \quad \delta = \frac{2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} \right). \quad (26)$$

Excitovanými stavmi hamiltoniánu (25) sú stavy s konečnými počtami bozónov, pričom energia $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ oboch typov bozónov je rovnaká a závisí od vlnového vektora $\mathbf{k}$. V nasledujúcej prednáške uvidíme, že tieto bozóny možno interpretovať ako excitácie typu spinových vln.

Všimnime si, že vďaka faktoru δ vo výraze (26) kvantové fluktuácie znižujú energiu základného stavu oproti jej hodnote v klasickom Néelovom stave. Ak výraz (26) porovnáme s exaktným výsledkom pre energiu základného stavu (13), dostaneme podmienku $0 \leq \delta \leq 1/z$. Spinovo-vlnová teória je konzistentná s touto podmienkou, pretože numerickým výpočtom δ ľahko overíme, že v 3D máme $\delta = 0.097 < 0.167 = 1/6$, v 2D máme $\delta = 0.158 < 0.25 = 1/4$ a v 1D je $\delta = 0.363 < 0.5 = 1/2$ (pozri cvičenia). Stojí tiež za povšimnutie, že so znižovaním koordinačného čísla z kvantová korekcia δ rastie.

Spinovo-vlnový model ako efektívny model

Zrekapitulujme si výklad v tejto prednáške. Vychádzali sme z predstavy o tom, že skutočný základný stav možno dostať poruchovým rozvojom okolo klasického Néelovho stavu. Pre základný stav a jeho excitácie s nízkou energiou sme potom dostali výsledok (25), ktorý možno interpretovať ako ďalší

¹⁰Stojí za zmienku, že prechod od matice $M_{\mathbf{k}}$ k diagonálnej matici $\varepsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{1}$ nie je obyčajnou diagonalizáciou matice, známou z algebry. To sa okrem iného prejaví tak, že $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ nie sú vlastnými číslami matice $M_{\mathbf{k}}$. Matematické aspekty diagonalizácie hamiltoniánu (21) sú hlbšie skúmané v práci J.L. Hemmen, Z. Phys. B **38**, 271 (1980).

netriviálny príklad efektívneho hamiltoniánu: v AFMH modeli pre spiny S majú elementárne excitácie bozónovú štatistiku, bez ohľadu na veľkosť spinu S .

Ak sa teda vrátime k Hubbardovmu modelu v limite $U \gg t$ pri polovičnom zaplnení, pozorujeme v ňom zaujímavú sekvenciu efektívnych modelov pri postupnom znižovaní energie Λ : pri vysokých energiách ide o model pre elektróny so spinom $S = 1/2$ a nábojom $-e$, pri energiách $J \ll \Lambda \ll U$ je efektívnym modelom AFMH model pre (fermiónové) spiny $S = 1/2$ ktoré nenesú náboj, kým pri nízkych energiách $\Lambda \ll J$ sú efektívnym stupňom voľnosti bozónové spinové vlny.

Cvičenia

1. Ukážte, že operátory (17) spĺňajú komutačné vzťahy pre operátory spinu. Návod: využite vzťahy $[a^\dagger a, a] = -a$ a podobne $[a^\dagger a, a^\dagger] = +a^\dagger$.
2. Dokážte, že Fourierova transformácia nemení komutačné vzťahy.
3. Dokážte, že ak platí podmienka (22), potom transformácia $\xi_{\mathbf{k}} = U_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}}$ je kánonická.
4. Ukážte, že výsledky (24) sú riešením rovníc (22,23).
5. Numericky vypočítajte koeficient δ vystupujúci v energii základného stavu (26).

5 Heisenbergov model: spontánne narušenie symetrie

V tejto prednáške si najprv uvedomíme, že základný stav v spinovo-vlnovej teórii je stavom so spontánne narušenou (spojitou) symetriou a ukážeme, že v takejto situácii bude excitačné spektrum obsahovať tzv. Goldstoneove módy. Zavedieme tiež pojem parametra usporiadania a demonštrujeme vplyv kvantových a tepelných fluktuácií na jeho veľkosť. Napokon ozrejníme, ako môže dôjsť k spontánnemu narušeniu symetrie v systéme s nezachovávajúcim sa parametrom usporiadania.

Spontánne narušenie symetrie v spinovo-vlnovej teórii

Vďaka prítomnosti skalárnych súčinov v AFMH hamiltoniáne tvar tohto hamiltoniánu nezávisí od voľby súradníc v spinovom priestore. Na druhej strane, Néelov stav $|\mathcal{N}\rangle$ očividne od tejto voľby závisí: spiny sú v tomto stave v závislosti od podmriežky orientované buď rovnobežne alebo protibežne s vopred zvolenou osou v spinovom priestore. Základný stav spinovo-vlnovej teórie $|0\rangle$, t.j. vákuum pre bozóny typov α, β , túto vlastnosť zdedí. Teda symetria stavu $|0\rangle$ je nižšia, než symetria hamiltoniánu. V takejto situácii hovoríme, že stav $|0\rangle$ je stavom so spontánne narušenou symetriou.

Vo všeobecnosti symetriu systému U vyhlásime za spontánne narušenú, ak základný stav systému $|0\rangle$ nie je invariantný voči tejto symetrii, t.j. ak výsledkom pôsobenia U na stav $|0\rangle$ nie je ten istý stav (až na fáz): $U|0\rangle \neq e^{i\theta}|0\rangle$. Takýto základný stav je potom nevyhnutne degenerovaný, pričom degenerované vlnové funkcie základného stavu možno navzájom transformovať operáciami symetrie U . V takomto prípade budú infinitezimálne externé polia schopné vybrať jeden konkrétny stav spomedzi degenerovaných stavov.

Skúmame teraz ten istý systém pri vysokých teplotách, $T \rightarrow \infty$. V tejto limite očakávame, že termodynamický stav systému¹¹ bude symetrický voči U . Potom však musí existovať teplota T_c (kritická teplota), nad ktorou je termodynamický stav systému symetrický a pod ktorou je symetria hamiltoniánu spontánne narušená.

Goldstoneove módy

Podľa spinovo-vlnovej teórie pozostáva excitačné spektrum AFMH modelu z 2 typov voľných častíc α a β . Obidva typy častíc sú bozóny, ktoré nesú kvázihybnosť $\mathbf{k}$ a rovnakú energiu $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, teda ich spektrá sú exaktne degenerované. Pri skúmaní fyzikálnej povahy častíc α a β je užitočné vyjadriť ich kreačné

¹¹Ktorý je popísaný maticou hustoty systému, pozri IV.1.

operátory pomocou pôvodných operátorov spinu:

$$\begin{aligned}\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger &= \sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} \left[u_{\mathbf{k}} \sum_{i \in A} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} a_i^\dagger + v_{\mathbf{k}} \sum_{j \in B} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} b_j \right] \approx \sqrt{\frac{1}{\mathcal{N}S}} \left[u_{\mathbf{k}} \sum_{i \in A} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} S_i^- + v_{\mathbf{k}} \sum_{j \in B} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} S_j^- \right], \\ \beta_{\mathbf{k}}^\dagger &= \sqrt{\frac{2}{\mathcal{N}}} \left[v_{\mathbf{k}} \sum_{i \in A} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} a_i + u_{\mathbf{k}} \sum_{j \in B} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} b_j^\dagger \right] \approx \sqrt{\frac{1}{\mathcal{N}S}} \left[v_{\mathbf{k}} \sum_{i \in A} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} S_i^+ + u_{\mathbf{k}} \sum_{j \in B} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} S_j^+ \right],\end{aligned}$$

kde sme najprv operátory $\xi_{\mathbf{k}}$ vyjadrili cez pôvodné Holsteinove-Primakoffove operátory $x_{\mathbf{k}}$ a následne sme použili inverznú Fourierovu transformáciu. Využili sme tiež symetrie $u_{\mathbf{k}} = u_{-\mathbf{k}}$ a $v_{\mathbf{k}} = v_{-\mathbf{k}}$. V približných rovnostiach sme využili najnižšie členy rozvoja Holsteinovej-Primakoffovej transformácie

$$a_i^\dagger \approx \frac{1}{\sqrt{2S}} S_i^-, \quad a_i \approx \frac{1}{\sqrt{2S}} S_i^+, \quad b_j^\dagger \approx \frac{1}{\sqrt{2S}} S_j^+, \quad b_j \approx \frac{1}{\sqrt{2S}} S_j^-.$$

Z približných rovností vidno, že častice α znižujú projekciu spinu na jednotlivých bodoch mriežky S_i^z o 1. Keďže $u_{\mathbf{k}}^2 = 1 + v_{\mathbf{k}}^2$, amplitúda tohto znižovania je väčšia na podmriežke A než na podmriežke B, teda toto znižovanie zároveň znižuje parameter usporiadania. Podobne, častice β zvyšujú projekciu spinu na jednotlivých bodoch mriežky S_i^z o 1 (tentokrát dominantne na podmriežke B). Porovnanie s klasickým výpočtom (pozri cvičenia) ukazuje, že častice α a β možno interpretovať ako kvantá klasických tzv. spinových vln, t.j. precesného pohybu spinov okolo základného stavu, a nazývame ich magnónmi. Vzťah medzi magnónmi a spinovými vlnami je pritom podobný vzťahu medzi fonónmi a klasickými kmitmi mriežky.

Všimnime si, že na mriežke s mriežkovou konštantou a v dlhovlnnej limite $k \rightarrow 0$ platí

$$\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} \approx \sqrt{\frac{2}{z}} ka, \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} \approx JS\sqrt{2z}ka, \quad u_{\mathbf{k}} \approx v_{\mathbf{k}} \propto \sqrt{\frac{1}{ka}}.$$

Bozónový disperzný zákon má teda ten istý tvar ako pre dlhovlnné akustické fonóny. Obidva módy α a β majú pre $k \rightarrow 0$ nulovú energiu a takéto módy nazývame **Goldstoneovými bozónmi**.

Ukážeme, že existencia Goldstoneových bozónov je nevyhnutným dôsledkom spontánneho narušenia spojitkej symetrie. Naozaj, hamiltonián (20) možno zapísať ako súčet príspevkov jednotlivých módo v tvare $H = -\frac{\mathcal{N}z}{2}JS(S+1) + \sum_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}}$, kde

$$H_{\mathbf{k}}/(JSz) = \frac{1}{2} \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger \right) + \frac{1}{2} \left(b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) + \gamma_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} \right).$$

Ak využijeme, že $a_{\mathbf{k}=0}^\dagger \approx S_A^-/\sqrt{\mathcal{N}S}$ a $b_{\mathbf{k}=0}^\dagger \approx S_B^+/\sqrt{\mathcal{N}S}$, potom príspevok (tzv. anomálnych) módo $\mathbf{k} = 0$ možno zapísať v tvare

$$H_{\mathbf{k}=0} = \frac{Jz}{2\mathcal{N}} [S_{\text{tot}}^+ S_{\text{tot}}^- + S_{\text{tot}}^- S_{\text{tot}}^+] = \frac{Jz}{\mathcal{N}} [(S_{\text{tot}}^x)^2 + (S_{\text{tot}}^y)^2]. \quad (27)$$

Ak uvažíme, že $\mathbf{L}^2/(2I)$ je energia rotačného pohybu telesa s momentom hybnosti $\mathbf{L}$ a s momentom zotrvačnosti I , potom $H_{\mathbf{k}=0}$ popisuje energiu rotácie (v spinovom priestore) celej mriežky spinov okolo osí x a y s momentom zotrvačnosti $I = \frac{\mathcal{N}\hbar^2}{2Jz}$. V termodynamicknej limite $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ však $I \rightarrow \infty$, a preto energia anomálnych módo $\mathbf{k} = 0$ musí byť nulová. Ak má byť disperzný zákon spinových vln spojitý, v dlhovlnnej limite preto musí byť $\varepsilon_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$.

Parameter usporiadania

Nech $\hat{M}$ je operátorom intenzívnej fyzikálnej veličiny, ktorá sa pri aspoň jednej zo symetrií systému nezachováva, $[U, \hat{M}] \neq 0$, vďaka čomu vo vysokoteplotnej fáze $\langle \hat{M} \rangle \equiv \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | \hat{M} | n \rangle = 0$, t.j. stredná hodnota $\langle \hat{M} \rangle$ je nulová. Nech však zároveň v nízokoteplotnej fáze platí $\langle \hat{M} \rangle \neq 0$. Takúto veličinu $\hat{M}$ nazveme parametrom usporiadania. Bohužiaľ neexistuje všeobecný predpis na konštrukciu parametrov usporiadania a ich identifikácia je často najťažšou úlohou pri štúdiu nových fáz. Prípad, kedy platí $[\hat{M}, H] = 0$, nazývame prípadom so zachovávajúcim sa parametrom usporiadania. Na druhej strane,

ak platí $[\hat{M}, H] \neq 0$, potom hovoríme o nezachovávaní sa parametru usporiadania. Obidva prípady sa môžu vyskytnúť, častejší je však prípad s nezachovávaním sa parametrom usporiadania.¹²

V prípade antiferomagnetu je rozumnou voľbou parametra usporiadania $\hat{\mathbf{M}}$ operátor rozdielu magnetizácie oboch podmriežok,

$$\hat{\mathbf{M}} = \frac{1}{\mathcal{N}} \left[\sum_{i \in A} \mathbf{S}_i - \sum_{j \in B} \mathbf{S}_j \right]. \quad (28)$$

Ide o vektorový parameter usporiadania, pretože spiny môžu v stave so spontánnym narušením symetrie zamrznuť ľubovoľným smerom.

Parameter usporiadania v spinovo-vlnovej teórii

V Néelovom stave polarizovanom v smere osi z očakávame, že nenulovú hodnotu má iba zložka $\langle M^z \rangle$. V tomto odstavci preto preskúmame predpoveď spinovo-vlnovej teórie pre veľkosť parametra usporiadania $\langle M^z \rangle$. Podľa definičných vzťahov reprezentácie Holsteina-Primakoffa (17, 18) platí

$$\langle M^z \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \left\langle \sum_{i \in A} S_i^z - \sum_{j \in B} S_j^z \right\rangle = S - \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} \rangle = S - \delta S, \quad (29)$$

kde sme využili, že $\sum_{i \in A} a_i^\dagger a_i = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$ a $\sum_{j \in B} b_j^\dagger b_j = \sum_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}$. Stojí za povšimnutie, že v spinovo-vlnovej teórii je parameter usporiadania $\langle M^z \rangle$ zmenšený oproti hodnote S v Néelovom stave o korekciu δS . Stredné hodnoty operátorov a, b je najjednoduchšie počítat prechodom od a, b k operátorom α, β . Tak dostaneme:

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle &= \langle (u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}})(u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger) \rangle = u_{\mathbf{k}}^2 \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle + v_{\mathbf{k}}^2 \left[1 + \langle \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}} \rangle \right], \\ \langle b_{-\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}} \rangle &= \langle (-v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger)(-v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}) \rangle = v_{\mathbf{k}}^2 \left[1 + \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle \right] + u_{\mathbf{k}}^2 \langle \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}} \rangle. \end{aligned}$$

Tieto vzťahy platia tak v základnom stave, t.j. pri teplote $T = 0$, ako aj pri konečnej teplote, pričom $\langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}} \rangle = n(\varepsilon_{\mathbf{k}})$, kde $n(\varepsilon)$ je Boseho-Einsteinova rozdeľovacia funkcia. Po dosadení do vzťahu (29) pre korekciu δS dostaneme

$$\delta S = \frac{2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} [v_{\mathbf{k}}^2 + n_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2)] = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{1 + 2n_{\mathbf{k}}}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}} - 1 \right], \quad (30)$$

kde sme pre jednoduchosť zápisu zaviedli označenie $n_{\mathbf{k}} = n(\varepsilon_{\mathbf{k}})$.

Skúmame najprv korekciu δS pri nulovej teplote, kedy $n_{\mathbf{k}} = 0$. Numerickou integráciou výrazu (30) dostaneme (pozri cvičenia) $\delta S = 0.078$ pre 3D mriežky a $\delta S = 0.197$ pre 2D mriežky. Pre 1D mriežky však dostaneme $\delta S \rightarrow \infty$. To znamená, že v 1D teória nie je konzistentná a kvantové fluktuácie v 1D usporiadanie kompletne rozrušia.¹³

Kvantová dolná kritická dimenzia ($T = 0$)

Podľa výsledku (30) je korekcia parametra usporiadania δS súčtom príspevkov od jednotlivých spinových vln. Divergencia korekcie δS v 1D mriežkach má pôvod v príspevku od dlhovlnných módov $k \rightarrow 0$, kedy máme do činenia so sumou $\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} 1/k$. Zámenou sumy za integrál a prechodom do sférických súradníc ľahko nahliadneme, že výsledok je úmerný výrazu $I(D, L) = \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} dk k^{D-2}$, kde $K_{\min} \sim 1/L$ je minimálny vlnový vektor na mriežke s lineárnym rozmerom L a $K_{\max} \sim 1/a$ je hraničná hodnota vlnového vektora, nad ktorou nemožno použiť dlhovlnnú limitu.

V systémoch s dimenziou $D > 1$ dostaneme $I(D, L) = (K_{\max}^{D-1} - K_{\min}^{D-1})/(D-1)$ a tento výsledok zostane konečným aj v termodynamicknej limite $L \rightarrow \infty$, kedy $I(D, \infty) = K_{\max}^{D-1}$. To však znamená, že pre $D > 1$ bude korekcia δS konečná a poruchová teória môže fungovať.

¹²Príkladom systému so zachovávaním sa parametrom usporiadania je feromagnetický Heisenbergov model, pozri dodatok.

¹³Tento výsledok je v zhode s presným riešením 1D modelu pomocou tzv. Betheho ansatzu.

V systéme s dimenziou $D = 1$ však dostaneme $I(1, L) = \ln(K_{\max}/K_{\min}) \sim \ln(L/a)$, čo je v termodynamickej limite divergentná korekcia. Kvantovou dolnou kritickou dimenziou D_{LQ} nazývame poslednú (najväčšiu) dimenziu, pri ktorej nemôže dôjsť k narušeniu symetrie v základnom stave v dôsledku kvantových fluktuácií. Podľa spinovo-vlnovej teórie pre AFMH model platí $D_{LQ} = 1$.

Hohenbergova-Merminova-Wagnerova veta

Výsledok (30) možno použiť aj na odhad korekcie δS pri konečnej (ale nízkej) teplote T . Opäť očakávame, že potenciálne singulárne príspevky pochádzajú z dlhovlnnej limity, kedy $n_{\mathbf{k}} \propto T/k$, odkiaľ pre príspevok tepelných fluktuácií vyplýva $\delta S_T \propto \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} 1/k^2$. Prechodom od sumy k integrálu dostaneme $\delta S_T \propto T \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} dk k^{D-3}$, kde $K_{\min} \sim 1/L$ je opäť minimálny vlnový vektor na mriežke, ale maximálny vlnový vektor je tentokrát obmedzený Boseho-Einsteinovým rozdelením a $K_{\max} \propto T$.

V systémoch s dimenziou $D > 2$ potom v termodynamickej limite dostaneme $\delta S_T \propto T^{D-2}$, teda rastúca teplota spôsobuje pokles parametra usporiadania v súlade s očakávaniami. Avšak pre $D = 2$ dostaneme $\delta S_T \propto T \ln(K_{\max}L)$, teda pri konečnej teplote tepelné fluktuácie v termodynamickej limite rozrušia usporiadaný stav. Tento výsledok sa nazýva Hohenbergova-Merminova-Wagnerova veta. Okrem tu načrtnutého argumentu vo formalizme teórie spinových vln existuje aj rigorózný dôkaz tohto tvrdenia pre Heisenbergov model a podobné modely.

Poslednú (najväčšiu) dimenziu, pri ktorej nemôže dôjsť k narušeniu symetrie pri konečnej teplote v dôsledku tepelných fluktuácií, nazývame dolnou kritickou dimenziou D_L . Pre AFMH model a mnoho ďalších systémov s lineárnym disperzným zákonom pre Goldstoneove módy je $D_L = 2$.

Celkový spin stavu so spontánnym narušením symetrie

Definujeme operátor celkového spinu podmriežky A, $\mathbf{S}_A = \sum_{i \in A} \mathbf{S}_i$, a obdobne aj operátor celkového spinu podmriežky B, $\mathbf{S}_B = \sum_{j \in B} \mathbf{S}_j$. Pre operátor celkového spinu potom zjavne platí $\mathbf{S}_{\text{tot}} = \mathbf{S}_A + \mathbf{S}_B$, kým operátor magnetizácie (28) je daný vzťahom $\hat{\mathbf{M}} = (\mathbf{S}_A - \mathbf{S}_B)/N$. Podľa vety o základnom stave antiferomagnetického Heisenbergovho modelu je celkový spin základného stavu nulový. Teraz ukážeme, že potom aj spiny podmriežok musia byť nulové, $\langle \mathbf{S}_A \rangle = \langle \mathbf{S}_B \rangle = 0$.

Náš dôkaz bude využívať pojem vektorového operátora. Pod vektorovým operátorom $\mathbf{V}$ rozumieme operátor, pre ktorého kartézske zložky platia komutačné vzťahy

$$[S_{\text{tot}}^k, V^l] = i\epsilon_{klm} V^m, \quad (31)$$

kde ϵ_{klm} je úplne antisymetrický tenzor. Ak teraz vzťah (31) zľava aj sprava obložíme základným stavom Heisenbergovho modelu $|\psi\rangle$ a využijeme, že $S_{\text{tot}}^k |\psi\rangle = 0$, ľahko nahliadneme, že $\langle \psi | \mathbf{V} | \psi \rangle = 0$, teda stredná hodnota všetkých vektorových operátorov v singletnom stave musí byť nulová.

Ale $\mathbf{S}_A$ aj $\mathbf{S}_B$ sú očividne vektorové operátory, preto musí platiť $\langle \mathbf{S}_A \rangle = \langle \mathbf{S}_B \rangle = 0$. Ukázali sme teda, že v exaktnom základnom stave AFMH modelu musí byť parameter usporiadania nulový, $\langle \hat{\mathbf{M}} \rangle = 0$. Znamená to, že symetria AFMH modelu nemôže byť spontánne narušená?

Spontánne narušenie translačnej symetrie v kryštáli

Analogická situácia ako v AFMH modeli nastáva pri vzniku kryštálu: vlastný stav kryštálu by mal mať dobre definovanú celkovú hybnosť p_{tot} , a preto jeho poloha by musela mať nekonečnú neurčitosť. Inými slovami, kryštál na prvý pohľad nemôže spontánne narušiť translačnú invariantnosť pohybových rovníc pre elektróny a jadrá.

Ak však vytvoríme vlnový balík s neurčitou celkovou hybnosťou kryštálu Δp , potom môžeme kryštál lokalizovať s presnosťou polohy $\Delta x \sim \hbar/\Delta p$. Nárast energie kryštálu v dôsledku lokalizácie je pritom $\Delta E \sim \frac{(\Delta p)^2}{2M}$, kde M je hmotnosť kryštálu ako celku. Avšak keďže $M \propto N$, energia ΔE je zanedbateľne malá (pozri cvičenia) a spontánne narušenie (translačnej) symetrie je možné.

Andersonova veža stavov

Posunutie kryštálu ako celku popisujú anomálne akustické módy s $\mathbf{k} = 0$. Preskúmame preto príspevok anomálnych módov $\mathbf{k} = 0$ k AFMH hamiltoniánu. Výsledok (27) možno prepísať v tvare

$$H_{\mathbf{k}=0} = \frac{Jz}{N} [\mathbf{S}_{\text{tot}}^2 - (S_{\text{tot}}^z)^2] \approx \frac{Jz}{N} \mathbf{S}_{\text{tot}}^2.$$

V druhej (približnej) rovnosti sme uvažili, že priemet celkového spinu do smerov x a y , ktorý je úmerný $S_{\text{tot}}^+ \approx \sqrt{\mathcal{N}S}(a_{\mathbf{k}=0} + b_{\mathbf{k}=0}^\dagger)$ a $S_{\text{tot}}^- \approx \sqrt{\mathcal{N}S}(a_{\mathbf{k}=0}^\dagger + b_{\mathbf{k}=0})$, je omnoho väčší než priemet do smeru z , $S_{\text{tot}}^z \approx b_{\mathbf{k}=0}^\dagger b_{\mathbf{k}=0} - a_{\mathbf{k}=0}^\dagger a_{\mathbf{k}=0}$.

Všimnime si, že výraz $\frac{JzS_{\text{tot}}^2}{\mathcal{N}}$, ktorý popisuje rotáciu kryštálu spinov ako celku, má podobný tvar aj fyzikálny význam ako operátor kinetickej energie kryštálu $\frac{\mathbf{p}^2}{2M}$. Vďaka jeho prítomnosti preto v spektre antiferomagnetického Heisenbergovho modelu existuje okrem základného stavu s celkovým spinom $S_{\text{tot}} = 0$ tzv. Andersonova veža stavov s celkovými spinmi $S_{\text{tot}} = 1, 2, \dots$ a energiami $JzS_{\text{tot}}(S_{\text{tot}}+1)/\mathcal{N}$ zanedbateľne vyššími (v limite veľkých $\mathcal{N}$) ako energia základného stavu.¹⁴ Z týchto stavov potom možno vytvoriť vlnový balík vytvárajúci Néelov stav, ktorý narušá rotačnú symetriu. Energia tohto balíka je pritom prakticky rovnaká ako energia exaktného základného stavu, podobne ako tomu bolo v prípade narušenia symetrie v kryštáli.

Stojí za zmienku, že limita $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ je teda nevyhnutnou podmienkou spontánneho narušenia symetrie. V nasledujúcej prednáške spoznáme alternatívny pohľad na tento fakt.

Cvičenia

1. Vypočítajte disperzný zákon pre antiferomagnetické spinové vlny v klasickom AFMH modeli. Návod: použite analogický postup ako v prednáške I.25, kde boli skúmané feromagnetické spinové vlny.
2. Numerickou integráciou výrazu (30) pre štvorcovú a kubickú mriežku overte výsledky pre δS uvádzané v prednáške.
3. Odhadnite veľkosť kryštálu, ktorý možno pri izbovej teplote lokalizovať s presnosťou rozmeru jadra.
4. V limite nízkych teplôt vypočítajte merné teplo AFMH modelu na kubickej mriežke.

6 Magnetická anizotropia a Isingov model

V tejto prednáške najprv ukážeme, že v dôsledku konečnej spinovo-orbitálnej interakcie môže mať efektívny spinový model nižšiu symetriu ako AFMH model. Zavedieme Isingov model a pomocou pojmu narušenia ergodicity ukážeme, že aj v systémoch s diskretnou symetriou (ako napr. Isingov model) sú fázové prechody (striktne vzaté) možné iba v nekonečných systémoch.

Spinovo-orbitálna väzba

Pohybová rovnica pre častice so spinom, tzv. Pauliho rovnica, nie je fundamentálnou rovnicou kvantovej mechaniky, ale iba najnižším členom v nerelativistickom rozvoji Diracovej rovnice pre elektrón vo vonkajšom elektromagnetickom poli. Systematický nerelativistický rozvoj získaný pomocou tzv. Foldyho-Wouthuysenovej transformácie vedie k ďalším korekciám:

$$\begin{aligned}
 H = & mc^2 + \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m} - e\varphi + \frac{e\hbar}{m}\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \\
 & + \frac{e\hbar}{2m^2c^2}\mathbf{S} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) + i\frac{e\hbar^2}{4m^2c^2}\mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla \cdot \mathbf{E},
 \end{aligned} \tag{32}$$

kde operátor spinu $\mathbf{S}$ je normalizovaný tak, že vlastné hodnoty jeho priemetu na zvolenú os sú $\pm\frac{1}{2}$. Prvý člen je pokojová energia elektrónu, kým druhý, tretí a štvrtý člen tvoria Pauliho hamiltonián. Zvyšné štyri členy v druhom riadku popisujú tzv. relativistické korekcie. Nás však zaujíma iba prvý z nich (popisujúci tzv. spinovo-orbitálnu väzbu), pretože druhý z nich vypadne, ak sa elektromagnetické pole v čase nemení. Posledné dva členy zas nepôsobia na spinové stupne voľnosti. Stojí za zmienku, že (32) je ďalším príkladom efektívneho hamiltoniánu.

Ak elektrické pole vzniká ako dôsledok stredovo symetrickej potenciálnej energie elektrónu $V(r)$, potom $\mathbf{E} = \frac{1}{er}\frac{\partial V}{\partial r}\mathbf{r}$. Preto spinovo-orbitálnu väzbu možno v tomto prípade písať v tvare

$$H_{\text{s.o.}} = \zeta(r)\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \quad \zeta(r) = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r}, \tag{33}$$

¹⁴Mohla by vzniknúť otázka, či existencia Andersonovej veže stavov nie je dôsledkom zanedbania interakcií medzi sektorom $\mathbf{k} = 0$ a ostatnými sektormi AFMH hamiltoniánu. Numerické simulácie antiferomagnetického Heisenbergovho modelu však potvrdzujú prítomnosť Andersonovej veže stavov, pozri napr. výsledky pre trojuholníkovú mriežku, Bernu et al, Phys. Rev. B 50, 10048 (1994).

kde $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}/\hbar$ je (opäť bezrozmerný) operátor orbitálneho momentu hybnosti elektrónu. Fyzikálnu interpretáciu spinovo-orbitálnej väzby podáva napríklad Zelená učebnica.

Magnetický hamiltonián pre ión s nezaplnenou vrstvou 3d

Nositeľom magnetického momentu sú často ióny s nezaplnenou atomárnou vrstvou 3d. Hamiltonián popisujúci elektróny v takýchto iónoch možno schematicky zapísať v tvare

$$H_{\text{ion}} = H_{\text{HF}} + (H_{\text{ee}} - V_{\text{HF}}) + H_{\text{c.f.}} + H_{\text{s.o.}},$$

kde H_{HF} je jedoelektrónový hamiltonián iónu v priblížení Hartreeho-Focka a $H_{\text{ee}} - V_{\text{HF}}$ je rozdiel medzi presnou energiou coulombovského odpudzovania elektrónov H_{ee} a jej približným popisom pomocou Hartreeho-Fockovej potenciálnej energie V_{HF} . Člen $H_{\text{c.f.}}$ popisuje tzv. kryštálové pole, t.j. zmenu potenciálnej energie elektrónov v dôsledku prítomnosti nenulových nábojov okolo študovaného atómu, kým člen $H_{\text{s.o.}}$ popisuje spinovo-orbitálnu interakciu. Jednotlivé príspevky na pravej strane výrazu pre H_{ion} sú usporiadané podľa ich typickej veľkosti, pričom člen H_{HF} je obvykle najväčší a člen $H_{\text{s.o.}}$ zas najmenší.¹⁵

Pri konštrukcii efektívneho hamiltoniánu pre ión budeme relevantné stupne voľnosti identifikovať tak, že začneme s najpodstatnejším členom v hamiltoniáne a postupne budeme zohľadňovať menej podstatné príspevky.

V priblížení Hartreeho-Focka je základným stavom iónu Slaterov determinant vodíku podobných jednočasticových stavov. Tieto jednočasticové stavy možno (vďaka približnej rotačnej symetrii¹⁶ hamiltoniánu H_{HF}) charakterizovať kvantovými číslami l a m , rovnako ako v atóme vodíka. Podľa predpokladu vrstva 3d iónu je obsadená iba čiastočne, t.j. obsahuje N (s hodnotou od 1 do 9) elektrónov.

Počet takýchto Slaterových determinantov je zjavne daný kombinačným číslom $\binom{10}{N}$. Napríklad pre ión Cr^{3+} s $N = 3$ elektrónmi v 3d vrstve tak dostaneme 120 degenerovaných mnohočasticových stavov.

Vplyv člena $H_{\text{ee}} - V_{\text{HF}}$ popisujú prvé dve Hundove pravidlá. Podľa prvého pravidla bude v základnom stave iónu celkový elektrónový spin S_{atom} nadobúdať maximálnu možnú hodnotu, kým podľa druhého pravidla bude celkový elektrónový orbitálny moment L_{atom} taktiež maximalizovaný (pri hodnote S_{atom} predpísanej prvým pravidlom), pozri cvičenia. Degenerácia základného stavu teda po zohľadnení coulombovských interakcií medzi elektrónmi bude $(2S_{\text{atom}} + 1) \times (2L_{\text{atom}} + 1)$ a prípustné vlnové funkcie základného stavu $|L_{\text{atom}}, M_L, S_{\text{atom}}, M_S\rangle$ sú charakterizované priemietmi M_L, M_S . V prípade iónu Cr^{3+} dostaneme celkový spin $S_{\text{atom}} = \frac{3}{2}$, celkový orbitálny moment $L_{\text{atom}} = 3$ a degeneráciu základného stavu 28, výrazne menej ako pôvodnú degeneráciu 120.

V poradí ďalším členom podľa veľkosti v hamiltoniáne H_{ion} sú tzv. efekty kryštálového poľa $H_{\text{c.f.}}$. Pre konkrétnosť predpokladajme, že okolie iónu Cr^{3+} má tetragonálnu symetriu. Pomocou teórie grúp sa dá ukázať, že v takomto prípade sa 7 orbitálnych stavov s $L_{\text{atom}} = 3$ rozštiepi na tri nedegenerované hladiny a dve $2 \times$ degenerované hladiny, pozri cvičenia. Pre jednoduchosť predpokladajme, že základný stav $|\Gamma\rangle$ je jeden z orbitálne nedegenerovaných stavov. Po zohľadnení spinovej degenerácie sú vlnové funkcie základného stavu súčinom orbitálnej a spinovej časti,¹⁷ $|\Gamma, M_S\rangle = |\Gamma\rangle \otimes |S, M_S\rangle$, a degenerácia základného stavu je 4. Zvyšných $6 \times 4 = 24$ excitovaných stavov označme $|X, M_S\rangle$, pričom opäť $|X, M_S\rangle = |X\rangle \otimes |S, M_S\rangle$.

V poradí ďalším členom podľa veľkosti v hamiltoniáne pre ión Cr^{3+} je spinovo-orbitálna väzba $H_{\text{s.o.}} = \sum_{i=1}^3 \zeta(r_i) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{L}_i$, kde suma beží cez všetky 3 elektróny v orbitáloch typu 3d. Podľa Wignerovej-Eckartovej vety v báze stavov $|L_{\text{atom}}, M_L, S_{\text{atom}}, M_S\rangle$ - a teda aj v báze ich lineárnych kombinácií $|\Gamma, M_S\rangle, |X, M_S\rangle$ - sú maticové elementy operátora $H_{\text{s.o.}}$ rovnaké ako maticové elementy operátora

$$H' = \lambda \mathbf{S}_{\text{atom}} \cdot \mathbf{L}_{\text{atom}},$$

¹⁵V iónoch s nezaplnenou vrstvou 4f naopak obvykle platí $|H_{\text{ee}} - V_{\text{HF}}| \gg |H_{\text{s.o.}}| \gg |H_{\text{c.f.}}|$.

¹⁶Dá sa ukázať, že Hartreeho-Fockov hamiltonián H_{HF} v atónoch s plnými vrstvami je rotačne symetrický. Keďže počet elektrónov v nezaplnenej vrstve je obvykle malým zlomkom celkového počtu elektrónov, H_{HF} zostane približne rotačne symetrickým aj v atónoch s čiastočne zaplnenými vrstvami. Stojí tiež za zmienku, že - na rozdiel od atómu vodíka - vlastné energie hamiltoniánu H_{HF} závisia od kvantových čísel n aj l .

¹⁷Vo všeobecnom prípade sa vlnové funkcie viac ako dvojelektrónových systémov nedajú písať ako jednoduchý súčin orbitálnej a spinovej časti. V našom prípade s $S_{\text{atom}} = \frac{3}{2}$ je však spinová vlnová funkcia plne symetrická voči zámene častíc, preto celkovú vlnovú funkciu možno písať ako súčin tejto funkcie a plne antisymetrickej orbitálnej vlnovej funkcie.

kde λ je (pre všetky uvažované stavy rovnaká) energia spinovo-orbitálnej väzby, pozri cvičenia.

Teraz preskúmame, ako spinovo-orbitálna väzba H' zmení energie štyroch degenerovaných stavov $|\Gamma, M_S\rangle$. Efektívny hamiltonián budeme opäť konštruovať do druhého rádu poruchovej teórie podľa H' , podobne ako v (4). Najprv si všimnime, že platí $\langle \Gamma | \mathbf{L}_{\text{atom}} | \Gamma \rangle = 0$, pretože vlnovú funkciu $|\Gamma\rangle$ musí byť možné zvoliť ako čisto reálnu.¹⁸ Odtiaľ vyplýva, že prvý rád poruchovej teórie podľa H' neprispieva k zmene energie. V priestore stavov $|\Gamma, M_S\rangle$ má preto efektívny hamiltonián tvar

$$H_{\text{atom}} = \sum_{\alpha, \beta} \Lambda^{\alpha\beta} S_{\text{atom}}^{\alpha} S_{\text{atom}}^{\beta}, \quad \Lambda^{\alpha\beta} = \lambda^2 \sum_X \frac{\langle \Gamma | L_{\text{atom}}^{\alpha} | X \rangle \langle X | L_{\text{atom}}^{\beta} | \Gamma \rangle}{E_{\Gamma} - E_X},$$

ktorý explicitne ukazuje, že vďaka väzbe medzi spinmi a mriežkou nie sú vo všeobecnosti všetky smery v spinovom priestore ekvivalentné. Hamiltonián H_{atom} popisuje tzv. magnetickú anizotropiu mriežkového bodu (single ion anisotropy).

Isingov model

Symetria tenzora $\Lambda^{\alpha\beta}$ je diktovaná symetriou mriežky. Napríklad pre tetragonálnu mriežku očakávame $\Lambda^{xx} = \Lambda^{yy} \neq \Lambda^{zz}$. Pre konkrétnosť budeme predpokladať, že iba zložka Λ^{zz} je nenulová, pričom platí $\Lambda^{zz} = -\Lambda$, kde Λ je kladná energia, pozri cvičenia. Heisenbergov model pre mriežku atomárnych spinov $S_i = \frac{3}{2}$ s magnetickou anizotropiou má potom tvar

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \Lambda \sum_i (S_i^z)^2. \quad (34)$$

V limite $\Lambda \gg J$ budú mať nízku energiu iba tie konfigurácie, kde vo všetkých mriežkových bodoch bude priemet spinu na os z rovný $\pm \frac{3}{2}$. Pôsobenie člena $H_{\perp}$ z rozkladu (12) nás z tohto podpriestoru spinových konfigurácií zaručene vyvedie von, a preto ho v prvom priblížení môžeme ignorovať. V takom prípade efektívnym modelom pre (34) bude $H = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - \Lambda \sum_i (S_i^z)^2$, kde sú povolené iba konfigurácie $S_i^z = \pm \frac{3}{2}$. Ak teraz spinový stav $S_i^z = \frac{3}{2}$ popíšeme pomocou efektívneho spinu $\tilde{S}_i = \frac{1}{2}$ a podobne stav $S_i^z = -\frac{3}{2}$ pomocou $\tilde{S}_i = -\frac{1}{2}$, efektívny hamiltonián môžeme prepísať ako tzv. Isingov model

$$H_{\text{Ising}} = \tilde{J} \sum_{\langle ij \rangle} \tilde{S}_i \tilde{S}_j, \quad (35)$$

kde $\tilde{J} = 9J$. Konštantnú energiu $-\frac{9}{4}\mathcal{N}\Lambda$ sme pritom ignorovali ako nepodstatnú.

Medzi Isingovým a Heisenbergovým modelom existujú dva podstatné rozdiely. Z hľadiska symetrie má Heisenbergov model spojitú symetriu (a následne aj Goldstoneove módy), kým symetria Isingovho modelu je iba diskretná: hamiltonián (35) je invariantný pri súčasnej zmene znamienka $\tilde{S}_i \rightarrow -\tilde{S}_i$ vo všetkých bodoch mriežky (ktorú možno interpretovať napr. ako symetriu voči obráteniu času). Z hľadiska kvantovej mechaniky je Isingov model triviálny, pretože je diagonálny v priestore spinových konfigurácií. Dôsledkom tejto vlastnosti napr. je, že základný stav Isingovho modelu je známy. V literatúre sa Isingov model študuje s obidvomi znamienkami interakcie $\tilde{J}$. Pre $\tilde{J} < 0$ hovoríme o feromagnetickom modeli, kým pre $\tilde{J} > 0$ hovoríme o antiferomagnetickom modeli.

Narušenie ergodicity

Spontánne narušenie symetrie súvisí s ďalším dôležitým pojmom narušenia ergodicity. Skúmame pre konkrétnosť povedzme feromagnetický Isingov model. Pri nízkych teplotách prichádzajú do úvahy dva stavy: v jednom je väčšina spinov $\uparrow$, v druhom je väčšina spinov $\downarrow$. Ku každej konfigurácii existuje zrkadlová konfigurácia s tou istou energiou. Ak by teda študovaný systém mohol tepelnými fluktuáciami navštíviť všetky rovnako pravdepodobné konfigurácie, potom by v ňom nemohlo dôjsť k spontánnemu narušeniu symetrie. Musíme teda predpokladať, že systém pripravený s väčšinou spinov $\uparrow$ termálnymi fluktuáciami nemôže prejsť do stavu s väčšinou spinov $\downarrow$. Takéto vymedzenie dostupného podpriestoru v celom kánonickom priestore nazývame narušením ergodicity.

¹⁸Ide totiž o vlastný stav reálneho hamiltoniánu, pozri prednášku 3. Na druhej strane, operátor momentu hybnosti $\mathbf{L}_{\text{atom}} = -i\hbar \sum_i \mathbf{r}_i \times \nabla_i$ je rýdzo imaginárny, preto maticový element $\langle \Gamma | \mathbf{L}_{\text{atom}} | \Gamma \rangle$ musí byť imaginárny. Avšak stredná hodnota hermitovského operátora musí byť reálna, preto $\langle \Gamma | \mathbf{L}_{\text{atom}} | \Gamma \rangle = 0$. Nulová veľkosť strednej hodnoty orbitálneho momentu hybnosti sa v literatúre nazýva vymrznutím orbitálneho momentu hybnosti.

Kedy sa môže realizovať narušenie ergodicity? Skúmame povedzme proces premagnetizovania 3D systému s $N \times N \times N$ spinmi zo stavu s väčšinou spinov $\uparrow$ na stav s väčšinou spinov $\downarrow$. Takýto proces sa môže realizovať ako rast bubliny spinov $\downarrow$ v majoritnom prostredí so spinmi $\uparrow$. Aby sa premagnetizoval celý systém, musí bublina nadobudnúť rozmery porovnateľné s rozmermi celého systému. Ale pretože povrchová energia bubliny vtedy bude $E_{\text{bubble}} \sim JN^2$, pravdepodobnosť takejto fluktuácie pri teplote T bude $e^{-E_{\text{bubble}}/T}$. Keďže pri konečnej teplote v konečnom systéme táto pravdepodobnosť nikdy nie je nulová, k narušeniu ergodicity v takomto systéme, striktné vzaté, nemôže dôjsť. V termodynamickom limite $N \rightarrow \infty$ je však narušenie ergodicity možné.¹⁹

Narušenie ergodicity je uvedeným argumentom zaručené aj v 2D systémoch, pretože vtedy povrchová energia bubliny bude $E_{\text{bubble}} \sim JN$, ktorá tiež diverguje (i keď slabšie ako v 3D) pre $N \rightarrow \infty$. V 1D systémoch však spomínaný argument nefunguje, pretože povrch bubliny pozostáva z dvoch bodov a energia bubliny je konečná. Preto v 1D systémoch obvykle nemôžu existovať fázové prechody pri konečnej teplote. Inými slovami, dolná kritická dimenzia v systémoch s diskretnou symetriou je $D_L = 1$.

Cvičenia

1. Dva elektróny v atomárnej vrstve 2p vytvárajú 15 degenerovaných mnohočasticových stavov hamiltoniánu H_{HF} . Ukážte, že v prvom ráde poruchovej teórie podľa H_{ee} sa tieto stavy rozštiepia a základný stav spĺňa Hundove pravidlá. Návod:
 - a) Definujte operátory celkového spinu $\mathbf{S}$ a celkového momentu hybnosti $\mathbf{L}$ a ukážte, že platí $[H_{\text{ee}}, \mathbf{S}] = [H_{\text{ee}}, S^z] = [H_{\text{ee}}, \mathbf{L}] = [H_{\text{ee}}, L^z] = 0$. Keďže zároveň platí $[S^\alpha, L^\beta] = 0$, vlastné stavy hamiltoniánu H_{ee} možno voliť ako stavy s ostrou hodnotou vlastných hodnôt operátorov $\mathbf{S}^2, S^z, \mathbf{L}^2, L^z$.
 - b) Ukážte, že v priestore 15 mnohočasticových stavov možno zvoliť nasledovnú bázu: deväť stavov s kvantovými číslami $S = 1$ a $L = 1$, päť stavov s kvantovými číslami $S = 0$ a $L = 2$, a jeden stav s kvantovými číslami $S = 0$ a $L = 0$.
 - c) Ukážte, že v prvom ráde poruchovej teórie podľa H_{ee} sa $15 \times$ degenerovaná hladina rozštiepi na jednu $9 \times$ degenerovanú hladinu, jednu $5 \times$ degenerovanú hladinu a jednu nedegenerovanú hladinu.
 - d*) Ukážte, že energie stavov z bodu c) spĺňajú Hundove pravidlá.
2. Ukážte, že pri znížení symetrie systému vo všeobecnosti dochádza k zníženiu degenerácie jeho hladín.
3. Nech $\mathbf{V}$ je vektorový operátor vzhľadom na $\mathbf{L}_{\text{atom}}$, t.j. nech pre komponenty V^l platí $[L_{\text{atom}}^k, V^l] = i\epsilon_{klm} V^m$. Podľa Wignerovej-Eckartovej vety sú v podpriestore s fixovanou hodnotou L_{atom} maticové elementy operátora $\mathbf{V}$ úmerné maticovým elementom operátora $\mathbf{L}_{\text{atom}}$, t.j. $\langle L_{\text{atom}}, M_L | \mathbf{V} | L_{\text{atom}}, M'_L \rangle = \text{const} \times \langle L_{\text{atom}}, M_L | \mathbf{L}_{\text{atom}} | L_{\text{atom}}, M'_L \rangle$. Ukážte, že $\zeta(r_i) \mathbf{L}_i$ je vektorový operátor. Následne ukážte, že maticové elementy operátora $H_{\text{s.o.}}$ sú rovnaké ako maticové elementy operátora $H' = \lambda \mathbf{S}_{\text{atom}} \cdot \mathbf{L}_{\text{atom}}$.
4. Ukážte, že maticové elementy $\Lambda^{\alpha\beta}$ spĺňajú podmienku $\Lambda^{\alpha\alpha} \leq 0$.
5. Kvalitatívne zdôvodnite, prečo je dolná kritická dimenzia D_L^{Ising} Isingovho modelu nižšia než $D_L^{\text{Heisenberg}}$ Heisenbergovho modelu.

7 Model XY a kvantová kvapalina spinov

V tejto prednáške zavedieme model XY ako príklad spinového modelu so spojitou, ale nižšou symetriou ako Heisenbergov model. Tento model je v jednorozmernom prípade exaktne riešiteľný. Ukážeme, že kvantová dolná kritická dimenzia modelu XY je $D_{LQ} = 1$ a popíšeme tzv. kvantovú kvapalinu spinov, t.j. stav bez spontánneho narušenia symetrie.

Model XY

Na Isingov model sa dá pozrieť ako na Heisenbergov model so symetriou zredukovanou zo spojitých grupy trojrozmerných rotácií na diskretnú symetriu. Z hľadiska symetrie pripadá do úvahy ešte jedna možnosť, ktorá sa nachádza medzi spomínanými extrémami: definujme model, ktorý bude invariantný pri otočeníach okolo (jedinej) fixovanej osi, povedzme osi z . Takýto model má očividne nasledovný tvar

$$H_{\text{XY}} = J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) = \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \quad (36)$$

¹⁹V skutočnosti nepotrebujeme striktné nekonečné N . Stačí, ak doba, počas ktorej je systém uväznený v jednom podsysteme, je dostatočne dlhá v porovnaní s dobou pozorovania.

a nazýva sa modelom XY. Zjavne platí $[S_{\text{tot}}^z, H_{\text{XY}}] = 0$, teda vlastné stavy H_{XY} možno voliť tak, že majú zároveň ostrú hodnotu priemetu celkového spinu S_{tot}^z . Model XY (podobne ako AFMH) možno študovať pre spiny rôznej veľkosti S na mriežkach s rôznou dimenziou D a pre obe znamienka J .

Klasický základný stav modelu XY s $J > 0$ je Néelov stav polarizovaný v rovine xy . Ľahko sa však nahliadne, že tento stav nie je vlastným stavom hamiltoniánu (36). Na počudovanie, pre model s $J < 0$ nie je základným stavom ani feromagnetický stav plne polarizovaný v rovine xy (pozri cvičenia). V základnom stave preto očakávame prítomnosť kvantových fluktuácií a na základe analógie s Heisenbergovým modelom očakávame, že v 1D nemôže dôjsť k spontánnemu narušeniu symetrie. Inými slovami, očakávame, že spiny v 1D nemôžu “zmrznúť” v kryštalickom usporiadaní, ale zostávajú “kvapalné”. V nasledujúcom odstavci toto očakávanie potvrdíme presným riešením modelu (36).

Presné riešenie modelu XY v 1D

Skúmame (kvantový) feromagnetický model XY pre reťazku $\mathcal{N}$ spinov $S = \frac{1}{2}$ s periodickou okrajovou podmienkou $\mathbf{S}_{\mathcal{N}+1} = \mathbf{S}_1$. Hamiltonián problému má explicitný tvar

$$H_{\text{XY}} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}-1} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) - \frac{J}{2} (S_{\mathcal{N}}^+ S_1^- + S_{\mathcal{N}}^- S_1^+).$$

Ukážeme, že vo všetkých sektoroch S_{tot}^z je tento model ekvivalentný so systémom voľných fermiónov. Ďalej ukážeme, že najnižšia energia sa realizuje v sektore $S_{\text{tot}}^z = 0$ a základný stav v tomto sektore nie je magnetický, t.j. pre všetky mriežkové body platí $\langle \mathbf{S}_i \rangle = 0$.

Zmiešaná reprezentácia operátorov spinu

Úlohu budeme riešiť v troch krokoch. V prvom kroku budeme operátory spinu reprezentovať pomocou nových operátorov:

$$S_i^+ = a_i^\dagger, \quad S_i^- = a_i, \quad S_i^z = a_i^\dagger a_i - \frac{1}{2}.$$

Ľahko nahliadneme, že komutačné vzťahy pre nové operátory $a, a^\dagger$ na jednom bode mriežky musia byť fermiónové, t.j. $\{a_i, a_i^\dagger\} = 1$ a $\{a_i, a_i\} = \{a_i^\dagger, a_i^\dagger\} = 0$. Žiadúcou vlastnosťou tejto reprezentácie je, že Hilbertov priestor na danom mriežkovom bode je dvojrozmerný (dovolené počty častíc a sú 0 a 1), v zhode s dvoma hodnotami priemetu spinu $\pm \frac{1}{2}$. Avšak bohužiaľ komutačné vzťahy pre nové operátory $a, a^\dagger$ na rôznych bodoch mriežky musia byť bozónové: $[a_i, a_j^\dagger] = [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$, teda operátory $a, a^\dagger$ nepopisujú ani bozóny, ani fermióny (pozri cvičenia). V tejto reprezentácii má hamiltonián tvar

$$H_{\text{XY}} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}-1} (a_i^\dagger a_{i+1} + a_{i+1}^\dagger a_i) - \frac{J}{2} (a_{\mathcal{N}}^\dagger a_1 + a_1^\dagger a_{\mathcal{N}}).$$

Jordanova-Wignerova transformácia

V druhom kroku prejdeme od operátorov $a, a^\dagger$ k fermiónovým operátorom $c, c^\dagger$ pomocou nasledovnej (tzv. Jordanovej-Wignerovej) transformácie pre $i \geq 2$

$$c_i^\dagger = a_i^\dagger U_1 U_2 \dots U_{i-1}, \quad c_i = U_{i-1} \dots U_2 U_1 a_i, \quad U_i = (-1)^{a_i^\dagger a_i},$$

pričom navyše $c_1^\dagger = a_1^\dagger$ a $c_1 = a_1$. Všimnime si, že platí $U_i^2 = 1$, a preto $c_i^\dagger c_i = a_i^\dagger a_i$. Vďaka tejto identite môžeme podľa potreby v U_i zamieňať operátor $a_i^\dagger a_i$ za $c_i^\dagger c_i$. Ľahko overíme, že operátory $c, c^\dagger$ spĺňajú fermiónové komutačné vzťahy $\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}$ a $\{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0$. Pomocou operátorov $c, c^\dagger$ možno po zavedení operátora celkového počtu fermiónov $Q = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} c_i^\dagger c_i$ hamiltonián pre XY reťazku prepísať na fermionizovaný tvar (pozri cvičenia)

$$H_{\text{XY}} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}-1} (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) - (-1)^{Q+1} \frac{J}{2} (c_{\mathcal{N}}^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_{\mathcal{N}}).$$

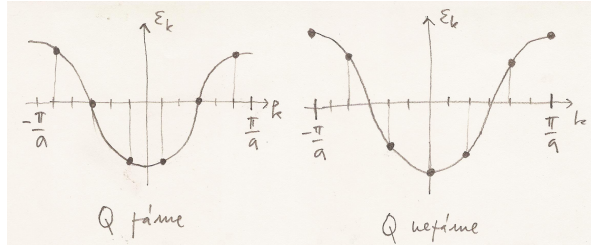
Keďže platí $Q = S_{\text{tot}}^z + \mathcal{N}/2$, v sektore s fixovanou hodnotou priemetu spinu S_{tot}^z možno namiesto operátora počtu fermiónov Q písať c-číslo.

Fourierova transformácia

V treťom kroku diagonalizujeme fermionizovaný hamiltonián pomocou Fourierovej transformácie $c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikja}$,²⁰ kde a je mriežková konštanta. Ak vlnové vektory k zvolíme tak, aby platila podmienka $c_{N+1} = (-1)^{Q+1} c_1$, potom diagonalizovaný hamiltonián nadobudne tvar

$$H_{XY} = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad \varepsilon_k = -J \cos ka,$$

ktorý popisuje voľné fermióny s disperzným zákonom ε_k . Dovoľené hodnoty k treba voliť ako riešenia rovnice $e^{ikNa} = e^{i\pi(Q+1)}$. Pre párny počet fermiónov Q tak dostávame $k = (2n+1)\pi/(Na)$, kým pre nepárne počty fermiónov $k = 2n\pi/(Na)$. Pre konkrétnosť budeme odteraz predpokladať, že počet mriežkových bodov N je párny, ale nedeliteľný 4.



Obr. 2: Dovoľené hodnoty vlnových vektorov k na mriežke $N = 6$. Vľavo: párny počet fermiónov Q . Vpravo: nepárny počet fermiónov Q . V oboch prípadoch je dovoľených N hodnôt k .

Základný stav

V každom sektore s predpísaným S_{tot}^z , t.j. fixovaným počtom fermiónov $Q = S_{\text{tot}}^z + N/2$, je základným stavom Fermiho more, v ktorom sú obsadené stavy s hybnosťami $k \in (-k_F, k_F)$. Absolútne najnižšiu energiu dosiahneme v sektore $Q = N/2$, čo je podľa predpokladu nepárne celé číslo. V tomto prípade totiž Fermiho more obsahuje všetky stavy so zápornou energiou a neobsadené zostávajú všetky stavy s kladnou energiou.²¹ Ľahko nahliadneme, že základný stav systému je nemagnetický:

$$\langle S_i^z \rangle = \langle a_i^\dagger a_i \rangle - \frac{1}{2} = \langle c_i^\dagger c_i \rangle - \frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_k \langle c_k^\dagger c_k \rangle - \frac{1}{2} = 0, \quad \langle S_i^+ \rangle = \langle S_i^- \rangle = 0.$$

V termodynamicknej limite $N \rightarrow \infty$, v ktorej budeme odteraz pracovať, máme $k_F = \frac{\pi}{2a}$. Energia základného stavu je $E_0 = \sum_{|k| < k_F} \varepsilon_k = -\frac{1}{\pi} N J$, teda kvantové fluktuácie znižujú energiu oproti klasickej hodnote $E_0 = -\frac{1}{4} N J$.

Excitované stavy v sektore $S_{\text{tot}}^z = 0$

Excitované stavy retiazky XY možno rozdeliť do dvoch skupín. V prvej skupine sú stavy zo sektora $Q = N/2$ s celkovým priemetom spinu $S_{\text{tot}}^z = 0$. Tieto excitácie vzniknú presunom jedného alebo viacerých fermiónov z Fermiho mora do neobsadených stavov, pričom sa vytvoria tzv. časticovo-dierové páry. V tejto skupine dostaneme excitačnú energiu $\Delta E \rightarrow 0$ iba ak častice aj diery sú blízko Fermiho “plochy”. Celková hybnosť takýchto stavov, t.j. stredná hodnota operátora $P_{\text{tot}} = \sum_k \hbar k c_k^\dagger c_k$, je buď $P_{\text{tot}} \approx 0$ alebo $P_{\text{tot}} \approx \pm 2\hbar k_F$.

Excitované stavy v sektore $S_{\text{tot}}^z \neq 0$

Druhou skupinou sú excitované stavy s počtom fermiónov $Q \neq N/2$, a teda s celkovým priemetom spinu $S_{\text{tot}}^z \neq 0$. Analýza týchto stavov je zložitejšia. Napr. po pridání (alebo odobraní) jedného fermiónu k základnému stavu dostaneme $Q = N/2 \pm 1$, teda stav s párnym počtom fermiónov.²² Preto dovoľené

²⁰Používame nedôsledné označenie, ktoré je však v literatúre bežné. Operátor c_j anihiluje fermión v mieste j , kým operátor c_k anihiluje fermión v stave rovinnej vlny s vlnovým vektorom k . Ide teda o dva rôzne operátory. O ktorý z nich ide by malo byť zrejme z kontextu a aj z používaných indexov: i a j označujú body mriežky, k vlnový vektor.

²¹Dá sa ukázať, že optimálny stav s párnym počtom častíc má pre každé konečné N vyššiu energiu, pozri cvičenia.

²²Pripomíname, že N je párne a nedeliteľné 4.

vlňové vektory fermiónov sa oproti ich hodnotám v základnom stave zmenia a budú $k = (2n+1)\pi/(\mathcal{N}a)$, pozri obrázok 2. Základný stav v sektore s $Q = \mathcal{N}/2 \pm 1$ má teda zjavne celkovú hybnosť $P_{\text{tot}} = 0$. Excitované stavy s malými energiami v tomto sektore sú tvorené časticovo-dierovými pármí. Celková hybnosť takýchto stavov je opäť buď $P_{\text{tot}} \approx 0$ alebo $P_{\text{tot}} \approx \pm 2\hbar k_F$.

Po pridaní (alebo odobraní) dvoch fermiónov k základnému stavu dostaneme $Q = \mathcal{N}/2 \pm 2$, teda stav s nepárnym počtom fermiónov, podobne ako základný stav modelu. Celková hybnosť takýchto stavov, pokiaľ ich energie sú malé, je opäť buď $P_{\text{tot}} \approx 0$ alebo $P_{\text{tot}} \approx \pm 2\hbar k_F$.

Kvantová kvapalina spinov

V jednorozmerných systémoch vo všeobecnosti očakávame, že spojitá symetria nemôže byť spontánne narušená ani v základnom stave, t.j. pri teplote $T = 0$. Narušeniu symetrie totiž zabráni kvantové fluktuácie. Výnimkou sú systémy, ktorých parameter usporiadania $\hat{M}$ sa zachováva, $[\hat{M}, H] = 0$, napríklad feromagnetická Heisenbergova reťazka spinov.

Systém spinov pri $T = 0$ bez spontánne narušenej symetrie sa nazýva kvantovou kvapalinou spinov. Špeciálny prípad kvantovej kvapaliny, ktorý sa realizuje v 1D modeli XY, sa nazýva algebraickou kvantovou kvapalinou. Táto kvapalina má (v termodynamicknej limite $\mathcal{N} \rightarrow \infty$) nulovú medzeru v excitačnom spektre a dá sa ukázať, že korelačné funkcie medzi spinmi preto klesajú s mocninou vzdialenosti medzi nimi.

Cvičenia

- 1a) Ukážte, že základný stav modelu XY s $J > 0$ nie je Néelov stav.
- 1b) Ukážte, že základný stav modelu XY s $J < 0$ nie je plne polarizovaný feromagnet.
2. Dokážte komutačné vzťahy pre operátory $a_i, a_j^\dagger$.
3. Dokážte, že Jordanove-Wignerove operátory $c_i, c_j^\dagger$ spĺňajú komutačné vzťahy pre fermióny a overte vyjadrenie H_{XY} pomocou týchto operátorov. Pomôcka: pomocou pôsobenia na báze stavy ukážte, že $a_i^\dagger U_i = a_i^\dagger$ a $U_i a_i^\dagger = -a_i^\dagger$.
4. Ukážte, že na mriežke s $\mathcal{N} = 4l + 2$ bodmi má v sektore s nepárnym Q najnižšiu energiu stav s $Q = \mathcal{N}/2$ a energiou $E = -J/\sin \frac{\pi}{\mathcal{N}a}$. Ďalej ukážte, že všetky stavy s párnymi počtami fermiónov Q majú vyššiu energiu.
5. Ukážte, že voľná energia 1D modelu XY je daná vzťahom

$$F = -\mathcal{N}T \left[\ln 2 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} dx \ln \left(\cosh \frac{J \cos x}{2T} \right) \right].$$

Návod: vypočítajte štatistickú sumu Z pre systém voľných fermiónov c predpokladajúc, že všetky počty fermiónov od 0 do $\mathcal{N}$ sú možné. Nájdite entropiu v limite nízkych a vysokých teplôt.

8 Zovšeobecnená tuhosť

V tejto prednáške zavedieme pojem zovšeobecnenej tuhosti κ ako ďalšej charakteristiky systémov so spontánne narušenou spojitou symetriou. Na príklade klasického modelu XY predvedieme, ako možno tuhosť κ počítat. Napokon model XY vyriešime v tzv. priblížení stredného poľa.

Zovšeobecnená tuhosť

Tuhé látky sú stavy hmoty so spontánne narušenou translačnou a rotačnou symetriou. S narušením týchto spojitých symetrií je asociovaná mechanická tuhosť, ktorú môžeme zjednodušene definovať nasledovne. Skúmame povedzme tyč dĺžky L z tuhej látky. Jeden koniec tyče nech je pevne ukotvený. Druhý koniec tyče skrúťme o uhol α okolo osi tyče. Očakávame (pozri napr. I.9), že hustota voľnej energie tyče $f(\alpha)$ pri takejto deformácii narastie oproti hustote voľnej energie nedeformovanej tyče $f(0)$ nasledovne: $f(\alpha) = f(0) + \frac{1}{2}\kappa_{\text{solid}}(\alpha/L)^2$. Konštantu κ nazývame mechanickou tuhosťou. Na druhej strane, skrútenie koncov stĺpca toho istého materiálu v kvapalnom stave nevyvoláva nárast hustoty voľnej energie tohto stĺpca, teda $\kappa_{\text{liquid}} = 0$. Existencia tuhosti teda nie je vlastnosťou pohybových rovníc pre atómy, ale termodynamického stavu. Anderson zdôrazňuje: “*We are so accustomed to the rigidity property (of solids) that we don’t accept its almost miraculous nature, that it is an **emergent property** not contained in the simple laws of physics, although it is a consequence of them.*”

Dôsledkom existencie konečnej mechanickej tuhosti tuhých látok je stálosť ich tvaru.²³ Ak spo-

²³Na rozumne dlhých časových škálach, pozri napr. I.1. Vďaka nenulovosti κ môžeme dokonca hovoriť o ideálne tuhých telesách, v ktorých berieme $\kappa \rightarrow \infty$.

mínanú tyč krútime len na jednom konci a pokiaľ bude jej druhý koniec voľný, bude sa tento krútiť rovnako ako koniec, na ktorý pôsobíme. Druhý koniec bude môcť silovo pôsobiť na iné telesá. Anderson hovorí o “bezdisipatívnom transporte sily v tuhých telesách”.

Pojem mechanickej tuhosti možno zovšeobecniť na prípad ľubovoľného systému so spontánne narušenou spojitou symetriou. Existencia zovšeobecnenej tuhosti je dôsledkom prirodzeného, ale netriviálneho predpokladu, že (voľná) energia systému s narušenou symetriou je minimalizovaná, keď symetria je narušená rovnakým spôsobom v celej vzorke. Citlivosť hustoty voľnej energie na vhodne zvolenú okrajovú podmienku nazveme zovšeobecnenou tuhosťou.

Tuhosť klasického modelu XY

V tomto odstavci ukážeme, ako možno počítať tuhosť klasického feromagnetického modelu XY v 3D.²⁴ Skúmame vzorku tvaru kocky s $\mathcal{N} = N^3$ bodmi. Nech $\mathbf{R} = (k, l, m)$, kde $k = 1, \dots, N$ atď., čísľuje mriežkové body a nech $\theta_{\mathbf{R}}$ je uhol natočenia spinu v mriežkovom bode $\mathbf{R}$ voči zvolenému smeru v (spinovej) rovine XY. Hamiltonián H_{XY} zväzuje skúmaných N^3 spinov navzájom, ako aj so spinmi mimo vzorky. Pre spiny na krajoch vzorky preto potrebujeme vedieť hodnoty $\theta_{\mathbf{R}}$ vo fiktívnych bodoch mimo vzorky, ktoré s nimi susedia. Pre body mimo našej mriežky v smeroch y a z tieto hodnoty predpíšeme pomocou periodických okrajových podmienok a v smere x predpíšeme okrajovú podmienku, ktorá je analógom skrútenia tyče o uhol α v príklade so železnou tyčou:

$$\theta_{k+N,l,m} = \theta_{k,l,m} + \alpha, \quad \theta_{k,l+N,m} = \theta_{k,l,m}, \quad \theta_{k,l,m+N} = \theta_{k,l,m}.$$

Ak prejdeme od poľa $\theta_{\mathbf{R}}$ k poľu $\phi_{\mathbf{R}}$ tak, že platí $\theta_{\mathbf{R}} = \phi_{\mathbf{R}} + \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}$ pričom $\mathbf{q} = (q, 0, 0)$ a $q = \alpha/N$, potom pole $\phi_{\mathbf{R}}$ spĺňa obvyklé periodické okrajové podmienky vo všetkých smeroch. Všimnime si, že v tomto odstavci považujeme za bezrozmerné ako polohy $\mathbf{R}$, tak aj vlnové vektory $\mathbf{q}$. Hamiltonián $H(q)$ deformovaného systému má tvar

$$H(q) = -J \sum_{\langle \mathbf{R}\mathbf{R}' \rangle} \cos [\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}'} + \mathbf{q} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')]]$$

a k nemu príslušná voľná energia $F(q) = -T \ln Z(q)$ je definovaná štatistickou sumou

$$Z(q) = \int \mathcal{D}\phi e^{-H(q)/T}, \quad \int \mathcal{D}\phi \equiv \prod_{\mathbf{R}} \int_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{R}}.$$

Naším cieľom je nájsť rozvoj voľnej energie deformovaného systému $F(q)$ podľa mocnín q do druhého rádu včítane. Očakávame, že dostaneme výraz

$$F(q) = F_0 + \frac{1}{2} \kappa q^2 \mathcal{N}, \quad (37)$$

kde F_0 je voľná energia nedeformovaného systému a člen úmerný prvej mocnine q v rozvoji absentuje. Koeficient κ (s rozmerom energia) budeme interpretovať ako zovšeobecnú tuhosť modelu XY.

Začneme rozvojom hamiltoniánu podľa mocnín q do druhého rádu, $H(q) = H_0 + H_1 + H_2$, kde

$$H_0 = -J \sum_{\langle \mathbf{R}\mathbf{R}' \rangle} \cos [\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}'}], \quad H_1 = Jq \sum_{\mathbf{R}} \sin [\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}-\hat{x}}], \quad H_2 = \frac{Jq^2}{2} \sum_{\mathbf{R}} \cos [\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}-\hat{x}}].$$

Všimnime si, že H_0 popisuje nedeformovaný systém a obsahuje sumy cez všetky linky mriežky, kým korekčné členy prvého a druhého rádu H_1 a H_2 obsahujú iba príspevky liniek v smere deformácie.

Zavedme ďalej štatistickú sumu a stredovanie pre nedeformovaný systém s hamiltoniánom H_0 :

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\phi e^{-H_0/T}, \quad \langle X(\phi) \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi e^{-H_0/T} X(\phi).$$

²⁴Spinové modely možno odvodiť ako efektívne modely pre systémy elektrónov. Výsledkom tohto odvodovania sú kvantové modely, t.j. jednotlivé komponenty operátorov $\mathbf{S}_i$ navzájom nekomutujú. V literatúre sa však často uvažujú aj tzv. klasické spinové modely, v ktorých $\mathbf{S}_i$ chápeme ako klasické vektory.

Potom štatistickú sumu deformovaného systému môžeme do druhého rádu podľa q písať nasledovne:

$$Z(q) = \int \mathcal{D}\phi e^{-H_0/T} e^{-H_1/T} e^{-H_2/T} = Z_0 \langle e^{-H_1/T} e^{-H_2/T} \rangle_0 \approx Z_0 \left\langle 1 - \frac{H_1}{T} + \frac{H_1^2}{2T^2} - \frac{H_2}{T} \right\rangle_0.$$

Štatistickú sumu deformovaného systému sme teda vyjadrili pomocou stredných hodnôt v nedeformovanom systéme s hamiltoniánom H_0 . V takomto systéme je však energia konfigurácie s rozdielmi fáz $\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}'} = A_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}$ v susedných bodoch $\mathbf{R}$ a $\mathbf{R}'$ rovnaká ako energia konfigurácie s rozdielmi fáz $\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}'} = -A_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}$. Preto takáto dvojica konfigurácií je rovnako pravdepodobná. Odtiaľto potom vyplýva, že lineárny člen v rozvoji štatistickej sumy $Z(q)$ vypadne, $\langle H_1 \rangle_0 = 0$. Pre voľnú energiu $F(q)$ preto dostávame nasledovný rozvoj do druhého rádu podľa q :

$$F(q) = -T \ln Z_0 - T \ln \left\langle 1 + \frac{H_1^2}{2T^2} - \frac{H_2}{T} \right\rangle_0 = F_0 + \langle H_2 \rangle_0 - \frac{1}{2T} \langle H_1^2 \rangle_0.$$

Tento výsledok má očakávaný tvar (37), t.j. neobsahuje člen úmerný q . Pre zovšeobecnenú tuhosť κ naviac dostávame explicitný výraz:

$$\kappa = \frac{J}{\mathcal{N}} \left\langle \sum_{\mathbf{R}} \cos(\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}-\hat{x}}) \right\rangle_0 - \frac{J^2}{T\mathcal{N}} \left\langle \left[\sum_{\mathbf{R}} \sin(\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}-\hat{x}}) \right]^2 \right\rangle_0. \quad (38)$$

Vzťah (38) demonštruje, že tuhosť κ (ktorá popisuje, nakoľko sa systém bráni zmene okrajových podmienok a možno ju chápať ako tzv. funkciu odozvy) možno určiť štúdiom štatistických vlastností neporušeného systému s hamiltoniánom H_0 . Tento výsledok má všeobecnú platnosť: aj v kvantových systémoch možno funkcie odozvy určiť štúdiom rovnovážnych korelácií, pozri IV.3.

Štúdium teplotnej závislosti κ začneme pozorovaním, že prvý člen vo výraze (38) možno na D -rozmernej hyperkubickej mriežke zapísať pomocou (teplotne závislej) strednej hodnoty energie $E(T)$ modelu XY ako $-\frac{1}{D\mathcal{N}}E(T)$. V limite nízkych teplôt, kedy polia $\phi_{\mathbf{R}}$ vykonávajú malé tepelné kmity okolo spontánne polarizovaného stavu, možno hamiltonián modelu XY aproximovať nasledovným klasickým harmonickým modelom,

$$H_{\text{harm}} = J \sum_{\langle \mathbf{R}\mathbf{R}' \rangle} \left[-1 + \frac{1}{2}(\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}'})^2 \right].$$

Energia základného stavu na D -rozmernej hyperkubickej mriežke je $E = -D\mathcal{N}J$. Keďže model H_{harm} obsahuje $\mathcal{N}$ klasických harmonických stupňov voľnosti, podľa ekvipartičnej vety jeho energia pri konečnej teplote bude $E(T) = -D\mathcal{N}J + \frac{1}{2}\mathcal{N}T$. Príspevok prvého člena vo výraze (38) teda bude $J - \frac{1}{2D}T$. Čo sa týka druhého člena vo výraze (38), v harmonickom priblížení môžeme písať $\sum_{\mathbf{R}} \sin(\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}-\hat{x}}) = \sum_{\mathbf{R}} (\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}-\hat{x}}) = 0$, pričom posledná rovnosť je dôsledkom periodických okrajových podmienok. V limite nízkych teplôt teda očakávame, že tuhosť s rastom teploty klesá podľa vzťahu

$$\kappa(T) = J - \frac{1}{2D}T. \quad (39)$$

Numerické simulácie trojrozmerného modelu XY ukazujú,²⁵ že pri ďalšom raste teploty sa pokles tuhosti zrýchľuje, až napokon pri kritickej teplote $T_c \approx 2.2J$ tuhosť spojitou vymizne. Pri kritickej teplote teda má funkcia $\kappa(T)$ singularitu: pre všetky teploty $T > T_c$ je tuhosť striktne nulová v súlade s očakávaniami pre kvapalinu spinov, kým pre $T < T_c$ je naopak tuhosť konečná.

Klasický model XY v priblížení stredného poľa

V tomto odstavci skonštruujeme najjednoduchšiu približnú teóriu pre klasický D -rozmerný model XY pri konečnej teplote. Budeme predpokladať, že pravdepodobnosti natočenia uhlov v rôznych bodoch mriežky sú navzájom nezávislé a pravdepodobnosť konfigurácie $\{\phi_{\mathbf{R}}\}$ je teda súčinom pravdepodobností $P(\phi_{\mathbf{R}})$ v jednotlivých bodoch mriežky, $\mathcal{P}(\{\phi_{\mathbf{R}}\}) = \prod_{\mathbf{R}} P(\phi_{\mathbf{R}})$. Optimálnu funkciu $P(\phi)$ nájdeme minimalizáciou voľnej energie

$$F = \langle H \rangle - T \langle S \rangle,$$

²⁵Pozri napr. Y.H. Li and S. Teitel, Phys. Rev. B **40**, 9122 (1989).

kde prvý člen predstavuje strednú hodnotu energie počítanej pre rozdelenie spinov $\mathcal{P}(\{\phi_{\mathbf{R}}\})$,

$$\langle H \rangle = -\mathcal{N}DJ \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_2 P(\phi_1)P(\phi_2) \cos(\phi_1 - \phi_2).$$

Druhý člen predstavuje entropiu rozdelenia spinov $\mathcal{P}(\{\phi_{\mathbf{R}}\})$,

$$\langle S \rangle = -\mathcal{N} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi P(\phi) \ln P(\phi).$$

Dá sa ukázať,²⁶ že presná voľná energia modelu XY spĺňa nerovnosť $F_{\text{exact}} \leq F$, čiže máme do činenia s variačnou úlohou so zatiaľ neznámou variačnou funkciou $P(\phi)$.

Minimalizácia voľnej energie F podľa $P(\chi)$ pri zohľadnení väzby $\int_{-\pi}^{\pi} d\phi P(\phi) = 1$ popísanej Lagrangeovým multiplikátorom λ dáva nasledovnú rovnicu pre funkciu $P(\chi)$:

$$-2DJ \int_{-\pi}^{\pi} d\phi P(\phi) \cos(\chi - \phi) + T \ln P(\chi) + T - \lambda = 0. \quad (40)$$

V ďalšom výklade budeme predpokladať, že vo fáze s narušenou symetriou sú spiny natočené v smere $\phi = 0$. Preto je prirodzené očakávať, že platí $P(\phi) = P(-\phi)$. O chvíľu uvidíme, že takúto symetriu má aj systém v stave bez narušenej symetrie. Parameter usporiadania pri konečnej teplote, t.j. priemerné natočenie spinov do smeru $\phi = 0$, je očividne popísaný vzťahom

$$m = \int_{-\pi}^{\pi} d\phi P(\phi) \cos \phi. \quad (41)$$

Po zohľadnení symetrie funkcie $P(\phi)$ ľahko nahliadneme, že rovnica (40) má nasledovné riešenie

$$P(\chi) = \text{const} \times e^{a \cos \chi}, \quad a = \frac{2DJm}{T}, \quad (42)$$

kde konštantu možno ľahko dopočítať z normalizačnej podmienky pre $P(\chi)$. Dosadením výsledku (42) do výrazu (41) napokon dostaneme tzv. self-konzistentnú rovnicu pre parameter usporiadania m ,

$$m = \frac{I_1(a)}{I_0(a)}, \quad (43)$$

kde $I_n(a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \cos(n\phi) e^{a \cos \phi}$ sú tzv. modifikované Besselove funkcie.

V limite vysokých teplôt je bezrozmerný parameter a malý a pre modifikované Besselove funkcie platia vzťahy $I_0(a) = 1 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \dots$ a $I_1(a) = \left(\frac{a}{2}\right) + \frac{1}{2} \left(\frac{a}{2}\right)^3 + \dots$. Rovnica (43) sa vtedy zredukuje na tvar $m = DJm/T$. Pre teploty $T > DJ$ je jediným riešením tejto rovnice $m = 0$, t.j. riešenie bez narušenia symetrie. Pod teplotou $T_c = DJ$ má rovnica (43) aj riešenia s nenulovou hodnotou parametra usporiadania m . Dá sa ukázať (pozri cvičenia), že voľná energia týchto riešení je nižšia než pre $m = 0$. Preto T_c je kritickou teplotou modelu XY.

Priblíženie, ktoré sme použili pri riešení modelu XY, sa nazýva priblížením stredného poľa. Rozdelenie pravdepodobností (42) pre natočenie spinu totiž dostaneme, ak na spin pôsobí magnetické pole, ktoré je orientované v smere $\phi = 0$ a jeho veľkosť je úmerná m . Toto pole je v našom prípade priemerným výsledkom pôsobení okolitých spinov, odtiaľ názov stredné pole. Čím silnejšie stredné pole pôsobí, tým bude priemerné natočenie spinov do smeru $\phi = 0$ (t.j. m) väčšie. Rovnica (43) nastavuje hodnotu m tak, aby veľkosť stredného poľa bola konzistentná s priemerným natočením spinov.

Cvičenia

1. Riešením rovnice (43) ukážte, že pri teplotách T tesne pod kritickou teplotou T_c platí $a^2 = 8(T_c - T)/T_c$, čiže $m \propto (T_c - T)^{1/2}$. Takáto teplotná závislosť parametra usporiadania je charakteristická pre teóriu stredného poľa.
2. Ukážte, že voľná energia na bod mriežky $f = F/\mathcal{N}$ pre rozdelenie (42) má tvar

$$f(a) = -T_c \left[\frac{I_1(a)}{I_0(a)} \right]^2 - T \left[\ln(2\pi I_0(a)) - \frac{a I_1(a)}{I_0(a)} \right].$$

²⁶Pozri IV.5.

Presvedčte sa, že minimalizácia $f(a)$ podľa a vedie k self-konzistentnej rovnici (43). Ďalej ukážte, že tesne pod kritickou teplotou T_c , kedy treba očakávať, že parameter a je malý, Taylorovým rozvojom $f(a)$ dostaneme tzv. Landauov rozvoj

$$f_L(a) = -T \ln(2\pi) + \frac{T - T_c}{4} a^2 + \frac{T_c}{64} a^4.$$

3. Ukážte, že pre $T < T_c$ funkcia $f_L(a)$ nadobúda minimum pre hodnotu a uvedenú v cvičení 1, kým v bode $a = 0$ (nemagnetické riešenie) funkcia $f_L(a)$ nadobúda lokálne maximum. Ukážte, že (v priblížení stredného poľa) voľná energia modelu XY pre $T > T_c$ je $f = -T \ln(2\pi)$, kým pre teploty tesne pod kritickou teplotou platí $f = -T \ln(2\pi) - (T_c - T)^2 / T_c$. Na základe týchto výsledkov nájdite predpovede teórie stredného poľa pre teplotnú závislosť entropie, merného tepla a vnútornej energie.

4. Numerickým riešením rovnice (43) nájdite teplotnú závislosť parametra usporiadania m .

5.* V priblížení stredného poľa nájdite teplotnú závislosť tuhosti fázy. Návod: počítajte voľnú energiu deformovaného systému $F(q)$ a ukážte, že $\kappa = Jm^2$. Ukážte, že naivný výpočet podľa (38) dá nefyzikálny výsledok.

6.* Pri teplote $T = 0$ vypočítajte tuhosť κ (kvantovej) retiazky spinov $S = 1/2$ s feromagnetickým Heisenbergovým hamiltoniánom $H = -J \sum_n \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1}$. Návod: skúmajte homogénne deformovaný stav $|\psi\rangle = \left[\prod_n e^{i\delta S_n^x} \right] |\uparrow_1, \uparrow_2, \dots, \uparrow_N\rangle$. Predpokladajte, že $\delta \ll 1$ a vypočítajte energiu do rádu δ^2 : $\frac{1}{N} \langle \psi | H | \psi \rangle = -\frac{J}{4} + \frac{1}{2} \kappa \delta^2$. Použite tiež

$$\langle \uparrow_n, \uparrow_{n+1} | e^{i\delta S_n^x} \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} e^{-i\delta S_n^x} | \uparrow_n, \uparrow_{n+1} \rangle \approx \langle \uparrow_n, \uparrow_{n+1} | (1 + i\delta S_n^x - \delta^2/8) \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} (1 - i\delta S_n^x - \delta^2/8) | \uparrow_n, \uparrow_{n+1} \rangle.$$

9 Prechod Kosterlitz-Thoulessa

V tejto prednáške ukážeme na príklade 2D verzie klasického modelu XY, že zovšeobecnená tuhosť môže byť nenulová aj v systémoch bez spontánneho narušenia symetrie. V tomto prípade je nízkoteplotná fáza s konečnou tuhosťou oddelená od vysokoteplotnej fázy s nulovou tuhosťou novým typom fázového prechodu, tzv. Kosterlitzovým-Thoulesovým prechodom.

Tuhosť fázy dvojrozmerného modelu XY

Model XY má spojitú symetriu a dá sa ukázať, že aj preň platí Hohenbergova-Merminova-Wagnerova veta. To však znamená, že magnetizácia dvojrozmerného modelu XY musí byť pri konečnej teplote nulová. Mohlo by sa zdať, že aj zovšeobecnená tuhosť potom musí byť nulová.

Na prekvapenie sa však ukazuje, že tuhosť dvojrozmerného modelu XY je pri dostatočne nízkych teplotách konečná, napriek tomu, že spiny nie sú zamrznuté. Zdôvodnenie je nasledovné. V prednáške 5 sme videli, že spontánne narušenie symetrie je znemožnené divergenciou počtu dlhovlnných excitácií s nízkou energiou. Takéto excitácie však takmer nemenia relatívny uhol medzi susednými spinmi, preto sa dá očakávať, že výraz (38) pre tuhosť možno vyhodnotiť v rámci harmonického modelu H_{harm} . Numerické simulácie naozaj potvrdzujú, že tuhosť modelu XY je pri dostatočne nízkych teplotách konečná a dobre popísaná aproximatívnym vzťahom (39) s $D = 2$.

Na druhej strane, v limite vysokých teplôt by tuhosť κ mala byť identicky nulová, keďže aj v trojrozmerných systémoch je tomu tak. To však znamená, že opäť musí existovať teplota T_c , pri ktorej má funkcia $\kappa(T)$ singularitu. Na rozdiel od trojrozmerného modelu, táto singularita však nemôže súvisieť so spontánnym narušením symetrie pod teplotou T_c , preto fázový prechod musí mať inú podstatu. Vo zvyšku tejto prednášky kvalitatívne popíšeme tento nový typ fázového prechodu, tzv. Kosterlitz-Thoulesov prechod.

Víry a antivíry

Podstatnú úlohu pri Kosterlitz-Thoulesovom prechode zohrávajú tzv. víry a antivíry, pozri obrázok 3. Ide o konfigurácie spinov s jednou singulárnou elementárnou bunkou. Pozdĺž ľubovoľnej uzavretej čiary C obopínajúcej túto bunku bude platiť $\sum_C \Delta\theta = 2\pi q$, kde $q = \pm 1$ a $\Delta\theta = \theta_i - \theta_j$ je prírastok fázy na elementárnej linke medzi bodmi i a j .²⁷ V princípe by prichádzali do úvahy aj iné celočíselné hodnoty q , dá sa však ukázať (pozri cvičenia), že takéto excitácie nie sú v modeli XY stabilné a rozpadnú sa na víry alebo antivíry s $|q| = 1$. V prednáške 20 ukážeme, že (anti)víry sú špeciálnym prípadom tzv. topologických defektov. Ich energiu odhadneme aproximovaním harmonického modelu

²⁷Prírastok fázy je potrebné ohraničiť na pevne zvolený interval dĺžky 2π . Prípustná je napr. voľba $-\pi \leq \Delta\theta < \pi$.

H_{harm} spojitým modelom

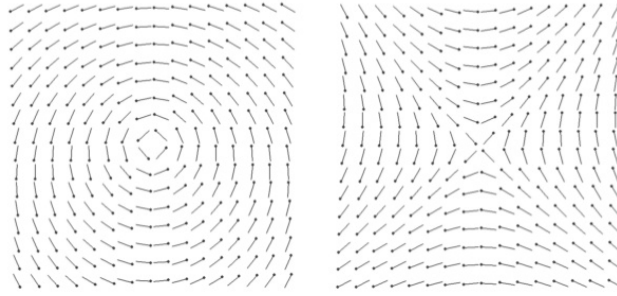
$$H = \frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} (\nabla\theta)^2. \quad (44)$$

Stojí pritom za zmienku, že mriežková konštanta a do výrazu (44) nevstúpi. V polárnych súradniciach so stredom v strede (anti)víru platí $|\nabla\theta| = q/r$, preto pre jeho energiu dostávame odhad

$$E_v \approx \pi J q^2 \int_a^R \frac{dr}{r} = \pi J \ln \frac{R}{a},$$

kde R je lineárny rozmer mriežky. Mohlo by sa zdať, že vďaka divergentnosti energie E_v v limite $R \rightarrow \infty$ sú víry a antivíry neprípustnými konfiguráciami. Avšak existuje zhruba R^2/a^2 možných polôh stredov (anti)vírov, čiže entropia (anti)vírových konfigurácií je $S_v = \ln(R^2/a^2)$. Preto pri teplote T bude prírastok voľnej energie po pridaní (anti)víru $\delta F_v = E_v - TS_v$. To znamená, že pri dostatočne vysokej teplote bude $\delta F_v < 0$ a systém bude spontánne generovať voľné víry a antivíry. Kritickú teplotu T_c možno zhruba odhadnúť z podmienky $\delta F_v = 0$, odkiaľ dostaneme $T_c \approx \frac{\pi}{2} J$.

Ako uvidíme o chvíľu, aj pri nízkych teplotách budú v systéme prítomné víry a antivíry, budú však viazané do vír-antivírových párov. Vázobná energia takýchto párov s rastom teploty klesá a v bode prechodu, t.j. pri $T = T_c$, sa vynuluje.



Obr. 3: Vľavo: príklad vírovej konfigurácie. Vpravo: príklad antivírovej konfigurácie. (J. Imriška, bakalárska práca, FMFI UK 2009).

Nábojová analógia

V spojitom modeli (44) je energia (anti)víru určovaná gradientom $\nabla\theta = (\partial_x\theta, \partial_y\theta, 0)$. Ak teraz pre (anti)vír s “nábojom” q zavedieme “potenciál” $\varphi(\mathbf{r}) = -q \ln(|\mathbf{r}|/a)$ s gradientom $\nabla\varphi = -q\mathbf{r}/r^2$, ľahko nahliadneme, že vektory $\nabla\varphi$ a $\nabla\theta$ sú rovnako dlhé a navzájom kolmé:

$$\nabla\varphi = \hat{z} \times \nabla\theta,$$

kde $\hat{z} = (0, 0, 1)$ je jednotkový vektor kolmý na rovinu XY. V ďalšom výklade využijeme, že platí

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = -2\pi q \delta(\mathbf{r}), \quad (45)$$

kde $\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)$ je dvojrozmerná delta funkcia. Inými slovami, $2\pi q \delta(\mathbf{r})$ hrá rolu nábojovej hustoty a rovnica (45) je dvojrozmernou Laplaceovou rovnicou pre potenciál $\varphi(\mathbf{r})$.²⁸ Systém vírov a antivírov teda možno modelovať ako sadu nábojov. To nám umožní jednoducho vypočítať energiu systému.

Skúmajme vzorku s (anti)vírm s nábojmi q_i v miestach $\mathbf{r}_i$. Budeme žiadať splnenie periodických okrajových podmienok. Dá sa ukázať (pozri cvičenia), že v takomto prípade vzorka musí obsahovať rovnaký počet vírov a antivírov, t.j. $\sum_i q_i = 0$. Celkový potenciál takejto konfigurácie je $\varphi(\mathbf{r}) = -\sum_i q_i \ln(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|/a)$ a jej energia je

$$H = \frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} (\nabla\theta)^2 = \frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} \nabla\varphi \cdot \nabla\varphi = \frac{J}{2} \oint_{\Sigma} d\mathbf{S} \cdot \varphi \nabla\varphi - \frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} \varphi \Delta\varphi,$$

²⁸Naozaj: explicitným výpočtom ľahko overíme, že ak $\mathbf{r} \neq 0$, potom pre funkciu $\varphi(\mathbf{r})$ platí $\Delta\varphi(\mathbf{r}) = 0$. Zostáva teda iba overiť správanie funkcie $\Delta\varphi(\mathbf{r})$ v okolí bodu $\mathbf{r} = 0$. Za tým účelom skúmame povrchový integrál $\oint_C d\mathbf{S} \cdot \nabla\varphi$ po kruhovej dráhe C so stredom v bode $\mathbf{r} = 0$, kde element $d\mathbf{S}$ je orientovaný v smere vonkajšej normály k C . Na jednej strane, dosadením explicitného výrazu pre $\nabla\varphi$ dostaneme $\oint_C d\mathbf{S} \cdot \nabla\varphi = -2\pi q$. Na druhej strane, použitím Gaussovej vety môžeme písať $\oint_C d\mathbf{S} \cdot \nabla\varphi = \int d^2\mathbf{r} \Delta\varphi$, čo vďaka rovnici (45) reprodukuje priamy výpočet. Tým je dôkaz rovnice (45) ukončený.

kde sme v prvom kroku využili, že $(\nabla\theta)^2 = (\nabla\varphi)^2$. V druhom kroku sme využili identitu $\nabla\varphi \cdot \nabla\varphi = \nabla \cdot (\varphi \nabla\varphi) - \varphi \Delta\varphi$ a prvý člen sme integrovali pomocou (dvojrôzmernej) Gaussovej vety, pričom povrch vzorky sme označili Σ a element $d\mathbf{S}$ je orientovaný v smere vonkajšej normály k Σ . Tento člen možno na veľkých mriežkach zanedbať, pozri cvičenia. Na druhej strane, zovšeobecnením rovnice (45) na prípad rozloženia nábojov dostaneme $\Delta\varphi(\mathbf{r}) = -2\pi \sum_i q_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, preto

$$H = \pi J \sum_i \varphi_i q_i = -\pi J \sum_{ij} q_i q_j \ln \frac{|\mathbf{r}_{ij}|}{a} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} q_i q_j + \mu \sum_i q_i^2, \quad (46)$$

kde $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ a $V_{ij} = 2\pi J \ln(a/|\mathbf{r}_{ij}|)$. V poslednom kroku sme energiu nábojov prepísali ako súčet interakčnej energie medzi dvojicami nábojov (prvý člen, $i \neq j$) a energie jednotlivých vírov (druhý člen, $i = j$). Stojí tiež za zmienku, že príspevky $i = j$ síce formálne divergujú, ale skutočná energia μ musí byť konečná aj na nekonečnej mriežke (pozri cvičenia).

V nábojovej analógii teda možno systém vírov a antivírov popísať ako plyn nábojov $q = \pm 1$ interagujúcich prostredníctvom tzv. 2D coulombovského potenciálu V_{ij} . Sila $\mathbf{F}_{ij}$, ktorou pôsobí náboj j na náboj i , je

$$\mathbf{F}_{ij} = -q_i q_j \frac{\partial V_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i} = 2\pi J q_i q_j \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^2}. \quad (47)$$

Opačné náboje sa teda priťahujú a rovnaké náboje sa odpudzujú. Energia jednotlivých nábojov je μ a celkový náboj je nulový, $\sum_i q_i = 0$.

Fázový prechod v nábojovej analógii

Keďže energia (46) nábojových konfigurácií je konečná, pri akejkoľvek konečnej teplote bude v systéme prítomná konečná hustota vírov a antivírov. Pri nízkych teplotách však budú dominantne zastúpené iba konfigurácie s dipólmi - dvojicami opačných nábojov ležiacich blízko seba. Takéto konfigurácie pripomínajú rozdelenie náboja, ktoré očakávame v dielektrikách pri konečných teplotách, a preto nízkoteplotnú fázu nazývame aj *dielektrickou fázou*.

S rastom teploty koncentrácia tepelne excitovaných dipólov rastie. Interakcia medzi nábojmi i a j vo vzdialenosti $\mathbf{r}_{ij}$ však potom nemá jednoduchý coulombovský tvar V_{ij} , ale musí byť slabšia, pretože ostatné excitované dipóly ju budú čiastočne tieniť. Slabšia interakcia však znamená ďalší nárast koncentrácie dipólov, ktorý zas spôsobí dodatočný rast tienenia. Úlohu o tepelných vlastnostiach problému (46) je teda potrebné riešiť self-konzistentne.

Jedným z dôsledkov zvyšovania teploty je, že náboje tvoriace dipól sa môžu nachádzať v čoraz väčšej relatívnej vzdialenosti. Dá sa ukázať, že pri teplote T_c táto vzdialenosť diverguje, teda páry $q = 1$ a $q = -1$ prestanú byť viazané a začnú sa voľne pohybovať cez systém. Inými slovami, dielektrická fáza sa stane nestabilnou voči *kovovej fáze*. Fyzika tohto prechodu je podobná Mottovmu prechodu kov-izolant v dopovanom polovodiči, ktorý sme skúmali v II.14 a ktorý sme v II.18 interpretovali ako polarizačnú katastrofu.

Tuhosť fázy a Kosterlitzov-Thoulessov prechod

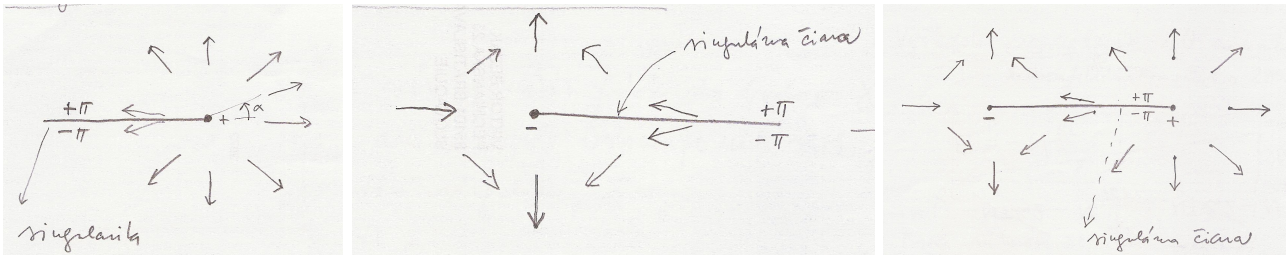
Silu (47), ktorou pôsobí náboj j na náboj i , možno zapísať v tvare $\mathbf{F}_{ij} = -2\pi J q_i \nabla\varphi_j$, kde φ_j je potenciál budený nábojom j v mieste i . Pripomíname, že platí $\nabla\varphi_j = \hat{z} \times \nabla\theta_j$, kde $\nabla\theta_j$ je gradient fázy v mieste i generovaný vírom j . Preto $\mathbf{F}_{ij} = J \nabla\theta_j \times \mathbf{Q}_i$, kde vír v mieste i sme popísali vektorom $\mathbf{Q}_i = (0, 0, 2\pi q_i)$. Silu $\mathbf{F}_{ij}$ teda možno interpretovať ako interakciu (anti)víru i s gradientom fázy $\nabla\theta_j$. Avšak táto sila by nemala závisieť od zdroja gradientu fázy. Silu $\mathbf{F}$ pôsobiacu na (anti)vír s nábojom $q = \pm 1$ popísaný vektorom $\mathbf{Q} = (0, 0, 2\pi q)$ preto musí byť možné zapísať (aspoň pre malé $\nabla\theta$) vo všeobecnejšom tvare

$$\mathbf{F} = J \nabla\theta \times \mathbf{Q}, \quad (48)$$

$\nabla\theta$ je gradient fázy v mieste víru generovaný aj inými zdrojmi ako študovaný (anti)vír.

Pre náš ďalší výklad je dôležité pozorovanie, že v prítomnosti (anti)vírov obsahuje pole uhlov $\theta(\mathbf{r})$ singulárne čiary, pozdĺž ktorých sa fáza mení o $\Delta\theta = \pm 2\pi$, pozri obrázok 4. V konfiguráciách s nulovým celkovým nábojom $\sum_i q_i = 0$ singulárne čiary začínajú vo víroch a končia v antivíroch.

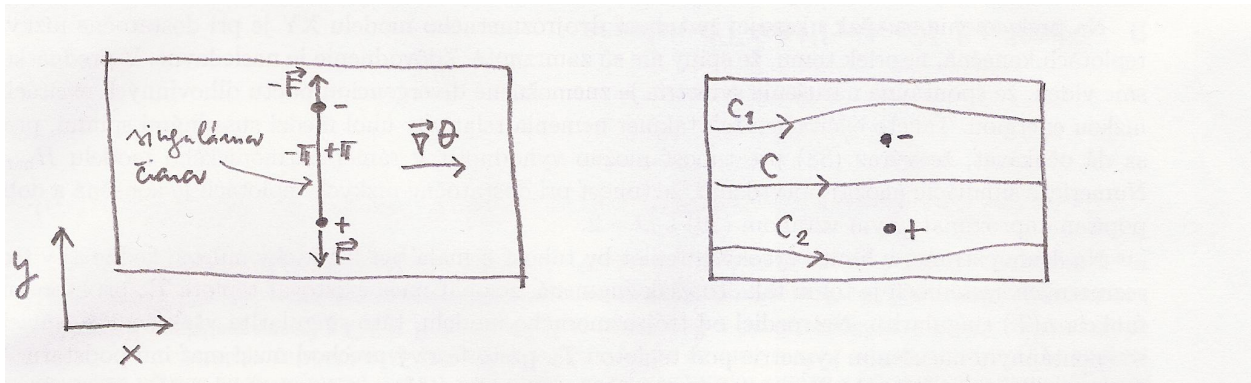
Pri výpočte tuhosti fázy na vzorku zvonku aplikujeme (malý) konštantný gradient fázy $\nabla\theta$ a skúmame ním spôsobenú zmenu voľnej energie vzorky δF . Predpokladajme, že vo vzorke je prítomná



Obr. 4: Ak pole uhlov obmedzíme na interval $-\pi \leq \theta < \pi$, potom v konfiguráciách s (anti)vírm existujú singulárne čiary, naprieč ktorými je rozdiel susedných uhlov $\Delta\theta = \pm 2\pi$. Vľavo: vír. V strede: antivír. Vpravo: pár vír-antivír.

jedna dvojica vír-antivír, pozri obrázok 5. Pozdĺž dráh C_1 a C_2 , ktoré nepretínajú spojnicu víru a antivíru, je rozdiel fáz medzi ľavým a pravým koncom vzorky rovnaký, $\int_{C_1} d\mathbf{r} \cdot \nabla\theta = \int_{C_2} d\mathbf{r} \cdot \nabla\theta = \Delta\theta$, kým pre dráhu C na obrázku 5, ktorá túto spojnicu pretína, platí $\int_C d\mathbf{r} \cdot \nabla\theta = \Delta\theta - 2\pi$, pretože pre dráhu obopínajúcu vír musí platiť $\int_{C_2} d\mathbf{r} \cdot \nabla\theta - \int_{C_1} d\mathbf{r} \cdot \nabla\theta = 2\pi$.

V kovovej fáze sú (anti)víry voľne pohyblivé. Gradient $\nabla\theta$ v smere osi x preto vytláča vír na dolný okraj vzorky a antivír na horný okraj. V závislosti od okrajových podmienok v smere osi y ostanú (anti)víry uväznené na kraji vzorky, alebo z nej dokonca budú úplne vytlačené. Výsledným efektom tohto procesu je, že pozdĺž všetkých dráh vo vzorke sa aplikovaný rozdiel fáz na koncoch vzorky zníži o 2π . Podobné procesy (tzv. prešmyknutie fázy o 2π) pobežia dovtedy, kým sa aplikovaný rozdiel fáz efektívne nevynuluje. Preto je zrejmé, že v kovovej fáze $\delta F = 0$ a tuhosť je nulová.



Obr. 5: Vľavo: vzorka s párom vír-antivír so zvonku aplikovaným gradientom fázy $\nabla\theta$, ktorý v smere osi x vytvára rozdiel fáz $\Delta\theta$ medzi koncami vzorky. Sily (48) vytláčajú vír aj antivír k okrajom vzorky. Vpravo: dráhy C_1 , C_2 a C popisované v texte.

Na druhej strane, v dielektrickej fáze na každý dipól pôsobí dvojica síl $\mathbf{F}$ a $-\mathbf{F}$, ktorá môže dipól iba natočiť a/alebo deformovať, nie však roztrhnúť. V tomto prípade k efektívnemu vynulovaniu δF neprichádza a tuhosť zostane konečnou aj po zohľadnení vírových excitácií. Neočakávaným výsledkom je, že v bode prechodu T_c sa tuhosť mení skokom z konečnej hodnoty $\kappa_c = \frac{2}{\pi}T_c$ v dielektrickej fáze na nulovú hodnotu v kovovej fáze.

Cvičenia

1. Ukážte, že pre čiaru C obopínajúcu systém (anti)vírov s nábojmi q_i platí $\sum_C \Delta\theta = 2\pi \sum_i q_i$.
2. Ukážte, že v systéme s periodickými okrajovými podmienkami platí $\sum_\Sigma \Delta\theta = 0$, kde Σ je povrch vzorky. Podľa cvičenia 1 v takomto systéme teda platí $\sum_i q_i = 0$.
3. Ukážte, že pre konfiguráciu nábojov s celkovým nábojom $\sum_i q_i = 0$, ktoré sa navyše nachádzajú ďaleko od povrchu vzorky, v limite $R \rightarrow \infty$ platí $\oint_\Sigma d\mathbf{S} \cdot \varphi \nabla\varphi \rightarrow 0$.
4. Ukážte, že energia páru vír-antivír je konečná aj na nekonečnej mriežke.
5. Pomocou nábojovej analógie (46) ukážte, že víry s $q = 2$ sú nestabilné. Návod: porovnajte energiu stavu s (anti)vírm s nábojmi $+2, -1, -1$ s energiou stavu s (anti)vírm s nábojmi $+1, +1, -1, -1$. Predpokladajte, že všetky dvojice rôznych vírov sú vo vzdialenosti $\sim R$. Možno (46) použiť na porovnanie energie stavu s vírom $q = 2$ a dvojice vírov s nábojmi $+1$? Ako zmení úvahy o stabilite vírov zahrnutie entropie?
6. Podľa (47) medzi vírom a antivírom existuje príťažlivá interakcia. Zdôvodnite tento výsledok priamo v spinovom

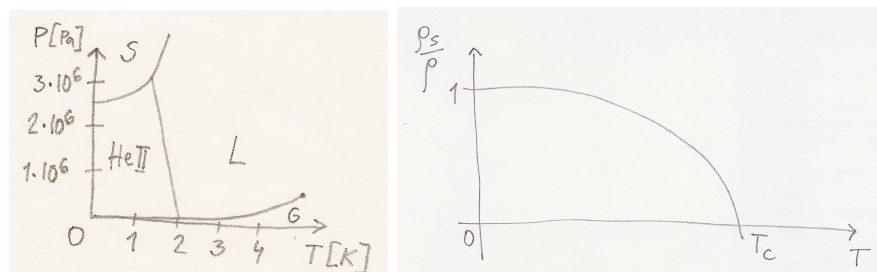
jazyku, t.j. bez použitia nábojovej analógie.

10 Supratekuté hélium

V tejto prednáške najprv stručne popíšeme experimentálne fakty o supratekutosti hélia. Budeme argumentovať, že supratekutosť súvisí s existenciou kondenzátu, t.j. makroskopicky obsadeného jednočasticového stavu. Napokon ukážeme, že v systémoch s kondenzátom je spontánne narušená tzv. (globálna) kalibračná symetria.

Experimentálne fakty

Pri tlakoch menších ako zhruba 2.5×10^6 Pa zostáva hélium kvapalné až do najnižších skúmaných teplôt. Absencia tuhej fázy je spôsobená súčasnou prítomnosťou dvoch faktorov: 1. slabosťou interakcií medzi atómami, 2. malou hmotnosťou m atómov He. V dôsledku súhry týchto faktorov atómy vykonávajú kvantové kmity s veľkou amplitúdou, ktoré hrajú rolu analogickú role tepelných kmitov a rozrušia kryštalické usporiadanie.



Obr. 6: Vľavo: Fázový diagram pre ^4He . Vpravo: teplotná závislosť podielu supratekutej zložky ρ_s/ρ .

Podľa 3. vety termodynamickej musí entropia v limite $T \rightarrow 0$ klesať do nuly. Ako je to však možné v kvapaline, v ktorej existuje nenulová tzv. konfiguračná entropia? Príroda tento problém rieši prechodom z obvyčajnej kvapalnej fázy do novej nízkoteplotnej kvapalnej fázy, tzv. fázy He II. Fázový prechod je spojitý, bez skupenského tepla, a realizuje sa pri teplote $T_c(p)$, ktorá závisí od tlaku p . Pri tlaku nasýtených pár (t.j. na čiare koexistencie kvapalina-plyn) je $T_c = 2.19$ K. Merné teplo pri nízkych teplotách vykazuje Debyeovu teplotnú závislosť, $c_V \propto T^3$.

Supratekutá fáza s $T_c \sim 1$ K sa realizuje iba pre izotop ^4He . Izotop ^3He sa supratekutým stáva iba pri $T_c \sim 1$ mK, t.j. o tri rády nižších teplotách. Keďže chemické vlastnosti oboch izotopov sú identické a ich hmotnosti sú porovnateľné, hlavným kvalitatívnym rozdielom medzi nimi sú ich štatistické vlastnosti: izotop ^4He je bozón, keďže pozostáva z párneho počtu fermiónov (2 protóny, 2 neutróny, 2 elektróny), kým izotop ^3He je fermión (2 protóny, 1 neutrón, 2 elektróny). Spin základného stavu atómu je $S = 0$ pre ^4He a $S = 1/2$ pre ^3He .

Dvojkvapalinový model

Merania viskozity He II ukazujú nasledovný paradox:

A: v experimentoch, v ktorých hélium tečie cez potrubie (ktoré je v pokoji), je viskozita hélia nulová: kvapalina tečie cez potrubie aj pri nulovom rozdiel tlakov na koncoch potrubia.

B: v experimentoch, v ktorých sú do hélia (ktoré je v pokoji) zavedené pohyblivé objekty, je pohyb týchto objektov tlmený ako v obvyčajnej viskóznej kvapaline. Tlmenie klesá do nuly iba v limite $T \rightarrow 0$.

Tento paradox rieši tzv. dvojkvapalinový model, podľa ktorého hélium vo fáze He II pozostáva z dvoch zložiek, z normálnej zložky s hustotou ρ_n a s konečnou viskozitou a zo supratekutej zložky s hustotou ρ_s a s nulovou viskozitou, pričom celková hustota hélia $\rho = \rho_n + \rho_s$. V experimentoch typu A totiž ostáva normálna zložka v pokoji vzhľadom na steny potrubia a bezdisipatívny transport hmoty je zabezpečený supratekutou zložkou. V experimentoch typu B pohyblivé objekty so sebou strhávajú normálnu zložku a nastáva disipácia. Pri teplotách $T > T_c$ je $\rho_n = \rho$, t.j. celá kvapalina je v normálnom stave. Pri schladení pod T_c sa objaví nenulová hustota supratekutej zložky, pričom ρ_s so znižovaním teploty rastie a v limite $T = 0$ je celá kvapalina supratekutá, $\rho_s = \rho$.

Fontánový jav

Tzv. fontánový jav sa realizuje medzi dvomi nádobami A a B, ktoré si môžu vymieňať iba supratekutú zložku. Takúto situáciu možno zabezpečiť prepojením nádob tenkými kapilármi, cez ktoré normálna zložka v dôsledku konečnej viskozity nemôže tiecť. Experimentálne pozorovanie je nasledovné: ak zahrejeme nádobu B na teplotu T_B vyššiu ako T_A , potom supratekutá zložka potečie z A do B.

Tento jav možno chápať ako supratekutý analóg osmózy. Každá nádoba je totiž roztokom supratekutej zložky v normálnej zložke. Teplejšia nádoba B predstavuje redší roztok, keďže je v nej relatívne menej supratekutej zložky, kým chladnejšia nádoba A predstavuje hustejší roztok. Tečenie supratekutej zložky z A do B teda predstavuje difúzny tok vedúci k vyrovnávaniu koncentrácií. Podľa 2. vety termodynamickkej však teplo nemôže tiecť z chladnejšieho telesa na teplejšie, t.j. z A do B. Preto dochádzame k záveru, že supratekutá zložka nesie nulovú entropiu. Keďže pri nulovej teplote existuje len supratekutá zložka, tento záver je navyše v zhode s 3. vetou termodynamickou.

Perzistentné prúdenie

Naplníme rúrku stočenú do prstenca héliom, vyhrejme ju nad T_c a prstenec roztočíme. Prstenec strháva hélium so sebou a po čase rotuje ako tuhé telo. Teraz prstenec schladíme pod T_c a zastavíme ho. Supratekutá zložka pritom môže zotrvať v rotačnom pohybe s priemernou rýchlosťou prúdenia v . Systém prstenec + hélium potom nesie moment hybnosti úmerný $\rho_s v$ a správa sa ako vĺčik. Tento moment hybnosti možno merať štúdiom precesnej frekvencie vĺčika v gravitačnom poli. Je pozoruhodné, že pri zmene teploty sa mení koncentrácia $\rho_s(T)$, ale rýchlosť prúdenia v od teploty nezávisí. Supratekutá zložka teda má fixované pole rýchlostí.

Druhý zvuk

Teplo sa v He II nešíri difúzou, ale ako vlna teploty a entropie, tzv. druhý zvuk. Vďaka takémuto mechanizmu vedenia tepla je He II dobrým vodičom tepla.²⁹ V rámci dvojkvapalinového modelu si druhý zvuk možno predstaviť ako kolektívny mód, pri ktorom je celková hustota hélia konštantná. Normálna a supravodivá zložka kmitajú oproti sebe, čo spôsobuje moduláciu teploty a entropie.

Boseho-Einsteinova kondenzácia

Fontánový jav demonštruje, že supravodivá zložka nesie nulovú entropiu. Perzistentné prúdenie zas ukazuje, že pole rýchlostí je fixované. Navyše, izotop ^3He sa supratekutým stáva iba pri veľmi nízkych teplotách. Všetky tieto experimentálne skutočnosti prirodzene vysvetľuje predpoklad, že kondenzát je tvorený atómami obsadzujúcimi jeden a ten istý jednočasticový stav. Najjednoduchším modelom supratekutosti He II je preto systém nezávislých bozónov.

Skúmame systém nezávislých bozónov so spinmi $S = 0$ v kockovej škatuli s objemom $\mathcal{V}$ a s periodickými okrajovými podmienkami. Celkový počet častíc v systéme s chemickým potenciálom μ a teplotou T je určený Boseho-Einsteinovým rozdelením

$$N = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/T} - 1},$$

kde $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. V systéme s predpísaným počtom častíc je táto rovnica definičnou rovnicou pre chemický potenciál. Po štandardnej zámene sumy za integrál, integrácii vo sférických súradniciach a prechode k bezrozmerným premenným možno túto rovnicu prepísať ako nasledovnú rovnicu pre hustotu častíc

$$\rho = \frac{N}{\mathcal{V}} = \frac{1}{(2\pi)^2 \lambda^3} \int_0^\infty \frac{dz \sqrt{z}}{e^{z - \mu/T} - 1},$$

kde $\lambda = \hbar/\sqrt{2mT}$ je tzv. termálna dĺžka.

²⁹ Keď chladíme tekuté hélium pozdĺž krivky nasýtených pár odsávaním pár, hélium sa zbavuje energie vyparovaním najteplejších atómov. Normálna kvapalina pritom prechádza varom, t.j. lokálne fluktuácie teploty nad teplotu vyparovania vytvárajú v objeme kvapaliny bublinky, ktoré (v gravitačnom poli Zeme) stúpajú na povrch kvapaliny. Supratekutá kvapalina však pri chladení nevrie, pretože vysoká tepelná vodivosť neumožňuje lokálne prehriatie kvapaliny. K vyparovaniu dochádza výlučne z povrchu supratekutiny, ktorá vyzerá ako "veľmi suché Martini".

Chemický potenciál musí spĺňať nerovnosť $\mu \leq 0$, inak by sme podľa Boseho-Einsteinovej štatistiky dostávali záporné počty častíc. Preto integrál vo výraze pre ρ je zhora ohraničený konečným integrálom $\int_0^\infty \frac{dz\sqrt{z}}{e^z-1} \approx 2.32$. Pri nízkych teplotách však termálna dĺžka λ diverguje, a preto pravá strana rovnice pre ρ pri dostatočne nízkych teplotách určite nemôže nadobúdať predpísanú hodnotu ρ . Minimálna teplota T_{BE} , pri ktorej možno uvedený postup použiť, je daná podmienkou $\rho \approx 0.059/\lambda^3$, odkiaľ po úprave dostávame³⁰

$$T_{BE} \approx 3.31 \frac{\hbar^2 \rho^{2/3}}{m}.$$

Pri teplotách $T < T_{BE}$ má chemický potenciál hodnotu $\mu = 0$ a podľa integrálnej formuly pre počet častíc máme v systéme iba $N(T/T_{BE})^{3/2}$ častíc. Ľahko sa však dovŕpime, že častice, ktoré podľa integrálnej formuly zdanlivo chýbajú, v skutočnosti obsadzujú jednočasticový stav s hybnosťou $\mathbf{k} = 0$ a energiou $\varepsilon = 0$. Koniec koncov, pri teplote $T = 0$ budú všetky častice obsadzovať iba tento stav. Súbor častíc obsadzujúcich stav $\mathbf{k} = 0$ nazývame kondenzátom a stotožňujeme ho so supratekutou zložkou.³¹ Na druhej strane, súbor častíc, ktoré sú termálne excitované von z kondenzátu, stotožňujeme s normálnou zložkou. Pre počet častíc v kondenzáte teda dostávame výraz

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_{BE}} \right)^{3/2}.$$

Pri teplote T_{BE} teda v systéme neinteragujúcich bozónov existuje fázový prechod, ktorý oddeľuje dve fázy, vysokoteplotnú normálnu fázu a nízkoteplotnú fázu s dvomi zložkami: normálnou a supratekutou.

Makroskopická koherencia a ODLRO (off-diagonal long range order)

Hoci ani excitačné spektrum, ani termodynamické veličiny ako napr. merné teplo pri nízkych teplotách alebo typ prechodu pri T_c nie sú v BE modeli uspokojivo popísané (pozri cvičenia), kľúčové makroskopické vlastnosti supratekutín, t.j. existenciu perzistentných bezdisipatívnych prúdov, možno na základe tohto modelu vysvetliť.

Najprv identifikujme parameter usporiadania pre BE kondenzát. Pre jednoduchosť modelujme supratekutinu ako systém častíc, ktoré môžu obsadzovať iba orbitály v bodoch i na mriežke. Častice sa môžu cez mriežku hýbať preskokmi medzi mriežkovými bodmi, podobne ako elektróny v modeli tesnej väzby. Jednočasticový stav s hybnosťou $\hbar\mathbf{k}$ je kreovaný operátorom

$$a_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_i \psi_i^\dagger e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}, \quad \psi_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i},$$

kde $\mathcal{N}$ je počet mriežkových bodov a operátor $\psi_i^\dagger$ vkladá časticu do bodu i s polohovým vektorom $\mathbf{R}_i$.

Skúmame neinteragujúci systém N_0 častíc v základnom stave, kedy všetky častice vytvárajú kondenzát v stave $\mathbf{k} = 0$ s najnižšou energiou. Predpokladajme navyše, že N_0 a $\mathcal{N}$ sú čísla toho istého rádu. Lomenými zátvorkami $\langle X \rangle$ budeme označovať strednú hodnotu veličiny X v základnom stave. Pre maticové elementy $\langle \psi_i^\dagger \psi_j \rangle$ potom dostaneme výsledok

$$\langle \psi_i^\dagger \psi_j \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i + i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} \rangle = \frac{N_0}{\mathcal{N}}.$$

Je dôležité si uvedomiť, že tento výsledok platí aj pre vzdialené bunky i a j , pre ktoré $|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| \rightarrow \infty$. Inými slovami, v systéme s kondenzátom musí existovať koherencia medzi vzdialenými bunkami i a j . Na druhej strane však vzdialené body nemôžu byť korelované, čiže strednú hodnotu $\langle \psi_i^\dagger \psi_j \rangle$ musí byť možné faktorizovať, t.j. $\langle \psi_i^\dagger \psi_j \rangle \approx \langle \psi_i^\dagger \rangle \langle \psi_j \rangle$. Preto sme nútení postulovať existenciu tzv. nediagonálneho usporiadania na dlhé vzdialenosti (ODLRO, off-diagonal long range order):

$$\boxed{\langle \psi_i \rangle = \sqrt{\frac{N_0}{\mathcal{N}}} e^{i\theta}, \quad \langle a_0 \rangle = \sqrt{N_0} e^{i\theta}.} \quad (49)$$

³⁰Teplota T_{BE} síce rádovo súhlasí s experimentálnymi hodnotami pre kritickú teplotu T_c , ale tento súlad netreba preceňovať. Napríklad závislosť od hustoty je opačná ako v experimente: pri tlaku nasýtených pár (nižšia hustota) je $T_c \approx 2.19$ K, kým pri teplote tuhnutia (vyššia hustota) je $T_c \approx 1.76$ K.

³¹Neskôr uvidíme, že koncentrácia častíc v kondenzáte interagujúcich systémov nie je totožná s hustotou supratekutej zložky ρ_s .

Tento typ usporiadania ako prví postulovali O. Penrose a L. Onsager. Všimnime si, že kondenzát je charakterizovaný nielen počtom častíc N_0 , ale aj fázou θ , ktorá môže byť zvolená pre referenčný bod i ľubovoľne, ale musí byť homogénna v celom systéme. Inými slovami, kondenzát je charakterizovaný komplexným číslom $\langle a_0 \rangle = z = \sqrt{N_0} e^{i\theta}$.

Ľahko nahliadneme, že veličina $\langle \psi_i \rangle$ je parametrom usporiadania pre supratekutinu, keďže v normálnom stave $\langle \psi_i \rangle = 0$. Pýtajme sa ďalej, aká symetria je narušená v supratekutom stave. Za tým účelom si najprv všimnime, že v druhom kvantovaní sú jednočasticové operátory dané kvadratickými funkciami kreačných a anihilačných operátorov, s jedným kreačným a jedným anihilačným operátorom. Podobne dvojčasticové členy sú dané kvadratickými funkciami s dvomi kreačnými a dvomi anihilačnými operátormi. Preto mnohočasticové systémy sú invariantné voči nasledovnej (globálnej, t.j. pre všetky body rovnakej) kalibračnej transformácii:

$$\psi_i^\dagger \rightarrow \psi_i^\dagger e^{-i\varphi}, \quad \psi_i \rightarrow \psi_i e^{i\varphi}. \quad (50)$$

Parameter usporiadania supratekutiny $\langle \psi_i \rangle$ nie je invariantný pri takejto kalibračnej transformácii, a preto supratekutina je fázou so spontánne narušenou globálnou kalibračnou symetriou.

Cvičenia

1. Odhadnite konfiguračnú entropiu kvapaliny. Návod: kvapalinu modelujte ako sadu N atómov, ktoré môžu obsadzovať $\mathcal{N} > N$ mriežkových polôh, pričom na každej mriežkovej polohe môže byť najviac jeden atóm. Atómy považujte za nerozlíšiteľné. Ako možno odhadnúť koncentráciu $c = N/\mathcal{N}$ obsadených bodov?
2. V limite nízkych teplôt vypočítajte energiu, merné teplo, entropiu, voľnú energiu a tlak v dvoch systémoch: a) pre model nezávislých bozónov s fixovaným počtom, b) pre plyn zvukových vĺn. Výsledky porovnajte s experimentálnym výsledkom $c_V \propto T^3$ pre merné teplo hélia.
3. K fontánovému javu: nájdite rozdiel tlakov $\delta p = p_B - p_A$ medzi nádobami A a B, ak príslušný rozdiel teplôt je $\delta T = T_B - T_A$. Návod: žiadajte rovnosť chemických potenciálov pre hélium v oboch nádobách a entropiu hélia odhadnite v modeli plynu zvukových vĺn. Možno fontánový jav vysvetliť v modeli nezávislých bozónov s fixovaným počtom?
4. Vypočítajte frekvenciu precesie vlčika vytvoreného zo supratekutého prstenca.
5. Ukážte, že globálna kalibračná transformácia (50) je kánonická. Je napr. Hubbardov model invariantný voči tzv. lokálnym kalibračným transformáciám, pre ktoré fázový faktor φ_i závisí od polohy?

11 Josephsonove rovnice

V tejto prednáške najprv explicitne skonštruujeme stavy s ostrou hodnotou fázy kondenzátu. Pomocou nich ukážeme, že existencia kondenzátu vysvetľuje supratekutosť.

Koherentné stavy

V tomto odstavci skonštruujeme vlastný stav $|\theta\rangle$ anihilačného operátora, $a_0|\theta\rangle = z|\theta\rangle$. Stav $|\theta\rangle$ nazývame tzv. koherentným stavom. Budeme predpokladať, že vlnová funkcia $|\theta\rangle$ je normovaná, preto pre koherentný stav platí $\langle \theta | a_0 | \theta \rangle = z$. V súlade s predošlou prednáškou preto za vlastnú hodnotu vezmeme $z = \sqrt{N_0} e^{i\theta}$, kde θ je fáza kondenzátu.

Nech $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(a_0^\dagger \right)^n |0\rangle$ je stav s n časticami. Ľahko nahliadneme, že vlnová funkcia $|\theta\rangle$ musí byť lineárnou kombináciou stavov s rôznymi počtami častíc, $|\theta\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$. Toto je všeobecná vlastnosť stavov s narušenou symetriou, ako sme podrobne diskutovali v kapitole 5. Ak využijeme vzťah $a_0|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ (pozri cvičenia), porovnaním rozvojov pre stavy $a_0|\theta\rangle$ a $z|\theta\rangle$ dostaneme rekurzívne vzťahy pre koeficienty, $c_{n+1} = \frac{z}{\sqrt{n+1}} c_n$. Riešením týchto vzťahov je $c_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} z^n c_0$. Koeficient c_0 možno určiť z normalizačnej podmienky $\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1$, odkiaľ vyplýva $|c_0| = e^{-N_0/2}$. Po vyjadrení čísla z pomocou amplitúdy a fázy pre koherentný stav dostaneme explicitný výsledok (pozri cvičenia)

$$|\theta\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n| e^{in\theta} |n\rangle, \quad (51)$$

$$|c_n| = \left(\frac{e^{-N_0} N_0^n}{n!} \right)^{1/2} \approx \frac{1}{(2\pi N_0)^{1/4}} e^{-\frac{(n-N_0)^2}{4N_0}}. \quad (52)$$

Koherentný stav $|\theta\rangle$ je teda zhruba gaussovskou superpozíciou stavov s rôznymi počtami častíc n , pričom stredná hodnota n je N_0 . Štandardná odchýlka n od strednej hodnoty je $\sqrt{N_0}$, čo je (pre veľké počty častíc v kondenzáte) zanedbateľne malá hodnota oproti N_0 .

Pre úplnosť dodajme, že koherentný stav možno zapísať aj kompaktnejšie v elegantnom tvare

$$|\theta\rangle = e^{-N_0/2} e^{za_0^\dagger} |0\rangle, \quad (53)$$

pričom exponenciálnu funkciu operátora treba opäť rozumieť ako Taylorov rozvoj $e^{za^\dagger} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} (a^\dagger)^n$.

θ -reprezentácia

Stavy s presne definovaným počtom častíc dostaneme zo stavov $|\theta\rangle$ nasledovnou projekciou:

$$|n\rangle = \frac{1}{|c_n|} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-in\theta} |\theta\rangle.$$

Tento výsledok možno zapísať v tvare $|n\rangle = \int_0^{2\pi} d\theta \psi_n(\theta) |\theta\rangle$, kde $\psi_n(\theta) = \frac{1}{2\pi|c_n|} e^{-in\theta}$ možno interpretovať ako vlnovú funkciu stavu $|n\rangle$ v θ -reprezentácii. Teda systém v stave $|n\rangle$ sa s amplitúdou pravdepodobnosti $\psi_n(\theta)$ nachádza v koherentnom stave $|\theta\rangle$ a prechod od bázy $|\theta\rangle$ k báze $|n\rangle$ je podobný ako prechod od p -reprezentácie k x -reprezentácii pre jednu časticu.

Všimnime si, že operátor počtu častíc v θ -reprezentácii možno zapísať v tvare

$$\hat{n} = i \frac{\partial}{\partial \theta}.$$

Naozaj, pri takejto definícii dostaneme $\hat{n}\psi_n(\theta) = n\psi_n(\theta)$ v súlade s faktom, že vlnová funkcia $\psi_n(\theta)$ popisuje stav s n časticami. Ak teraz navyše uvažujeme, že v θ -reprezentácii je operátor $\hat{\theta}$ totožný s násobením c -čísлом θ , dostaneme nasledovný komutačný vzťah pre operátory počtu častíc a fázy,

$$[\hat{n}, \hat{\theta}] = i. \quad (54)$$

teda počet častíc a fáza sú kánonicky združené veličiny. Totožným postupom ako pri výklade Heisenbergovho princípu neurčitosti možno ukázať, že z tohto komutačného vzťahu potom vyplýva vzťah neurčitosti pre počet častíc a fázu, $\Delta n \cdot \Delta \theta \geq \frac{1}{2}$.

n -reprezentácia

Pre veľké počty častíc možno n chápať ako spojitú premennú. Rozvoj (51) sa potom dá zapísať v tvare $|\theta\rangle = \int dn \psi_\theta(n) |n\rangle$, čo možno interpretovať ako zápis stavu $|\theta\rangle$ v n -reprezentácii s vlnovou funkciou $\psi_\theta(n) = |c_n| e^{in\theta}$. Pre operátor fázy v n -reprezentácii potom dostaneme

$$\hat{\theta} = -i \frac{\partial}{\partial n},$$

pretože pôsobenie derivácie na $|c_n|$ možno pre $|n - N_0| \ll N_0$ zanedbať. Keďže v n -reprezentácii je operátor $\hat{n}$ obyčajným násobením číslom n , opäť samozrejme dostávame komutačný vzťah (54).

Josephsonove rovnice

Vyčleňme v supratekutine malý, ale makroskopický objem $\Delta\mathcal{V}$. Počet častíc v tomto objeme môže vďaka pohybu častíc dnu a von fluktuovať. Predpokladajme, že hamiltonián zvoleného elementu závisí od fázy a k nej kánonicky združeného počtu častíc: $H = H(\hat{n}, \hat{\theta})$. Potom Heisenbergova pohybová rovnica pre operátor $\hat{\theta}$ má tvar

$$\dot{\hat{\theta}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\theta}, H] = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial n},$$

pričom druhá rovnosť je zapísaná v n -reprezentácii. Pohybová rovnica pre $\hat{n}$ je podobná:

$$\dot{\hat{n}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{n}, H] = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \theta},$$

pričom druhá rovnosť je tentoraz zapísaná v θ -reprezentácii.

Ak je stredný počet častíc N_0 v objeme veľký, potom Heisenbergove vzťahy neurčitosti možno splniť v stavoch s malými relatívnymi fluktuáciami fázy $\Delta\theta \ll 1$ aj počtu častíc $\Delta n/N_0 \ll 1$. Pre takéto objemové elementy možno fázu θ aj počet častíc n považovať za klasické veličiny a namiesto operátora $H = H(\hat{n}, \hat{\theta})$ možno písať klasickú energiu $E = E(n, \theta)$. Ak navyše uvažujeme, že pre chemický potenciál μ platí $\partial E/\partial n = \mu$, pohybové rovnice nadobudnú tvar tzv. Josephsonových rovníc,

$$\boxed{\hbar\dot{\theta} = -\frac{\partial E}{\partial n} = -\mu, \quad \hbar\dot{n} = \frac{\partial E}{\partial \theta}.} \quad (55)$$

Najprv preskúmame dôsledky Josephsonových rovníc pre izolovaný kondenzát. Z rovnice pre fázu vyplýva, že $\theta(t) = \theta_0 - \mu t/\hbar$, t.j. fáza supratekutiny sa vyvíja v čase, ako keby išlo o obyčajnú vlnovú funkciu s energiou μ , $e^{i\theta} = e^{i\theta_0} e^{-i\mu t/\hbar}$. Keďže pre izolovaný kondenzát musí platiť $\dot{n} = 0$, z rovnice pre n vyplýva $\partial E/\partial \theta = 0$, t.j. energia supratekutiny nezávisí od fázy. To bolo samozrejme treba očakávať.

Teraz preskúmame dva susediace kondenzáty 1 a 2 s fázami θ_1 a θ_2 , spojené tenkou kapilárkou umožňujúcou výmenu častíc. Energia systému opäť nemôže závisieť od absolútnych hodnôt θ_1 a θ_2 , ale môže byť funkciou ich rozdielu, $E = E(\theta_1 - \theta_2)$. Rovnice pre počty častíc n_1 a n_2 možno písať v tvare

$$I = \dot{n}_1 = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \theta_1} = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \theta_2} = -\dot{n}_2$$

Ukázali sme teda, že pokiaľ energia E nie je konštantnou funkciou rozdielu fáz $\theta = \theta_1 - \theta_2$, potom cez spoj potečie prúd častíc. V limite slabej väzby medzi kondenzátmi očakávame, že funkcia $E(\theta)$ musí byť periodická s periódou 2π . Navyše, pokiaľ ide o systém invariantný voči obráteniu času, $E(\theta)$ bude párna funkcia, pretože pri obrátení času sa vlnové funkcie zmenia na komplexne združené. Najjednoduchšou funkciou tohto typu je $E(\theta) = -E_J \cos \theta$, kde E_J je tzv. Josephsonova energia spoja. Pomocou mikroskopickej teórie možno ukázať, že funkcia $E(\theta)$ má tento jednoduchý tvar napr. pre tzv. tunelové spoje, t.j. pre dva kondenzáty oddelené síce vysokou, ale tenkou potenciálovou bariérou. Obvykle pritom platí $E_J > 0$, t.j. energia spoja sa minimalizuje pre nulový rozdiel fáz θ . Cez tunelový spoj teda pre $\theta \neq 0, \pi$ tečie konečný rovnovážny prúd častíc

$$I(\theta) = \frac{E_J}{\hbar} \sin \theta.$$

Josephson tento jav teoreticky predpovedal pre supravodiče. Experimenty následne potvrdili existenciu Josephsonovho javu v supravodičoch aj v supratekutinách.

Ak ďalej budeme predpokladať, že medzi chemickými potenciálmi oboch kondenzátov je zvonka udržiavaný konštantný rozdiel $\delta\mu = \mu_1 - \mu_2$, potom z rovnice (55) pre fázu vyplýva, že rozdiel fáz kondenzátov $\theta = \theta_1 - \theta_2$ sa vyvíja v čase, $\hbar\dot{\theta} = -\delta\mu$. Teda rozdiel fáz sa v čase mení podľa $\theta(t) = \theta_0 - \omega_J t$, kde $\omega_J = \frac{\delta\mu}{\hbar}$ je tzv. Josephsonova frekvencia. Spojením rovníc pre prúd a fázu dostaneme tzv. striedavý Josephsonov jav, pri ktorom prúd

$$I(t) = \frac{E_J}{\hbar} \sin(\theta_0 - \omega_J t)$$

periodicky osciluje v čase. V supravodičoch možno rozdiel chemických potenciálov vytvoriť priložením napätia V , pričom $\delta\mu = 2eV$.³² Presné merania napätia V a Josephsonovej frekvencie ω_J potom umožňujú veľmi presne zmerať tzv. Josephsonovu konštantu $K_J = \frac{2e}{\hbar}$, ktorá je kombináciou fundamentálnych konštánt.

Josephsonove rovnice v spojitom prípade

Josephsonove výsledky teraz zovšeobecníme na prípad nehomogénnej supratekutiny pri konečnej teplote. Nech v supratekutine existuje fázové pole $\theta(\mathbf{r})$. Budeme predpokladať, že voľná energia supratekutiny je minimálna pre konštantné pole $\theta(\mathbf{r})$ a jej prírastok pre nehomogénne polia bude

$$\delta F = E_J \sum_{\mathbf{R}} [(1 - \cos(\theta_{\mathbf{R}+\hat{x}} - \theta_{\mathbf{R}})) + (1 - \cos(\theta_{\mathbf{R}+\hat{y}} - \theta_{\mathbf{R}})) + (1 - \cos(\theta_{\mathbf{R}+\hat{z}} - \theta_{\mathbf{R}}))],$$

³²Ako uvidíme neskôr, kondenzát v supravodiči je totiž tvorený Cooperovými pármami s nábojom $-2e$.

kde sme reprezentovali nehomogénnu supratekutinu ako sadu malých, ale makroskopických kockových elementov s objemami $\Delta V = d^3$ zviazaných Josephsonovou energiou E_J . Pre hladké polia $\theta(\mathbf{r})$ môžeme funkcie $\cos(\theta_{\mathbf{R}+\hat{x}} - \theta_{\mathbf{R}})$ rozvinúť do Taylorovho radu a dostaneme

$$\delta F = \frac{\kappa d^3}{2} \sum_{\mathbf{R}} \left[\left(\frac{\theta_{\mathbf{R}+\hat{x}} - \theta_{\mathbf{R}}}{d} \right)^2 + \left(\frac{\theta_{\mathbf{R}+\hat{y}} - \theta_{\mathbf{R}}}{d} \right)^2 + \left(\frac{\theta_{\mathbf{R}+\hat{z}} - \theta_{\mathbf{R}}}{d} \right)^2 \right] \approx \frac{\kappa}{2} \int (\nabla \theta)^2 d^3 \mathbf{r},$$

kde sme zaviedli tuhosť fázy $\kappa = E_J/d$. V poslednej rovnici sme výraz pre δF interpretovali ako Riemannovu sumu pre integrál. Porovnaním výsledného výrazu pre δF s výkladom v kapitole 8 vidíme, že efektívnym modelom pre kondenzát je model XY so zovšeobecnenou tuhosťou κ .

Keď teraz použijeme Josephsonovu rovnicu (55) pre počet častíc v elemente $\mathbf{R}$, dostaneme

$$\dot{n}_{\mathbf{R}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial F}{\partial \theta_{\mathbf{R}}} = -\frac{\kappa d}{\hbar} [(\theta_{\mathbf{R}+\hat{x}} + \theta_{\mathbf{R}-\hat{x}} - 2\theta_{\mathbf{R}}) + (\theta_{\mathbf{R}+\hat{y}} + \theta_{\mathbf{R}-\hat{y}} - 2\theta_{\mathbf{R}}) + (\theta_{\mathbf{R}+\hat{z}} + \theta_{\mathbf{R}-\hat{z}} - 2\theta_{\mathbf{R}})].$$

Počet častíc v elemente $\mathbf{R}$ sa teda mení v dôsledku tečenia prúdu medzi $\mathbf{R}$ a šiestimi susednými elementmi, ktoré ležia v smeroch $\pm \hat{x}$, $\pm \hat{y}$ a $\pm \hat{z}$. Napríklad prúd tečúci z elementu $\mathbf{R}$ do elementu $\mathbf{R} + \hat{x}$ je $\frac{\kappa d}{\hbar}(\theta_{\mathbf{R}+\hat{x}} - \theta_{\mathbf{R}})$, preto zodpovedajúca prúdová hustota je $j_{\mathbf{R}}^x = \frac{\kappa d}{\hbar d^2}(\theta_{\mathbf{R}+\hat{x}} - \theta_{\mathbf{R}}) \approx \frac{\kappa}{\hbar} \frac{\partial \theta_{\mathbf{R}}}{\partial x}$. Pre vektor prúdovej hustoty tak dostávame

$$\mathbf{j} = \frac{\kappa}{\hbar} \nabla \theta.$$

Teda v stave s nehomogénnym rozdelením fáz tečie rovnovážny bezdisipatívny prúd! Analogickým javom v prípade kryštálov je bezdisipatívny transport sily pri mechanickej deformácii kryštálu, spomínaný v kapitole 8.

Ak navyše predpokladáme, že v elemente $\mathbf{R}$ je chemický potenciál $\mu_{\mathbf{R}}$, potom z Josephsonovej rovnice pre fázu dostávame $\hbar \dot{\theta}_{\mathbf{R}} = -\mu_{\mathbf{R}}$. Preto $\hbar \frac{d}{dt}(\theta_{\mathbf{R}+\hat{x}} - \theta_{\mathbf{R}}) = -(\mu_{\mathbf{R}+\hat{x}} - \mu_{\mathbf{R}})$, čo opäť možno písať vo vektorovom tvare

$$\frac{d}{dt}(\hbar \nabla \theta) = -\nabla \mu.$$

Ak v práve odvodených Josephsonových rovniciach pre kontinuum budeme veličinu $\hbar \nabla \theta$ interpretovať ako hybnosť $m \mathbf{v}_s$ častice s rýchlosťou $\mathbf{v}_s$ a ak gradient chemického potenciálu prepíšeme ako silu $\mathbf{F} = -\nabla \mu$ pôsobiacu na časticu, dostaneme pre ne alternatívne vyjadrenie

$$\boxed{\mathbf{j} = \frac{m\kappa}{\hbar^2} \mathbf{v}_s, \quad \frac{d}{dt} m \mathbf{v}_s = \mathbf{F}.}$$

Porovnaním prvej rovnice s predpoveďou dvojkvapalinového modelu $\mathbf{j} = \rho_s \mathbf{v}_s$ dostaneme výraz pre tuhosť fázy $\kappa = \frac{\hbar^2 \rho_s}{m}$. Teda konečná hustota kondenzátu implikuje konečnú tuhosť fázy, ako sme aj mali čakať. Druhá Josephsonova rovnica sa nazýva akceleračnou, pretože ukazuje, že pri pôsobení vonkajších síl sa tok kondenzátu zrýchľuje (bez trenia!).

Makroskopická vlnová funkcia a kvantovanie cirkulácie

Teraz ukážeme, že makroskopické vlastnosti supratekutiny možno alternatívne popísať na základe pojmu makroskopickej vlnovej funkcie $\psi = |\psi|e^{i\theta}$, ktorá je riešením efektívnej Schrödingerovej rovnice $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$ s hamiltoniánom

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu(\mathbf{r}),$$

kde $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$. Naozaj, prúdová hustota a pohybová rovnica pre hybnosť sú v tomto modeli dané vzťahmi

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar |\psi|^2}{m} \nabla \theta, \quad \frac{d}{dt} \mathbf{p} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{p}, H] = -\nabla \mu,$$

ktoré sú v zhode s predpoveďami na základe Josephsonových rovníc, ak za amplitúdu makroskopickej vlnovej funkcie vezmeme $|\psi|^2 = \rho_s$. Vlnová funkcia $\psi(\mathbf{r})$ teda efektívne popisuje koherentný stav, ktorý má (kváziklasicky) v danom mieste zároveň ostrú hodnotu amplitúdy aj fázy.

Popis pomocou makroskopickkej vlnovej funkcie umožňuje jednoducho analyzovať priestorovo závislé úlohy. Napríklad v uzavretom prstenci pre ľubovoľnú uzavretú dráhu C obopínajúcu otvor prstenca z požiadavky jednoznačnosti vlnovej funkcie vyplýva podmienka $\oint_C \nabla\theta \cdot d\mathbf{r} = 2\pi n$, kde n je celé číslo. Ak teraz využijeme vzťah $\hbar\nabla\theta = m\mathbf{v}_s$, dostaneme tzv. kvantovanie cirkulácie

$$\oint_C \mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{r} = \frac{2\pi\hbar n}{m}.$$

Tento výsledok možno použiť na vysvetlenie experimentov o perzistentnom tečení: celé číslo n a teda aj rýchlostné pole je totiž raz a navždy fixované v procese chladenia cez T_c a pri zmenách teploty pod T_c sa ďalej nemení. Rýchlosť supratekutého prúdenia totiž nemôže ubúdať spojitě, ale len prostredníctvom kvantových skokov. Takéto skoky však vyžadujú zmenu okrajovej podmienky pre vlnovú funkciu. Zmena okrajovej podmienky je však možná iba rozrušením supratekutosti v makroskopicky veľkom objeme, čo je spojené s prekonaním (obvykle veľkej) energetickej bariéry.

Cvičenia

1. Druhé kvantovanie pre bozóny. a) Indukciou dokážte

$$[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1}. \quad (56)$$

b) Indukciou dokážte, že nasledovný n -časticový stav je normalizovaný, t.j. $\langle n|n \rangle = 1$:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle. \quad (57)$$

c) Pomocou vzťahov (56) a (57) ukážte, že $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ a $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$.

d) Nech $f(a^\dagger)$ je ľubovoľná funkcia kreačného operátora, definovaná svojím Taylorovým rozvojom. Pomocou (56) ukážte, že

$$[a, f(a^\dagger)] = \frac{df}{da^\dagger}. \quad (58)$$

2. Koherentné stavy.

a) Presvedčte sa, že neexistujú vlastné stavy kreačného operátora.

b) Pomocou (58) ukážte, že $|z\rangle = e^{-|z|^2/2} e^{za^\dagger} |0\rangle$ je koherentný stav.

c) Ukážte, že pre skalárny súčin dvoch koherentných stavov platí $\langle u|z\rangle = e^{-(|u|^2+|z|^2-2u^*z)/2}$. Teda koherentné stavy sú síce normované, $\langle z|z\rangle = 1$, ale nie sú navzájom ortogonálne.

d) Ukážte, že systém koherentných stavov je úplný: $\int \frac{d^2z}{\pi} |z\rangle\langle z| = 1$. Pomôcka: použite rozvoj $|z\rangle$ do stavov $|n\rangle$ a podľa z integrujte v polárnych súradniciach.

3. Dokážte formulu (52). Pomôcka: zaveďte odchýlku od stredného počtu častíc $m = n - N_0$, použite Stirlingovu formulu (pozri dodatok) a využite úpravu (Taylorov rozvoj pre $m \ll N_0$)

$$\ln \left[e^{n-N_0} \left(\frac{N_0}{n} \right)^n \right] \approx -\frac{m^2}{2N_0}.$$

4. Ukážte, že platí $\langle \theta|a_0^\dagger|\theta\rangle = z^*$. Preto pri pôsobení na koherentný stav možno operátory $a_0, a_0^\dagger$ nahradiť komplexne združenými c-čislami, $a_0 \rightarrow z$ a $a_0^\dagger \rightarrow z^*$. V stave $|\theta\rangle$ ďalej explicitne vypočítajte strednú hodnotu počtu častíc a jej strednú kvadratickú odchýlku.

12 Teória Bogolubova

V tejto prednáške zohľadníme prítomnosť nenulových interakcií medzi časticami tvoriacimi kondenzát. V rámci teórie Bogolubova³³ pritom budeme predpokladať, že interakcie sú slabé a skonštruujeme poruchovú teóriu supratekutín. Takýto prístup samozrejme nemožno použiť na kvantitatívne štúdium excitačných spektier He II. Súvisom medzi teóriou Bogolubova a fyzikou hélia sa budeme zaoberať v nasledujúcej prednáške.

Teoretický model

Skúmame systém N častíc so spinom $S = 0$, s energiami $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$ a so slabými párovými interakciami s potenciálom $V(\mathbf{r})$. Predpokladajme, že teplota $T = 0$. Nech častice sa hýbu v škatuli s objemom $\mathcal{V}$

³³V anglickej literatúre sa používa transkripcia Bogoliubov aj Bogolyubov. My budeme používať slovenskú verziu.

a nech pre ne platia periodické okrajové podmienky. Ak zavedieme kreačné a anihilačné operátory $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ a $a_{\mathbf{k}}$ pre jednočasticové stavy (rovinné vlny indexované vlnovým vektorom $\mathbf{k}$), potom hamiltonián systému možno zapísať v nasledovnom tvare (pozri napr. II.11):

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}, \quad (59)$$

kde $V_{\mathbf{q}} = \int d^3\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ je Fourierova transformácia interakčného potenciálu. Budeme predpokladať, že $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$, preto $V_{\mathbf{q}} = V_{-\mathbf{q}}$ a $V_{\mathbf{q}}$ je reálne číslo. Pre konkrétnosť budeme mať na mysli nasledovný modelový potenciál s amplitúdou U a dosahom a :

$$V(\mathbf{r}) = \frac{U}{(2\pi)^{3/2}} e^{-\frac{\mathbf{r}^2}{2a^2}}$$

s Fourierovými komponentami $V_{\mathbf{q}} = Ua^3 e^{-\frac{a^2\mathbf{q}^2}{2}}$ (pozri cvičenia). Naviac budeme predpokladať, že $U > 0$, t.j. že interakcie sú odpudivé. Je preto zrejmé, že táto teória nemôže vysvetliť existenciu kvapalného stavu, ktorý je samoviazaný (“má stály objem”). 50 rokov po sformulovaní teórie sa však objavili systémy, ktoré možno kvantitatívne popísať (modifikovanou) Bogolubovovou teóriou: ide o supratekutosť plynov, v literatúre skôr známu ako Boseho-Einsteinovu kondenzáciu v plynach. Na plyny v limite $T \rightarrow 0$ totiž možno aplikovať tie isté úvahy ako na kvapaliny: entropia plynu musí vymiznúť. Príroda tento problém rieši vznikom kondenzátu. Keďže podľa BE teórie $T_{BE} \propto n^{2/3}$ kde $n = N/\mathcal{V}$ je hustota častíc, kritické teploty pre vznik kondenzátu v plynach budú rádovo nižšie než v kvapalinách. Hlavnou prekážkou pozorovania supratekutosť plynov bolo dosiahnutie dostatočne nízkych teplôt. Táto úloha bola experimentálne vyriešená len pomerne nedávno.

Hamiltonián pre častice mimo kondenzátu

Očakávame, že v slabo interagujúcom systéme bude opäť existovať kondenzát, t.j. makroskopicky obsadený stav $\mathbf{k} = 0$. Videli sme, že v prítomnosti kondenzátu môžeme operátory $a_0, a_0^\dagger$ nahradiť c-číslymi $a_0 = z = \sqrt{N_0} e^{i\theta}$ a $a_0^\dagger = z^*$, kde N_0 je počet častíc v kondenzáte (t.j. makroskopicky veľké číslo) a θ je fáza kondenzátu. Interakčný člen hamiltoniánu (59) potom možno rozvinúť podľa mocnín $\sqrt{N_0}$, podľa toho, koľkokrát sa v ňom vyskytujú operátory $a_0^\dagger, a_0$:

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} \approx V_0 N_0^2 + 2N_0 V_0 \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + 2N_0 \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + N_0 \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} (e^{2i\theta} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + e^{-2i\theta} a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}).$$

V rozvoji sme ponechali členy, ktoré sú aspoň rádu N_0 , a ostatné členy sme zanedbali. Čiarky nad sumami znamenajú, že sumy bežia iba cez stavy mimo kondenzátu, t.j. vylučujeme z nich stav $\mathbf{k} = 0$.

Zohľadnením kondenzátu sa hamiltonián pre ostatné častice mimo kondenzátu zmenil: počet častíc mimo kondenzátu $N' = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$ už nie je zachovávajúcou sa veličinou, pretože páry častíc s hybnosťami $\mathbf{k}$ a $-\mathbf{k}$ môžu vchádzať do kondenzátu, alebo naopak z neho vychádzať. Neustále však musí platiť podmienka $N = N_0 + N'$ fixujúca celkový počet častíc v systéme.³⁴

Ak v interakčnom člene hamiltoniánu (59) ponecháme iba členy aspoň rádu N_0 a okrajovú podmienku fixujúcu celkový počet častíc opíšeme Lagrangeovým multiplikátorom μ , potom tú časť hamiltoniánu (59), ktorá popisuje častice mimo kondenzátu, môžeme prepísať ako

$$H(\mu, N_0) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger, a_{-\mathbf{k}}) \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ a_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} + \frac{1}{2\mathcal{V}} N_0^2 V_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} + \mu(N - N_0), \quad (60)$$

kde sme zaviedli intenzívne veličiny s rozmerom energie

$$\Delta_{\mathbf{k}} = n_0 V_{\mathbf{k}} e^{2i\theta}, \quad \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu + |\Delta_{\mathbf{k}}| + |\Delta_0|,$$

pričom $n_0 = \frac{N_0}{\mathcal{V}}$ je hustota častíc v kondenzáte.

³⁴Zároveň pritom platí, že ani počet častíc v kondenzáte sa nezachováva. To nám dáva ďalší argument v prospech popisu kondenzátu pomocou koherentného stavu.

Všimnime si, že hamiltonián $H(\mu, N_0)$ parametricky závisí od počtu častíc v kondenzáte N_0 a od Lagrangeovho multiplikátora μ . Keďže platí $\mu = \partial H / \partial \mu$, Lagrangeov multiplikátor má význam chemického potenciálu častíc. Hodnoty parametrov N_0 a μ určíme po diagonalizácii problému (60) minimalizáciou energie základného stavu.

Diagonalizácia hamiltoniánu (60)

Hamiltonián (60) budeme diagonalizovať prechodom od bozónových operátorov $a_{\mathbf{k}}^\dagger, a_{\mathbf{k}}$, t.j. od operátorov spĺňajúcich kánonické komutačné vzťahy $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ a $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}] = [a_{\mathbf{k}}^\dagger, a_{\mathbf{k}'}^\dagger] = 0$, k novým operátorom $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \alpha_{\mathbf{k}}$, podobne ako v prednáške 4:

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & v_{\mathbf{k}}^* \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ a_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (61)$$

Aby dolný riadok bol konzistentný s horným riadkom tejto maticovej rovnosti, musíme predpokladať, že platí $u_{-\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}$ a $v_{-\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}}$. Navyše žiadame, aby $|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. Pri splnení týchto podmienok spĺňajú aj nové operátory bozónové komutačné vzťahy $[\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ a $[\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}] = [\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger] = 0$, pozri cvičenia. Pre úplnosť uvádzame aj inverznú transformáciu:

$$\begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ a_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}}^* \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}.$$

Transformačnú maticu zvolíme tak, aby transformovaný problém bol diagonálny, t.j. žiadame

$$\begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & -v_{\mathbf{k}}^* \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}}^* \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & E_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}.$$

Treba si všimnúť, že tu nejde o obvyklú diagonalizáciu pomocou ortogonálnych matic. Tri neznáme $E_{\mathbf{k}}$, $u_{\mathbf{k}}$ a $v_{\mathbf{k}}$ teda majú spĺňať nasledovný systém troch rovníc

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 = 2\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}, \quad \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}(|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2) - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* = E_{\mathbf{k}}, \quad |u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1,$$

kde sme pre úplnosť pridalí aj poslednú rovnicu. Ľahko overíme (pozri cvičenia), že riešením je

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^2 - |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}, \quad |u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}, \quad |v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}, \quad u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}.$$

Posledná rovnica definuje relatívnu fázu koeficientov $u_{\mathbf{k}}$ a $v_{\mathbf{k}}$. Obvykle volíme reálne a kladné $u_{\mathbf{k}}$. Potom platí $v_{\mathbf{k}} = |v_{\mathbf{k}}|e^{-2i\theta}$. Iná voľba by znamenala inú relatívnu fázu medzi operátormi $a_{\mathbf{k}}$ a $\alpha_{\mathbf{k}}$. A posteriori ľahko nahliadneme, že všetky voľby vedú k takým istým výsledkom pre merateľné veličiny.

Teda hamiltonián (60) sme transformáciou k novým operátorom previedli na hamiltonián nezávislých bozónov so spektrom $E_{\mathbf{k}}$:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + E_{GS}(\mu, N_0), \quad (62)$$

$$E_{GS}(\mu, N_0) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{2\mathcal{V}} N_0^2 V_0 + \mu(N - N_0), \quad (63)$$

kde $E_{GS}(\mu, N_0)$ je energia základného stavu.

Voľba μ a N_0

Na skompletizovanie riešenia potrebujeme ešte určiť parametre μ a N_0 . Vedľajšiu podmienku $N = N_0 + N'$ zreprodukuje, ak budeme žiadať splnenie rovnice $\partial E_{GS} / \partial \mu = 0$. Pri derivovaní energie $E_{GS}(\mu, N_0)$ podľa μ si pritom treba uvedomiť, že $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}$ aj $E_{\mathbf{k}}$ závisia od μ . Takto dostaneme explicitný výraz pre počet častíc mimo kondenzátu N' :

$$N' = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(1 + \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial \mu} \right) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} - 1 \right). \quad (64)$$

Všimnime si, že derivovaním podľa μ sme našli počet častíc v kondenzáte $N_0 = N - N'$.

Podobne pri minimalizovaní energie $E_{GS}(\mu, N_0)$ podľa N_0 si treba uvedomiť, že $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}$ aj $E_{\mathbf{k}}$ závisia od N_0 cez $\Delta_{\mathbf{k}}$. Z rovnice $\partial E_{GS}/\partial N_0 = 0$ takto dostaneme výraz pre chemický potenciál

$$\mu = |\Delta_0| + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial N_0} \sum_{\mathbf{k}}' (E_{\mathbf{k}} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}).$$

Dá sa ukázať, že druhý člen na pravej strane možno zanedbať.³⁵ Ak potom dosadíme hodnotu $\mu = |\Delta_0|$ do výrazu pre $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}$, dostaneme $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + |\Delta_{\mathbf{k}}|$. Preto pre energiu kvázičastíc dostávame výsledok

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + 2|\Delta_{\mathbf{k}}|)}. \quad (65)$$

Podľa teórie Bogolubova teda excitačné spektrum supratekutiny pozostáva z plynu nezávislých bozónových častíc s energiami (65). Pomocou hamiltoniánu (63) možno jednoducho počítat akékoľvek fyzikálne vlastnosti supratekutiny pri $T = 0$.

Základný stav v teórii Bogolubova

Základný stav hamiltoniánu (63) označme $|\Psi_0\rangle$. Počítajme najprv strednú hodnotu počtu častíc mimo kondenzátu N' . Ak operátory $a_{\mathbf{k}}$, $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ vyjadríme pomocou $\alpha_{\mathbf{k}}$, $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger$, dostaneme

$$N' = \sum_{\mathbf{k}}' \langle \Psi_0 | a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} | \Psi_0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}}' \langle \Psi_0 | (-v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}}^* \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger) (u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^* \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger) | \Psi_0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}}' |v_{\mathbf{k}}|^2,$$

kde v poslednom kroku sme využili, že stav $|\Psi_0\rangle$ je vákuom pre nové častice $\alpha_{\mathbf{k}}$, t.j. pre všetky $\mathbf{k}$ platí $\alpha_{\mathbf{k}}|\Psi_0\rangle = 0$. Ak teraz využijeme explicitný tvar koeficientu $|v_{\mathbf{k}}|^2$, zreprodukuje výsledok (64), ktorý sme dostali z termodynamických úvah.

Teraz explicitne skonštruujeme vlnovú funkciu základného stavu supratekutiny. Vieme už, že obsadenie stavu s $\mathbf{k} = 0$ je popísané koherentným stavom $|\theta\rangle = e^{-\frac{N_0}{2}} e^{za_0^\dagger} |0\rangle$, kde $|0\rangle$ je vákuum, t.j. stav bez holých častíc. Otázka je, ako vyzerá zvyšok vlnovej funkcie popisujúci obsadenie stavov s $\mathbf{k} \neq 0$. Ukážeme, že normalizovanú vlnovú funkciu základného stavu možno písať v tvare

$$|\Psi_0\rangle = e^{-\frac{N_0}{2}} e^{za_0^\dagger} \prod_{\mathbf{k} > 0} \left[\frac{1}{|u_{\mathbf{k}}|} e^{-\frac{v_{\mathbf{k}}^*}{u_{\mathbf{k}}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger} \right] |0\rangle, \quad (66)$$

kde symbol $\mathbf{k} > 0$ znamená, že každá dvojica $\mathbf{k}$, $-\mathbf{k}$ je v súčine zastúpená iba raz.

Najprv ukážeme, že vlnová funkcia $|\Psi_0\rangle$ je vákuom pre všetky operátory $\alpha_{\mathbf{k}}$. Pri výpočte $\alpha_{\mathbf{k}}|\Psi_0\rangle$ si stačí uvedomiť, že $\alpha_{\mathbf{k}}$ nekomutuje iba s jedným zo súčiniteľov, a využiť operátorovú identitu³⁶

$$\alpha_{\mathbf{k}} e^{-\frac{v_{\mathbf{k}}^*}{u_{\mathbf{k}}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger} = (u_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}}^\dagger) e^{-\frac{v_{\mathbf{k}}^*}{u_{\mathbf{k}}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger} = e^{-\frac{v_{\mathbf{k}}^*}{u_{\mathbf{k}}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger} u_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}.$$

Lahko nahliadneme, že skutočne platí $\alpha_{\mathbf{k}}|\Psi_0\rangle = 0$, pretože stav $|0\rangle$ je vákuom pre operátory $a_{\mathbf{k}}$.

Pri výpočte normy vlnovej funkcie $|\Psi_0\rangle$ je užitočné použiť rozvoj do Taylorovho radu

$$e^{-\frac{v_{\mathbf{k}}^*}{u_{\mathbf{k}}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger} |0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-v_{\mathbf{k}}^*}{u_{\mathbf{k}}} \right)^n (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger)^n |0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-v_{\mathbf{k}}^*}{u_{\mathbf{k}}} \right)^n |n\rangle_{\mathbf{k}} |n\rangle_{-\mathbf{k}},$$

³⁵V nasledujúcej prednáške totiž ukážeme, že počet častíc mimo kondenzátu N' je rádu $U^{3/2}$. Všetky výpočty, ktoré budeme prezentovať, platia iba do tohto rádu. Napríklad vo výraze pre $\Delta_{\mathbf{k}}$ budeme zanedbávať rozdiel medzi n a n_0 , pretože to spôsobuje nepresnosť rádu $U^{5/2}$. Podobne energia $\sum_{\mathbf{k}}' (E_{\mathbf{k}} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}})$ je rádu U^2 , pozri cvičenia k nasledujúcej prednáške, preto korekciu k μ v konzistentnom rozvoji do daného rádu treba ignorovať. Z rovnosti $\mu = |\Delta_0|$ okrem iného vyplýva, že $E_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$, keď $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Existuje však krajší argument (pochádzajúci od Hohenberga a Martina) vyložený napríklad v Rickayzenovej knihe, ktorý zaručí vymiznutie energie $E_{\mathbf{k}}$ v dlhovlnnej limite.

³⁶Pri zámene poradia operátorov $\alpha_{\mathbf{k}}$ a exponenty $e^{-\frac{v_{\mathbf{k}}^*}{u_{\mathbf{k}}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger}$ treba využiť, že operátor $a_{-\mathbf{k}}^\dagger$ komutuje s exponentou. Komutátor operátora $a_{\mathbf{k}}$ s exponentou možno počítat pomocou vzťahu (58).

kde $|n\rangle_{\mathbf{k}}$ je normovaný stav s n časticami v stave $\mathbf{k}$. Keďže koherentný stav $|\theta\rangle$ je normovaný, odtiaľto priamo plynie normovanosť stavu $|\Psi_0\rangle$:

$$\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle = \prod_{\mathbf{k}>0} \left[\frac{1}{|u_{\mathbf{k}}|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{|v_{\mathbf{k}}|^2}{|u_{\mathbf{k}}|^2} \right)^n \right] = \prod_{\mathbf{k}>0} \left[\frac{1}{|u_{\mathbf{k}}|^2 (1 - \frac{|v_{\mathbf{k}}|^2}{|u_{\mathbf{k}}|^2})} \right] = 1.$$

Všimnime si, že vlnová funkcia (66) pozostáva z koherentnej superpozície stavov s rôznymi počtami párov častíc v stavoch $\mathbf{k}$ a $-\mathbf{k}$. To je prirodzený výsledok: ak by sme vlnovú funkciu $|\Psi_0\rangle$ hľadali pomocou poruchovej teórie podľa $V_{\mathbf{k}}$, neporušeným základným stavom by bol stav

$$|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (a_0^\dagger)^N |0\rangle.$$

Pôsobením nediagonálnych členov v (60) postupne pridávame k tejto vlnovej funkcii páry častíc $\mathbf{k}$, $-\mathbf{k}$. Treba si však uvedomiť, že vlnovú funkciu $|\Psi_0\rangle$ nedostaneme z neporušeného základného stavu $|N\rangle$ v konečnom ráde poruchovej teórie a napríklad prekryv medzi stavmi $|\Psi_0\rangle$ a $|N\rangle$ je nulový. Naozaj:

$$\langle N|\Psi_0\rangle = e^{-N_0/2} \langle N|e^{za_0^\dagger}|0\rangle \prod_{\mathbf{k}>0} \frac{1}{|u_{\mathbf{k}}|} = e^{iN\theta} \left(\frac{N_0^N e^{-N_0}}{N!} \prod_{\mathbf{k}>0} \frac{2E_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}} + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}} \right)^{1/2}$$

a v termodynamickej limite, kedy sa počet súčiniteľov $\mathbf{k}$ blíži do nekonečna, sa prekryv blíži k nule, pretože je súčinom nekonečného počtu súčiniteľov, z ktorých každý je menší než 1 (keďže $E_{\mathbf{k}} < \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}$).

Cvičenia

1. Vychádzajúc z modelu pre potenciál $V(\mathbf{r})$, odvodte výraz pre $V_{\mathbf{q}}$.
2. Ukážte, že transformácia od operátorov $a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}^\dagger$ k operátorom $\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger$ je kánonická, t.j. zachováva komutačné vzťahy.
3. Overte výsledky pre $E_{\mathbf{k}}$, $u_{\mathbf{k}}$ a $v_{\mathbf{k}}$ uvedené v texte.
4. Vypočítajte strednú hodnotu $\langle\Psi_0|a_{-\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}|\Psi_0\rangle$ pre $\mathbf{k} \neq 0$.
5. Vlnovú funkciu excitovaného stavu $\alpha_{\mathbf{q}}^\dagger|\Psi_0\rangle$ reprezentujte pomocou operátorov $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ a $a_{\mathbf{k}}$. Explicitným výpočtom sa presvedčte, že ide o normovanú vlnovú funkciu.
- 6.* Metódou Bogolubova nájdite excitačné spektrum pohybujúceho sa kondenzátu. Predpokladajte, že makroskopicky je obsadený jednočasticový stav s hybnosťou $2\hbar\mathbf{q}$.

13 Teória Bogolubova a supratekuté hélium

V tejto prednáške najprv preskúmame excitačné spektrum v rámci teórie Bogolubova a oblasť platnosti tejto teórie. V druhej časti prednášky sa budeme zaoberať súvisom medzi teóriou Bogolubova a fyzikou skutočného hélia.

Excitačné spektrum v teórii Bogolubova

Disperzný zákon (65) pre elementárne excitácie supratekutiny so slabými interakciami budeme skúmať v limitných prípadoch pomeru energií $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ a $|\Delta_{\mathbf{k}}|$. Všimnime si najprv, že $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ rastie s vlnovým vektorom k , kým $|\Delta_{\mathbf{k}}|$ v našom modeli s vlnovým vektorom k klesá. Preto prípad $\varepsilon_{\mathbf{k}} \ll |\Delta_{\mathbf{k}}|$ sa realizuje v dlhovlnnej limite, kým $\varepsilon_{\mathbf{k}} \gg |\Delta_{\mathbf{k}}|$ nastáva v krátkovlnnej limite.

V dlhovlnnej limite dostávame $E_{\mathbf{k}} \approx \hbar v k$, teda disperzný zákon je kvalitatívne zmenený oproti spektru voľných častíc: energia $E_{\mathbf{k}}$ rastie s k lineárne s rýchlosťou

$$v = \sqrt{\frac{|\Delta_0|}{m}} = \sqrt{\frac{U n_0 a^3}{m}},$$

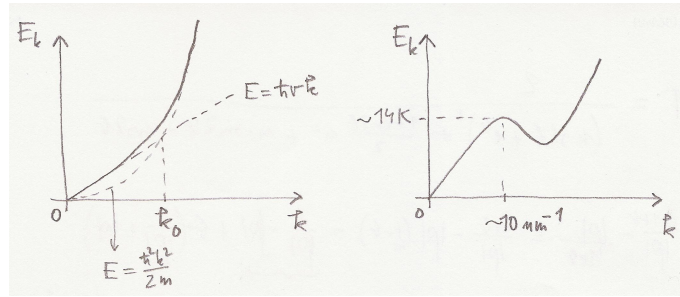
kde n_0 je hustota častíc v kondenzáte. Všimnime si, že energia excitácií $E_{\mathbf{k}}$ sa pre $\mathbf{k} \rightarrow 0$ blíži k nule. Ide o ďalší príklad Goldstoneovho módu, v supratekutine je totiž spontánne narušená (spojitá)

globálna kalibračná symetria (50). Pretože v dlhovlnnej limite platí $u_{\mathbf{k}}^2 \approx v_{\mathbf{k}}^2 \approx \frac{|\Delta_0|}{2\hbar v k}$, kreačný operátor pre elementárne excitácie má tvar

$$\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \approx \sqrt{\frac{|\Delta_0|}{2\hbar v k}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger + a_{-\mathbf{k}}).$$

Znamená to, že elementárnu excitáciu s vlnovým vektorom $\mathbf{k}$ vytvoríme koherentným zložením dvoch procesov: kreácie holej častice s hybnosťou $\hbar\mathbf{k}$, alebo anihilácie holej častice s hybnosťou $-\hbar\mathbf{k}$. Z explicitného tvaru vlnovej funkcie základného stavu $|\Psi_0\rangle$ vidno, že po anihilácii častice s hybnosťou $-\hbar\mathbf{k}$ bude v excitovanom stave prítomná nespárená častica s hybnosťou $\hbar\mathbf{k}$, teda obidva procesy sú do istej miery podobné. Z približnej rovnosti $u_{\mathbf{k}}^2 \approx v_{\mathbf{k}}^2$ ďalej vyplýva, že elementárne excitácie v dlhovlnnej limite v priemere nemenia počet častíc v systéme. Navyše sa dá ukázať (pozri cvičenia), že rýchlosť v je totožná s predpoveďou makroskopickej teórie pre rýchlosť zvuku. Preto je prirodzené elementárne excitácie v dlhovlnnej limite stotožniť s kvantami zvukových vln.

V krátkovlnnej limite sa disperzný zákon zjednoduší na tvar $E_{\mathbf{k}} \approx \varepsilon_{\mathbf{k}}$, t.j. je rovnaký, ako v neinteragujúcom systéme. To je prirodzený výsledok: rýchle častice sú slabým rozptylovým potenciálom iba málo ovplyvnené. Tomu zodpovedá aj výsledok pre kreačný operátor pre elementárne excitácie v krátkovlnnej limite: $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \approx a_{\mathbf{k}}^\dagger$.



Obr. 7: Vľavo: excitačné spektrum podľa teórie Bogoliubova. Vpravo: experimentálne spektrum ^4He . Medzidlhovlnnou oblasťou zvukových vln a krátkovlnnou oblasťou voľných častíc sa nachádza tzv. rotónové minimum.

Charakteristický vlnový vektor k_0 rozdeľujúci dlhovlnnú a krátkovlnnú oblasť dostaneme porovnaním disperzných zákonov $E_{\mathbf{k}}$ v oboch limitách: $\hbar v k_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$. Tak dostaneme

$$\hbar k_0 = 2mv = 2\sqrt{mUn_0 a^3}.$$

Stojí za povšimnutie, že vlnový vektor k_0 rastie so silou interakcie, pričom $k_0 \propto U^{1/2}$.

Oblasť platnosti teórie Bogoliubova

Teória Bogoliubova je konzistentná, ak počet častíc mimo kondenzátu je malým zlomkom všetkých častíc, t.j. ak $N'/N \ll 1$. Prechodom od sumy k integrálu vo výraze (64) dostaneme

$$\frac{N'}{N} = \frac{2}{\pi^2 n} \left(\frac{m}{2\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \sqrt{\varepsilon} \frac{\varepsilon + |\Delta_k| - \sqrt{\varepsilon(\varepsilon + 2|\Delta_k|)}}{2\sqrt{\varepsilon(\varepsilon + 2|\Delta_k|)}} \approx \frac{k_0^3}{24\pi^2 n},$$

kde n je hustota častíc. V približnej rovnosti sme pre jednoduchosť predpokladali, že $k_0 a \ll 1$. V takom prípade totiž môžeme v relevantnej oblasti vlnových vektorov $k \sim k_0$ funkciu $|\Delta_k|$ považovať za konštantu, $|\Delta_k| \approx |\Delta_0|$, a integráciu možno explicitne vykonať.

Teória Bogoliubova teda platí, t.j. ak je splnená podmienka $k_0^3 \ll n$. Ak hustotu odhadneme pomocou strednej vzdialenosti medzi časticami r_0 vzťahom $n \sim r_0^{-3}$, dostaneme odtiaľto podmienku $k_0 r_0 \ll 1$. Ak ďalej použijeme explicitný výsledok pre k_0 , dostaneme napokon podmienku aplikability teórie Bogoliubova:

$$U \ll \frac{\hbar^2 r_0}{ma^3}.$$

Teória teda platí pre slabé interakcie $U \rightarrow 0$, pre riedky plyn $r_0 \rightarrow \infty$, alebo pre krátkodosahové interakcie $a \rightarrow 0$. Mohla by vzniknúť námietka, že naša zjednodušená verzia teórie platí iba pre $k_0 a \ll 1$,

t.j. navyiac má platiť $U \ll \frac{\hbar^2 r_0^3}{ma^5}$. Avšak obvykle $r_0 > a$, preto nejde o dodatočnú podmienku.

Realistický model pre ${}^4\text{He}$

V rámci teórie Bogolubova sme skúmali hamiltonián (59) so slabou odpudivou párovou interakciou $V(\mathbf{r})$ s Fourierovou transformáciou $V_{\mathbf{q}}$. Čisto odpudivý model by však neumožňoval existenciu kvapalného (t.j. viazaného) stavu. Realistickejším modelom pre hélium je

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (67)$$

kde $V(\mathbf{r})$ je interakčná energia dvojice atómov vo vzdialenosti $\mathbf{r}$, povedzme typu van der Waalovej-Londonovej väzby. Takýto model však nemožno skúmať metódami z predošlej prednášky, okrem iného preto, že neexistuje Fourierova transformácia $V_{\mathbf{q}}$ (pozri cvičenia). Stojí tiež za zmienku, že model (67) nie je presným modelom pre systém atómov hélia. Priblíženie spočíva v tom, že atómy ${}^4\text{He}$ sú zložené z jadier a elektrónov, ich súradnice však v modeli (67) nefigurujú. Model (67) je teda ďalším príkladom efektívneho modelu. Ponechali sme v ňom iba interakcie dvojíc atómov so súradnicami ťažísk $\mathbf{r}_i$ a (okrem iného) sme zanedbali interakcie n -tíc s $n \geq 3$.

Feynmanove vety o základnom stave ${}^4\text{He}$

Pre vlnovú funkciu $\Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ základného stavu systému (67) platia nasledovné vety:

1. Vlnovú funkciu $\Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ možno zvoliť ako čisto reálnu. Dôkaz využíva, že hamiltonián (67) je reálny, $H = H^*$, podobne ako v prednáške 3.

2. Reálna vlnová funkcia základného stavu nemôže meniť znamienko. Idea dôkazu sporom je nasledovná. Nech základný stav je popísaný reálnou vlnovou funkciou $\Psi_0 = f e^{i\varphi}$, kde fáza $\varphi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ nadobúda po častiach hodnoty 0 a π a nie je konštantná. Najprv ukážeme, že nezáporná vlnová funkcia $\Psi_1 = f$ má rovnakú energiu ako Ψ_0 , t.j. $\langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_1 | H | \Psi_1 \rangle$. Naozaj, integráciou per partes podľa $\mathbf{r}_i$ ľahko nahliadneme, že $\int d^3\mathbf{r}_1 \dots \int d^3\mathbf{r}_N \Psi_0^* (-\nabla_i^2 \Psi_0) = \int d^3\mathbf{r}_1 \dots \int d^3\mathbf{r}_N |\nabla_i \Psi_0|^2$, preto

$$\langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle = \int d^3\mathbf{r}_1 \dots \int d^3\mathbf{r}_N \left[\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i |\nabla_i \Psi_0|^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) |\Psi_0|^2 \right] = \langle \Psi_1 | H | \Psi_1 \rangle.$$

Druhá rovnosť je dôsledkom toho, že $|\Psi_0|^2 = f^2 = |\Psi_1|^2$. Okrem toho sme využili, že $|\nabla_i \Psi_0|^2 = (\nabla_i f)^2 + f^2 (\nabla_i \varphi)^2 = (\nabla_i f)^2 = |\nabla_i \Psi_1|^2$, keďže gradient φ je nenulový len tam, kde $f = 0$. Teda energia vlnovej funkcie Ψ_1 so špicmi je rovnaká ako energia vlnovej funkcie Ψ_0 . V ďalšom kroku sa argumentuje, že odstránenie špicov zníži energiu, t.j. Ψ_0 nemohla byť vlnovou funkciou základného stavu.

3. Až na fázový faktor je normalizovaná vlnová funkcia základného stavu jednoznačná. Dôkaz sporom: nech Ψ_1 a Ψ_2 sú dve rôzne kladné normované vlnové funkcie základného stavu, pričom $H\Psi_i = E_0\Psi_i$ pre $i = 1, 2$. Potom musí platiť $H(\Psi_1 - \Psi_2) = E_0(\Psi_1 - \Psi_2)$. Ale podľa vety 2 nesmie vlnová funkcia $\Psi_1 - \Psi_2$ meniť znamienko. Potom však Ψ_1 a Ψ_2 nemôžu byť obidve normované. Tým je dôkaz hotový.

Penroseov-Onsagerov odhad veľkosti kondenzátu v ${}^4\text{He}$

V rámci teórie Bogolubova sme ukázali, že v dôsledku interakčných efektov nemôžu všetky atómy tvoriť kondenzát. Očakávame, že aj počet častíc N_0 v kondenzáte skutočného hélia bude redukovaný, ale veľkosť N_0 nie je možné kvantitatívne určiť pomocou teórie Bogolubova. V tomto odstavci prezentujeme zjednodušenú verziu Penroseovho-Onsagerovho odhadu N_0 v ${}^4\text{He}$ pri teplote $T = 0$.

V našom zjednodušenom prístupe budeme hélium modelovať mriežkovým modelom zavedeným v odstavci o ODLRO. Budeme študovať kubickú mriežku s $\mathcal{N}$ mriežkovými bodmi a s periodickými okrajovými podmienkami, na ktorej sa pohybuje $N < \mathcal{N}$ atómov. Ďalej budeme predpokladať, že atómy na susedných mriežkových bodoch neinteragujú, kým odpudivé interakcie medzi atómami na tom istom bode mriežky sú tak veľké, že každý mriežkový bod môže byť obsadený najviac jedným atómom. Stláčanie hélia si pritom predstavíme ako odoberanie mriežkových bodov pri fixovanom počte N atómov a pri fixovanej mriežkovej konštante. V momente, kedy sa počet mriežkových bodov vyrovná

s počtom atómov, hélium stratí schopnosť tiecť. Teda pri $\mathcal{N} = N$ hélium skryštalizuje. Keďže v limite nízkych teplôt sa experimentálna hustota kvapaliny pri zvýšení tlaku z hodnoty $p \approx 0$ na kryštalizačný tlak $p \approx 2.5 \times 10^6$ Pa zvýši iba o zhruba 20%, očakávame, že v celej kvapalnej fáze má bezrozmerná koncentrácia $c = N/\mathcal{N}$ hodnotu väčšiu ako zhruba 0.8.

Mnohočasticovú vlnovú funkciu základného stavu $|\Psi_0\rangle$ odhadneme nasledovne. Najprv zavedieme pojem konfigurácie atómov na mriežke $\mathcal{C} = (i_1, \dots, i_N)$, t.j. N -tice bodov, ktoré sú obsadené atómami ^4He . Za vlnovú funkciu základného stavu zoberieme

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z(N, \mathcal{N})}} \sum_{\mathcal{C}} \psi_{i_1}^\dagger \dots \psi_{i_N}^\dagger |0\rangle,$$

kde $|0\rangle$ je vákuum, t.j. stav bez častíc, a

$$Z(N, \mathcal{N}) = \binom{\mathcal{N}}{N} = \frac{\mathcal{N}!}{N!(\mathcal{N} - N)!}$$

je počet rôznych konfigurácií N atómov na mriežke s $\mathcal{N}$ bodmi. Všimnime si, že vlnová funkcia $|\Psi_0\rangle$ je normalizovaná, t.j. $\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle = 1$, a navyše spĺňa vety 1 a 2. Analogickú vlnovú funkciu (ale pre kontinuum) skúmal aj Feynman.

Počet častíc v kondenzáte budeme počítať pomocou vzťahu

$$N_0 = \langle\Psi_0|a_0^\dagger a_0|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{ij} \langle\Psi_0|\psi_i^\dagger \psi_j|\Psi_0\rangle.$$

Fixujme preto dva rôzne mriežkové body i a j a počítajme $\langle\Psi_0|\psi_i^\dagger \psi_j|\Psi_0\rangle$. K maticovému elementu prispievajú len tie konfigurácie v rozvoji vlnovej funkcie $|\Psi_0\rangle$, v ktorých je bod j obsadený a bod i je neobsadený. Takýchto konfigurácií je $Z(N-1, \mathcal{N}-2)$, pretože máme rozmiestniť $N-1$ atómov (okrem atómu v bode j) a k dispozícii máme $\mathcal{N}-2$ mriežkových bodov (všetky okrem i a j). Každá takáto konfigurácia $|\mathcal{C}\rangle = \psi_{i_1}^\dagger \dots \psi_{i_N}^\dagger |0\rangle$ prispeje do maticového elementu $\langle\Psi_0|\psi_i^\dagger \psi_j|\Psi_0\rangle$ jednotkou, pretože stav $\psi_i^\dagger \psi_j |\mathcal{C}\rangle$ je niektorou z pôvodných $Z(N, \mathcal{N})$ konfigurácií. Preto

$$\langle\Psi_0|\psi_i^\dagger \psi_j|\Psi_0\rangle = \frac{Z(N-1, \mathcal{N}-2)}{Z(N, \mathcal{N})} = \frac{N(\mathcal{N}-N)}{\mathcal{N}(\mathcal{N}-1)} \approx c(1-c),$$

kde sme uvážili, že $\mathcal{N} \gg 1$. Keďže maticový element $\langle\Psi_0|\psi_i^\dagger \psi_j|\Psi_0\rangle$ nezávisí od i, j , pre počet častíc v kondenzáte tak dostaneme odhad

$$\frac{N_0}{N} \approx 1 - c.$$

Keďže v kvapalnom héliu očakávame $c > 0.8$, v kondenzáte sa nachádza len malý zlomok všetkých atómov. Penrose a Onsager v presnejšej teórii odhadujú, že $N_0/N \approx 0.08$.³⁷

Upozorňujeme však, že hustota normálnej zložky pri teplote $T = 0$ je $\rho_n = 0$ aj napriek tomu, že $N_0/N \ll 1$.³⁸ Hustotu normálnej a supratekutej zložky treba totiž chápať ako parametre funkcií odozvy a nie ako vlastnosti rozdelenia častíc. Túto tému pekne analyzujú napríklad Nozières a Pines.

Adiabatická kontinuita

Podľa Bogolubova možno supratekutinu opísať ako kvapalinu s kondenzátom. Penroseov-Onsagerov výpočet ukazuje, že hoci *kvantitatívne* teória Bogolubova nepredpovedá správny počet holých častíc v kondenzáte, samotná prítomnosť kondenzátu v héliu zostáva zachovaná aj v tejto presnejšej teórii. To naznačuje, že teória Bogolubova je *kvalitatívne* správna a verí sa, že štartujúc z tejto teórie možno tzv.

³⁷Detailné numerické simulácie základného stavu hélia s Lennardovými-Jonesovými interakciami (spolu s odkazmi na experimentálne dáta) možno nájsť v práci P.A. Whitlock, D.M. Ceperley, G.V. Chester and M.H. Kalos, Phys. Rev. B **19**, 5598 (1979). Podľa tejto práce sa zlomok N_0/N mení medzi hodnotami 11% pre $p = 0$ a 6% pre kryštalizačný tlak.

³⁸Ak by sme nástojili na vysvetlení pomocou rozdelenia častíc, tejto poznámke treba rozumieť nasledovne. Náš výpočet sa týkal rozdelenia “holých atómov”, t.j. atómov, aké by boli vo vákuu. Atómy v médiu však svojou prítomnosťou toto médium deformujú a stávajú sa “oblečenými atómami”, pričom “oblečený atóm” = “holý atóm” + “oblak deformácií”. Keby sme počítali pri nulovej teplote rozdelenie takýchto oblečených atómov, mali by sme vidieť, že všetky obsadzujú kondenzát.

adiabaticky dospieť k presnému opisu hélia. Máme tu na mysli, že spojitá zmena interakcií od modelu Bogolubova po realistické interakcie v ^4He sa prejaví v hladkej zmene koncentrácie kondenzátu.

Ďalším výsledkom teórie Bogolubova je, že excitácie v dlhovlnnej limite majú charakter zvukových vĺn a sú popísané lineárnym disperzným zákonom. Tento výsledok zostáva v platnosti aj v presnejšej teórii Feynmana a je v zhode s experimentom (hoci veľkosť rýchlosti zvukových vĺn je potrebné upraviť). Aj v tomto prípade sa verí, že excitačné spektrum sa adiabaticky vyvíja pri zmene interakcií.

Anderson sformuloval všeobecný *princíp adiabatickej kontinuity*, podľa ktorého možno popis vlastností konkrétnych fyzikálnych systémov redukovať na dve podúlohy:

1. identifikáciu jednoduchého modelového systému s rovnakými symetriami ako symetria skúmaného systému (napr. Bogolubovova supratekutina, ale aj normálny kov, pásový izolant, Heisenbergov feromagnet, supravodič BCS, atď.); vyriešenie tejto úlohy poskytne kvalitatívny popis systému,

2. aplikáciu vhodnej poruchovej teórie s modelovým systémom ako štartovacím bodom, ak sú potrebné kvantitatívne predpovede.

Cvičenia

1. Predpokladajte, že $ak_0 \ll 1$ a ukážte, že do druhého rádu v U pre energiu základného stavu (63) platí

$$\frac{E_{GS}}{N} = \frac{1}{2}U n a^3 \left[1 - \frac{1}{4\pi\sqrt{\pi}} \frac{m a^2 U}{\hbar^2} \right].$$

Ďalej ukážte, že tento výsledok Bogolubovovej teórie je v zhode s druhým rádom poruchovej teórie podľa U .

2. Nájdite stavovú rovnicu $p = p(n)$ a makroskopickú rýchlosť zvuku $v_s^2 = \frac{1}{m} \frac{\partial p}{\partial n}$ v teórii Bogolubova. Výsledok pre v_s porovnajte s dlhovlnnou rýchlosťou bogolubónov v . Návod: použite výsledok pre energiu E_{GS} do prvého rádu podľa U .

3. Ukážte, že Fourierova transformácia van der Waalsovho-Londonovho potenciálu neexistuje.

4. K druhej Feynmanovej vete. Presvedčte sa, že ak funkciu $f(x) = x$, ktorá na intervale $(-1, 1)$ mení znamienko, nahradíme funkciou $\sqrt{x^2 + a^2}$, ktorá nemení znamienko, potom “kinetická energia” $\int_{-1}^1 dx (\partial f / \partial x)^2$ klesne o člen úmerný a , kým “potenciálna energia” $\int_{-1}^1 dx U(x) f^2(x)$ narastie iba o člen úmerný a^2 . Preto pre malé a celková energia klesne.

5. Skúmajte tzv. Jastrowovu vlnovú funkciu $\Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i < j} f(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ pre základný stav hélia s variačnou funkciou $f(\mathbf{r})$. Aké vlastnosti musí mať funkcia $f(\mathbf{r})$, aby $\Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ bola symetrická pri permutáciách častíc a zároveň spĺňala Feynmanove vety o základnom stave?

14 Supravodivosť: základné fakty

V tejto prednáške podáme úvodnú informáciu o supravodivosti. Ukážeme, že supravodivosť možno chápať ako supratekutosť Cooperových párov a načrtneme najjednoduchší popis magnetických vlastností supravodičov. Podrobný výklad supravodivosti podávajú tri autoritatívne knihy: Tinkham (fenomenológia), Schrieffer (mikroskopická teória) a de Gennes (odvodenie Ginzburgovej-Landauovej teórie).

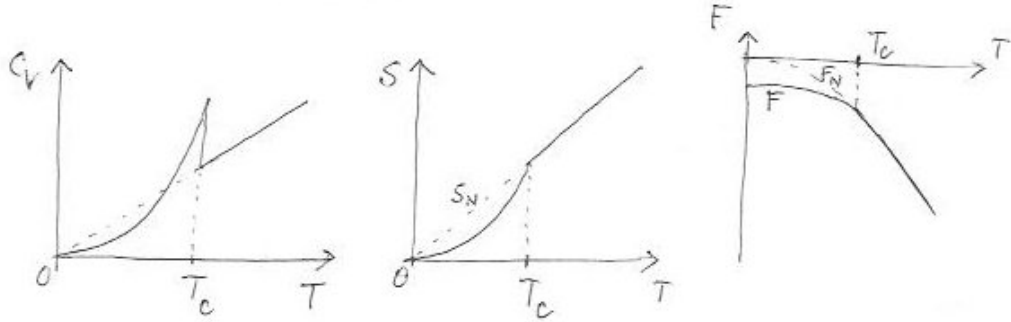
Supravodivosť ako nová termodynamická fáza

Vo väčšine kovov vzniká pri nízkych teplotách nová termodynamická fáza, ktorú nazývame supravodivou. Teplota prechodu medzi normálnym kovom a nízkoteplotnou fázou sa nazýva kritická teplota T_c . Jej typické hodnoty sú uvedené v tabuľke 1.

	Al	Nb	Nb ₃ Ge	MgB ₂	HgBa ₂ Ca ₂ Cu ₃ O ₈
T_c (K)	1.1	9.5	23	39	135
$\frac{2\Delta}{T_c}$	3.5	3.7	4.2	4	5 až 10
λ (nm)	50	44	90	120*	130*
ξ (nm)	1600	38	3	6.5*	1.3*

Tabuľka 1: Kritická teplota T_c , podiel $\frac{2\Delta}{T_c}$, hĺbka vniku λ a rozmer Cooperovho páru ξ vybraných supravodičov. V hexagonálnom materiáli MgB₂ a v tetragonálnych vysokoteplotných supravodičoch vzniká magnetické pole rovnobežné s kryštalografickou osou c inak ako pole kolmé na os c . Hviezdičkou sú označené dáta pre pole rovnobežné s osou c . Podobne vlnové funkcie Cooperových párov nemajú tvar gule, ale disku. Hviezdičkou sú označené polomery (a nie hrúbky) disku. Dáta pre vysokoteplotné supravodiče (posledný stĺpec) sa týkajú tzv. optimálne dopovaných materiálov.

Rekordná teplota prechodu sa realizuje v tzv. vysokoteplotných supravodičoch, ktorých vlastnosti sa v mnohom odlišujú od nízkoteplotných supravodičov. Náš výklad bude zameraný na nízkoteplotné supravodiče, ktorých správanie je v hrubých rysoch pochopené.



Obr. 8: Vľavo: teplotná závislosť (v limite nízkych teplôt) príspevku elektrónov c_V k mernému teplu supravodiča. Bodkovaná čiara znázorňuje dáta pre c_V v normálnom stave. Takéto dáta možno získať buď extrapoláciou dát pre $T > T_c$, alebo rozrušením supravodivosti - napríklad silným magnetickým poľom. V strede: teplotná závislosť entropie $S = S(T)$ určená integrovaním dát pre c_V . Vpravo: teplotná závislosť voľnej energie $F = F(T)$ určená integrovaním dát pre entropiu.

V nulovom aplikovanom magnetickom poli je fázový prechod do supravodivého stavu *druhého druhu*, t.j. nie je spojený s existenciou skupenského tepla premeny. To znamená, že pri T_c je entropia supravodivej fázy S rovnaká ako entropia normálnej fázy S_N . V bode prechodu sa však líši merné teplo pri konštantnom objeme c_V oboch fáz.³⁹ V normálnom kove je merné teplo c_V lineárnou funkciou teploty. V supravodiči je merné teplo c_V pri $T \ll T_c$ omnoho menšie. Integrovaním experimentálnych dát pre $c_V(T)$ možno určiť entropiu supravodivej fázy:⁴⁰

$$S(T) = \int_0^T dT' \frac{c_V(T')}{T'}.$$

Porovnaním s entropiou S_N vypočítanou analogickým postupom, ale z dát pre merné teplo extrapolovaných z normálnej fázy, vidno, že $S < S_N$, t.j. *nová fáza je usporiadanejšia ako normálny kov*. Keďže pri T_c sú voľné energie oboch fáz rovnaké, ďalšou integráciou výrazu $dF = -SdT$ možno určiť rozdiel voľných energií oboch fáz:

$$F(T) - F_N(T) = \int_T^{T_c} dT' [S(T') - S_N(T')].$$

Takáto analýza experimentálnych dát ukazuje, že voľná energia v supravodivej fáze je nižšia než v normálnej fáze a ich rozdiel pri nízkych teplotách prepočítaný na jeden elektrón je rádu T_c^2/ε_F . Tento výsledok interpretujeme tak, že v novej fáze nastala reorganizácia elektrónového spektra v blízkosti Fermiho plochy, pri ktorej zlomok T_c/ε_F zo všetkých elektrónov znížil svoju energiu zhruba o T_c .

Nekonečná vodivosť a Meissnerov jav

V obyčajných kovoch je spád napätia V na drôte priamo úmerný prúdu I tečúcemu cez drôt, $V = RI$, kde R je odpor drôtu. So znižovaním teploty odpor klesá a pri prechode do supravodivého stavu, t.j. pri teplote T_c , sa odpor drôtu mení skokom z konečnej hodnoty na nemerateľne malú hodnotu. Supravodivý stav je teda stavom s *nulovým odporom*.

Najpresnejšie možno odpor supravodiča určiť pomocou merania tzv. perzistentných prúdov. Skúmame masívny prstenec, cez ktorý preteká magnetický tok $\Phi_e(t) = \Phi_i$ budený vonkajšími cievkami. V čase $t = 0$ vypneme prúd v cievkach, teda pre $t > 0$ nech $\Phi_e(t) = 0$. Podľa Faradaya sa v prstenci

³⁹V tomto odstavci pre jednoduchosť zanedbávame malú teplotnú rozťažnosť kovov a experimentálne dáta pre merné teplo, ktoré sú obvykle získavané pri konštantnom tlaku, interpretujeme ako dáta pri konštantnom objeme. Okrem toho máme na mysli iba príspevok elektrónov k mernému teplu. Navyac predpokladáme, že študovaný kov sa nachádza v nulovom magnetickom poli.

⁴⁰Použili sme vzťah $c_V = T \frac{dS}{dT}$ a tiež tretiu termodynamickú vetu, podľa ktorej je entropia pri nulovej teplote $S(0) = 0$.

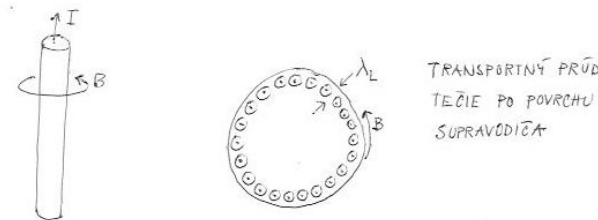
indukuje napätie $U(t) = -\frac{d\Phi_e}{dt} = \Phi_i\delta(t)$. Ak odpor prstenca označíme R a jeho indukčnosť L , potom prúd $I(t)$ v prstenci bude spĺňať rovnicu

$$U(t) = RI + L\frac{dI}{dt}, \quad (68)$$

ktorá má riešenie $I(t) = I_0 e^{-t/\tau}$ s časovou konštantou $\tau = \frac{L}{R}$. Pre uvažovaný delta-funkčný napäťový pulz má počiatočný prúd veľkosť $I_0 = \frac{\Phi_i}{L}$, ako sa ľahko presvedčíme integrovaním rovnice (68) cez infinitezimálny časový interval okolo $t = 0$. Teda z merania časovej závislosti prúdu možno určiť odpor supravodiča. Ako však možno merať prúd v uzavretej slučke? Rovnicu (68) pre prúd v uzavretej slučke možno po uvážení Faradayovho zákona pre $U(t)$ zapísať v tvare

$$\frac{d}{dt}(\Phi_e + LI) = -RI.$$

To znamená, že v materiáloch s $R = 0$ musí byť celkový magnetický tok cez prstenec $\Phi = \Phi_e + LI$ konštantný. Experimenty ukazujú, že v masívnych supravodivých prstencoch je pokles toku Φ nemeľateľne malý.⁴¹



Obr. 9: Vľavo: Supravodivý prúd tečie po povrchu drôtu a odtieňuje vnútro supravodiča od magnetického poľa B . Možno naň teda nazerať ako na rovnovážny Meissnerov prúd. Vpravo: rozloženie prúdu v priereze drôtu.

Supravodič sa v slabých externých magnetických poliach správa ako *ideálny diamagnet*, t.j. vnútri masívneho supravodiča je magnetické pole nulové (tzv. Meissnerov jav). Inými slovami, po povrchu masívneho supravodiča vloženého do externého magnetického poľa tečú rovnovážne povrchové prúdy, ktoré odtienia externé pole tak, aby vnútri supravodiča bola splnená podmienka $\mathbf{B} = 0$. Tieniace prúdy pritom tečú vo vrstve s hrúbkou λ , ktorú nazývame hĺbkou vniku magnetického poľa. Jej typické hodnoty sú uvedené v tabuľke 1.

Meissnerov jav považujeme za základnú vlastnosť supravodiča. Napríklad transport náboja bez energetických strát možno chápať ako dôsledok Meissnerovho javu. Naozaj: obvykle nazeráme na drôt, ktorým preteká prúd I , ako na zdroj magnetického poľa. Ak sa však na ten istý drôt pozrieme ako na drôt vložený do magnetického poľa, potom transportný prúd I bude tiecť kvôli Meissnerovmu javu: vďaka tomu, že vo vrstve hrúbky λ tečie prúd pozdĺž drôtu, je vnútro drôtu odtienené od magnetického poľa (pozri obrázok 9). Je podstatné si uvedomiť, že tento prúd je rovnovážny, a teda bezstratový.

Supravodivosť a supratekutosť

Bezdisipatívny transport náboja v supravodičoch je zjavným analógom bezdisipatívneho transportu hmotnosti v supratekutinách. Supravodivosť sa však týka elektrónových stupňov voľnosti kovov, preto sa od supratekutosti He II podstatne líši dvomi aspektmi:

1. vzniká vo fermiónovom systéme
2. vzniká v systéme nabitých častíc.

Ako môže fermiónový systém vytvoriť kondenzát, t.j. makroskopicky obsadený stav? Vznik supravodivosti pri chladení kovu možno pochopiť ako dvojkrokový proces: najprv vzniknú dvojelektrónové “molekuly”, tzv. *Cooperove páry*, ktoré sú bozónmi, a v druhom kroku Cooperove páry vytvoria kondenzát.⁴² Keďže elektróny sú veľmi ľahké, v súvislosti so supravodivosťou obvykle hovoríme o bezdisipatívnom transporte náboja (náboj Cooperovho páru je $-2e$), ale málokedy o bezdisipatívnom transporte hmoty.

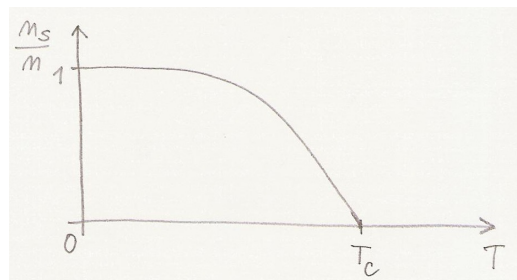
⁴¹Prstenec treba vložiť do magnetického poľa pri teplote vyššej, než je kritická, a až potom ho schlaďiť pod T_c .

⁴²V konvenčných supravodičoch je teplota, pri ktorej vznikajú Cooperove páry, obvykle neodlíšiteľná od teploty,

Predstava o Cooperových pároch je konzistentná s meraniami optickej vodivosti $\sigma'(\omega)$, pozri prednášku 19: V nesupravodivom kove možno vytvoriť excitáciu s ľubovoľne nízkou excitačnou energiou vytvorením časticovo-dierového páru, v ktorom sa diera nachádza tesne pod Fermiho plochou a častica tesne nad ňou, preto v limite nízkych frekvencií je vodivosť $\sigma'(\omega)$ nenulová. V supravodivom stave (v limite nízkych teplôt) je však vodivosť $\sigma'(\omega)$ nulová pre všetky konečné frekvencie až po frekvenciu $2\Delta/\hbar$. Teda v excitačnom spektre supravodiča existuje *zakázaný pás* okolo chemického potenciálu so šírkou 2Δ . Tento výsledok možno interpretovať ako dôsledok vzniku Cooperových párov s väzbovou energiou 2Δ , pričom $2\Delta \sim T_c$, pozri tabuľku 1. Jednou z kľúčových otázok teórie supravodivosti je otázka o pôvode síl, ktoré viažu elektróny do Cooperových párov. Tejto otázke sa budeme venovať v nasledujúcej prednáške. Vznik Cooperových párov pritom ovplyvňuje iba rozloženie tých elektrónov, ktorých energia sa nachádza v intervale šírky $\sim T_c$ okolo Fermiho plochy, t.j. zlomku $\sim T_c/\varepsilon_F$ zo všetkých elektrónov, v súlade s analýzou termodynamických veličín. Typické veľkosti ξ Cooperových párov sú uvedené v tabuľke 1.

Podľa kvantovej mechaniky môže celkový spin Cooperovho páru (t.j. sústavy dvoch spinov $S = \frac{1}{2}$) nadobúdať hodnoty $S = 0$ alebo $S = 1$. Experimenty ukazujú, že spinová magnetická susceptibilita väčšiny supravodičov pri teplotách menších než T_c klesá a pri nulovej teplote vymizne. Tento výsledok vysvetľujeme tým, že celkový spin Cooperových párov je obvykle $S = 0$ a Cooperove páry sú nemagnetické. Supravodiče s $S = 0$ sa v literatúre nazývajú singletné. Prípád $S = 1$ (tzv. tripletná supravodivosť) sa realizuje iba v malom počte supravodičov, pravdepodobne napr. v UPt₃.⁴³

Dá sa očakávať, že pri nenulovej teplote a/alebo pri nenulových aplikovaných poliach bude časť Cooperových párov rozbitá. Elektróny z rozbitých párov, tzv. normálna zložka, spolu s kondenzátom párov teda tvoria dve elektrónové “kvapaliny”, podobne ako v prípade supratekutého hélia.



Obr. 10: Teplotná závislosť podielu n_S/n elektrónov v kondenzáte. Často pre ňu zhruba platí Gorterova-Casimirova empirická formula $n_S/n = 1 - (T/T_c)^4$.

Makroskopická vlnová funkcia

Budeme predpokladať, že kondenzát možno popísať (podobne ako v prípade supratekutého ^4He) makroskopickou vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{r})$, kde $\mathbf{r}$ je súradnica ťažiska Cooperovho páru. Funkcia $\psi(\mathbf{r})$ je pritom normovaná tak, aby $|\psi(\mathbf{r})|^2$ bola koncentrácia Cooperových párov v okolí bodu $\mathbf{r}$. Vlnová funkcia $\psi(\mathbf{r})$ hrá úlohu parametra usporiadania, podobne ako napr. vektor magnetizácie $\mathbf{m}$ je parametrom usporiadania v prípade feromagnetu. Keďže každý Cooperov pár v kondenzáte obsadzuje ten istý kvantovo-mechanický stav úmerný $\psi(\mathbf{r})$, očakávame, že $\psi(\mathbf{r})$ spĺňa obyčajnú Schrödingerovu rovnicu pre jednu časticu

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m^{**}}(-i\hbar \nabla + 2e\mathbf{A})^2 \psi + U\psi, \quad (69)$$

kde $m^{**} = 2m^*$ je hmotnosť Cooperovho páru, $-2e$ je jeho náboj a U je jeho potenciálna energia.⁴⁴

kedy vzniká kondenzát (čiže supravodivosť). Jednou z príčin zrejme je, že rozmer Cooperových párov ξ je v týchto supravodičoch obvykle omnoho väčší ako typická vzdialenosť medzi susednými elektrónmi r_0 . Cooperove páry sa teda silno prekrývajú, čo pravdepodobne podporuje tvorbu kondenzátu.

Vo vysokoteplotných supravodičoch však existuje široký interval teplôt, v ktorom podľa jednej triedy teórií existujú Cooperove páry bez fázovej koherencie. Táto interpretácia experimentov je konzistentná s podstatne menšou hodnotou pomeru ξ/r_0 vo vysokoteplotných supravodičoch oproti konvenčným supravodičom, avšak nie je všeobecne akceptovaná.

⁴³Pôvodne bol za tripletný supravodič považovaný aj materiál Sr_2RuO_4 . Najnovšie experimenty však túto interpretáciu spochybňujú.

⁴⁴V rovnici (69) sme predpokladali, že Cooperov pár v mieste $\mathbf{r}$ interaguje s vektorovým potenciálom $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Ale

Ak sa obmedzíme na skúmanie homogénneho supravodiča s chemickým potenciálom pre elektróny μ , potom pri vložení Cooperovho páru sa energia supravodiča zväčší o 2μ a preto v tomto prípade treba voliť $U = 2\mu$.

Londonova rovnica a Meissnerov jav

V tomto odstavci ukážeme, že systém s nenulovým kondenzátom popísaným vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{r})$ bude vykazovať Meissnerov jav. Najprv odvodíme výraz pre hustotu supravodivého prúdu. Rovnica komplexne združená k rovnici (69) má tvar

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{1}{2m^*} (i\hbar \nabla + 2e\mathbf{A})^2 \psi^* + U\psi^*.$$

Vynásobme teraz rovnicu (69) vlnovou funkciou ψ^* a komplexne združenú rovnicu vynásobme vlnovou funkciou ψ . Rovnice odčítajme a po úprave dostaneme (pozri cvičenia)

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \nabla \cdot \left[-\frac{i\hbar}{4m^*} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) + \frac{e\mathbf{A}}{m^*} |\psi|^2 \right] = 0.$$

Keďže nábojová hustota kondenzátu je daná vzťahom $\varrho = -2e|\psi|^2$, túto rovnicu možno chápať ako rovnicu kontinuity pre náboj $\partial \varrho / \partial t + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$ s prúdovou hustotou

$$\mathbf{j} = \frac{ie\hbar}{2m^*} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{2e^2 \mathbf{A}}{m^*} |\psi|^2. \quad (70)$$

Ak vlnovú funkciu parametrizujeme v tvare $\psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|e^{i\theta(\mathbf{r})}$, potom výraz pre prúdovú hustotu možno ekvivalentne zapísať ako (pozri cvičenia)

$$\mathbf{j} = -\frac{2e^2}{m^*} |\psi|^2 \left(\mathbf{A} + \frac{\hbar}{2e} \nabla \theta \right). \quad (71)$$

Teda supravodivý prúd tečie ako odozva na vektorový potenciál $\mathbf{A}$ a/alebo gradient fázy makroskopickej vlnovej funkcie.⁴⁵ Tento výsledok je zovšeobecnením prednášky 11 na prípad nabitého kondenzátu.

V slabých poliach môžeme v prvom priblížení zanedbať závislosť $|\psi|^2$ od magnetického poľa a koncentráciu Cooperových párov môžeme brať ako priestorovo konštantnú a závisiacu len od teploty. Za tohto predpokladu namiesto (71) dostaneme tzv. *Londonovu rovnicu*

$$\mathbf{j} = -\frac{1}{\mu_0 \lambda^2} \left(\mathbf{A} + \frac{\hbar}{2e} \nabla \theta \right), \quad (72)$$

kde sme zaviedli označenie $\frac{1}{\lambda^2} = \frac{2\mu_0 e^2}{m^*} |\psi|^2$.

Teraz ukážeme, že Londonova rovnica vysvetľuje Meissnerov jav a že λ je hĺbka vniku. Naozaj, rotácia Londonovej rovnice má tvar $\lambda^2 \nabla \times \mu_0 \mathbf{j} = -\mathbf{B}$ a s uvažovaním Maxwellovej rovnice v statickom prípade $\mu_0 \mathbf{j} = \nabla \times \mathbf{B}$ ju preto možno písať v tvare $\lambda^2 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) + \mathbf{B} = 0$. Ak teraz použijeme vzťah z vektorovej analýzy $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{B}) - \nabla^2 \mathbf{B}$ a uvažíme, že $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, dostaneme rovnicu

$$\nabla^2 \mathbf{B} = -\frac{1}{\lambda^2} \mathbf{B}.$$

Táto rovnica popisuje Meissnerov jav s hĺbkou vniku λ : napríklad do polonekonečného supravodiča v polpriestore $x > 0$ totiž vniká magnetické pole B_0 rovnobežné s povrchom supravodiča podľa vzťahu⁴⁶ $B(x) = B_0 e^{-x/\lambda}$.

Cooperov pár je nelokálny objekt s typickým rozmerom ξ . Preto rovnica (69) môže popisovať elektromagnetické vlastnosti supravodičov, iba ak hodnota $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ je v celom objeme Cooperovho páru konštantná, t.j. ak $\lambda > \xi$. Pre $\lambda < \xi$ musíme elektromagnetické vlastnosti supravodičov popisovať tzv. nelokálnou teóriou: silové pôsobenie na Cooperov pár v mieste $\mathbf{r}$ závisí od vektorového potenciálu v objeme $\sim \xi^3$ okolo $\mathbf{r}$.

⁴⁵ Keďže prúd je fyzikálne pozorovateľná veličina, jeho veľkosť nemôže závisieť od výberu kalibrácie pre vektorový potenciál. Preto kalibračnú transformáciu elektromagnetického poľa $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \chi$ treba kompenzovať kalibračnou transformáciou makroskopickej vlnovej funkcie podľa predpisu $\theta \rightarrow \theta - \frac{2e}{\hbar} \chi$.

⁴⁶ Predpokladáme, že v oblasti $x < 0$ je vákuum. V tomto prípade možno zvoliť konštantnú amplitúdu vlnovej funkcie $|\psi|$, pozri nasledujúci odstavec.

Napokon preskúmame teplotnú závislosť Londonovej hĺbky vniku λ . Očakávame, že pri nulovej teplote tvoria všetky elektróny kondenzát, preto v tejto limite $|\psi|^2 = \frac{n}{2}$ a $\frac{1}{\lambda^2} = \frac{\mu_0 n e^2}{m^*}$. Tento odhad je v rádovom súlade s experimentálnymi hodnotami hĺbky vniku. S rastúcou teplotou koncentrácia elektrónov v kondenzáte $n_S = 2|\psi|^2$ klesá. Preto hĺbka vniku rastie a napokon pri T_c diverguje: supravodič prestáva vykazovať Meissnerov jav.

Okrajová podmienka pre makroskopickú vlnovú funkciu

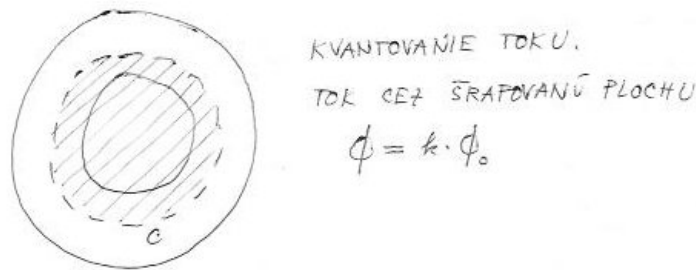
Pre supravodič konečných rozmerov je potrebné Schrödingerovu rovnicu pre vlnovú funkciu riešiť s vhodne zvolenou okrajovou podmienkou. Častým prípadom je požiadavka, aby normálová zložka supravodivého prúdu na povrchu vzorky bola nulová. Supravodivý prúd zapíšeme v tvare

$$\mathbf{j} = -\frac{e}{2m^*} [\psi^*(-i\hbar\nabla + 2e\mathbf{A})\psi + \psi(i\hbar\nabla + 2e\mathbf{A})\psi^*] = -\frac{e}{m^*} \text{Re}[\psi^*(-i\hbar\nabla + 2e\mathbf{A})\psi].$$

Okrajovú podmienku $\mathbf{n} \cdot \mathbf{j} = 0$, kde $\mathbf{n}$ je vektor normály k povrchu, preto možno písať v tvare

$$\mathbf{n} \cdot (-i\hbar\nabla + 2e\mathbf{A})\psi = \frac{i\hbar}{b}\psi, \quad (73)$$

kde b je reálna konštanta s rozmerom dĺžky. Hodnota b závisí od typu rozhrania a možno ju určiť pomocou mikroskopickéj teórie. Dá sa ukázať, že pre rozhranie supravodič-izolant (napr. vákuum) možno voliť $b \rightarrow \infty$, pre rozhranie supravodič-magnet $b \rightarrow 0$ a pre rozhranie supravodič-normálny kov nadobúda b konečnú hodnotu.



Obr. 11: Magnetický tok $\Phi = \int_{\Sigma} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}$ prechádzajúci cez ľubovoľnú plochu Σ s okrajom na čiare C hlboko vnútri masívneho supravodivého prstenca nadobúda kvantované hodnoty.

Kvantovanie magnetického toku

Skúmame masívny supravodivý prstenec a v ňom dráhu C , ktorá obopína dieru v prstenci a leží dostatočne ďaleko od povrchu prstenca. V takom prípade možno pozdĺž C meissnerovské tieniace prúdy zanedbať a platí $-\oint_C \mu_0 \lambda^2 \mathbf{j} \cdot d\mathbf{r} = 0$. Na druhej strane, z Londonovej rovnice (72) vyplýva

$$-\oint_C \mu_0 \lambda^2 \mathbf{j} \cdot d\mathbf{r} = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} + \frac{\hbar}{2e} \oint_C \nabla\theta \cdot d\mathbf{r} = \Phi - \frac{\hbar}{2e} 2\pi k,$$

kde Φ je magnetický tok prechádzajúci cez (akúkoľvek) plochu s okrajom v čiare C a k je celé číslo. Pri odvodení sme použili predpoklad, že vlnová funkcia supravodiča je jednoznačná, a preto sa jeho fáza pri obehnutí čiar C môže zmeniť iba o násobok 2π . Avšak podľa predpokladu platí $-\oint_C \mu_0 \lambda^2 \mathbf{j} \cdot d\mathbf{r} = 0$, preto magnetický tok Φ musí spĺňať podmienku $\Phi = k\Phi_0$, kde sme zaviedli tzv. *kvantum magnetického toku* ako kombináciu fundamentálnych konštánt s rozmerom magnetického toku:

$$\Phi_0 = \frac{h}{2e} = 2.0678 \times 10^{-15} \text{ Tm}^2.$$

Ukázali sme teda, že magnetický tok uväznený v masívnom supravodivom prstenci musí byť násobkom Φ_0 . Tento výsledok nám pomôže vysvetliť stabilitu perzistentných prúdov: Stav s rôznymi hodnotami k totiž nesú rôzne perzistentné prúdy. Stav s nenulovými prúdmi sú síce metastabilné, ale zníženie prúdu vyžaduje zmenu celej makroskopickej vlnovej funkcie. To je ale obvykle spojené s nutnosťou prekonať obrovskú energetickú bariéru, a preto pokles prúdu je na laboratórnej časovej škále extrémne nepravdepodobný.

Cvičenia

1. Presvedčte sa, že hustota supravodivého prúdu je daná vzťahmi (70) a (71).
2. Vypočítajte tlak, ktorým pôsobí konštantné magnetické pole B_0 na polonekonečný supravodič s hĺbkou vniku λ . Pole nech je rovnobežné s povrchom supravodiča. Návod: Objemová hustota sily pôsobiaca na prúd s prúdovou hustotou $\mathbf{j}$ je $\mathbf{f} = \mathbf{j} \times \mathbf{B}$.
3. Skúmajte supravodivú platničku s hĺbkou vniku λ a hrúbkou $2L$ v magnetickom poli B_0 rovnobežnom s povrchom

platničky. Nájdite priebeh magnetického poľa v platničke a vypočítajte priemerné magnetické pole $\bar{B}$ v platničke. Vypočítajte magnetizáciu platničky $M = \frac{1}{\mu_0}(\bar{B} - B_0)$ a susceptibilitu definovanú vzťahom $\chi = \mu_0 M / B_0$.

4. Skúmajte dva masívne homogénne supravodiče s chemickými potenciálmi μ_1 a μ_2 , ktoré sú spojené tenkým supravodivým drôtikom s prierezom S a dĺžkou L . Predpokladajte, že masívne supravodiče sú popísané vlnovými funkciami $\psi_1(t) = |\psi_1|e^{i\theta_1 - 2i\mu_1 t/\hbar}$ a $\psi_2(t) = |\psi_2|e^{i\theta_2 - 2i\mu_2 t/\hbar}$. Ukážte, že:

(a) v prípade $\mu_1 = \mu_2$ v drôtku tečie jednosmerný prúd úmerný $\sin(\theta_2 - \theta_1)$ (tzv. *jednosmerný Josephsonov jav*)

(b) v prípade $\mu_1 \neq \mu_2$ v drôtku tečie striedavý prúd s frekvenciou $\hbar\omega = 2(\mu_2 - \mu_1)$ (tzv. *striedavý Josephsonov jav*)

Návod. Zanedbajte magnetické polia generované prúdmi, ako aj prípadné nabíjanie oboch supravodičov. Pre vlnovú funkciu v drôtku použite ansatz $\psi(x, t) = \frac{L-x}{L}\psi_1(t) + \frac{x}{L}\psi_2(t)$ a prúd počítajte zo známej vlnovej funkcie $\psi(x, t)$ pomocou (70). V prípade $\mu_1 = \mu_2$ ukážte, že ansatz je riešením jednorozmernej Schrödingerovej rovnice (69) pre drôtik. Prípád $\mu_1 \neq \mu_2$ je zložitejší, pretože v drôtku nemožno definovať chemický potenciál.

15 Supravodivosť: efektívna interakcia

V tejto prednáške sa venujeme otázke o pôvode príťažlivej interakcie medzi elektrónmi. Vychádzajúc z predstavy o zviazanom systéme elektrónov a fonónov odvodíme efektívny hamiltonián v elektrónovom sektore a pomocou neho skonštruujeme modelový hamiltonián BCS.

Izotopický jav

Je dobre známe, že chemické vlastnosti prvkov dominantne závisia od protónového čísla atómov a takmer vôbec nezávisia od atómovej hmotnosti izotopu. V supravodivých prvkoch sa však kritická teplota mení pri zmene priemernej hmotnosti izotopu M podľa vzťahu $T_c \propto M^{-1/2}$. Dá sa preto očakávať, že hoci supravodivosť je novou fázou elektrónov, pri formovaní supravodivého stavu hrajú rolu aj kmity mriežky. Medzi energetickými škálami charakterizujúcimi supravodič platia nerovnosti

$$T_c \ll \hbar\omega_0 \ll \varepsilon_F,$$

pretože teplota prechodu v nízkoteplotných supravodičoch je rádovo 1 K, t.j. 10^{-4} eV, charakteristická energia kmitov mriežky $\hbar\omega_0$ je rádovo 10^{-2} eV a Fermiho energia ε_F je rádovo 1 eV.

Model žele s deformovateľným pozadím

Tvorba Cooperových párov, t.j. viazaných stavov elektrón-elektrón, bude zrejme možná, iba ak medzi elektrónmi existuje efektívna príťažlivá interakcia. V prednáške II.16 sme ukázali, že rozptyl dvojice elektrónov s počiatočnými hybnosťami $\mathbf{k}$ a $\mathbf{p}$ do konečných stavov s hybnosťami $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ a $\mathbf{p} - \mathbf{q}$ sa môže uskutočniť výmenou virtuálneho fonónu. V tomto odstavci budeme prezentovať zjednodušený argument, kde v jednotnom formalizme zahrnieme coulombovské interakcie medzi elektrónmi aj interakcie elektrónov s fonónmi. Všeobecnejšiu teóriu popisujeme v IV.n.

Začnime skúmaním efektívnej interakcie medzi elektrónmi v kove. Pre jednoduchosť sa obmedzíme na štúdium tzv. modelu žele, ale s deformovateľným iónovým pozadím. Coulombovskú interakciu medzi elektrónmi popisuje hamiltonián

$$H_{\text{Coulomb}} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \rho^e(\mathbf{r}) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \rho^e(\mathbf{r}') = \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^e \rho_{-\mathbf{q}}^e,$$

kde $\rho^e(\mathbf{r})$ je hustota elektrónov. Druhú rovnosť dostaneme zavedením Fourierovej transformácie $\rho^e(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^e \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$ v systéme s objemom $\mathcal{V}$ a s periodickými okrajovými podmienkami. Zaviedli sme tiež Fourierovu transformáciu coulombovskej interakcie, $V_{\mathbf{q}} = \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2}$.

Dielektrická konštanta

Je dobre známe, že akýkoľvek náboj externe vložený do elektrónovej kvapaliny bude rýchlo obklopený kompenzujúcim nahromadením náboja elektrónov a iónov, ktoré povedie k odtieneniu tzv. hovej interakcie $V_{\mathbf{q}}$. V nasledujúcom výklade zovšeobecníme výsledky elementárnej teórie tienenia z II.12 na prípad, kedy máme do činenia s dvomi polarizovateľnými médiami: elektrónovým plynom a iónovým pozadím.

Predpokladajme, že do elektrónovej kvapaliny je zavedená malá externá nábojová hustota v tvare rovinnej vlny $\delta\rho_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$.⁴⁷ Dôsledkom bude vznik tieniacich nábojových hustôt elektrónov $\rho_{\mathbf{q}}^e \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$ a iónov $\rho_{\mathbf{q}}^i \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$. Preto celková nábojová hustota bude $\rho_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$, kde $\rho_{\mathbf{q}} = \delta\rho_{\mathbf{q}} + \rho_{\mathbf{q}}^e + \rho_{\mathbf{q}}^i$. Celkový potenciál generovaný externým nábojom preto bude $\phi_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$, kde $\phi_{\mathbf{q}}$ je dané Poissonovou rovnicou,

$$\phi_{\mathbf{q}} = \frac{\rho_{\mathbf{q}}}{\epsilon_0 q^2} = \frac{\delta\rho_{\mathbf{q}}}{\epsilon_0 \epsilon(q, \omega) q^2}.$$

Prvá rovnica popisuje $\phi_{\mathbf{q}}$ ako dôsledok celkovej nábojovej hustoty $\rho_{\mathbf{q}}$, kým druhá rovnica berie do úvahy, že potenciál $\phi_{\mathbf{q}}$ je pôvodne generovaný externou nábojovou hustotou $\delta\rho_{\mathbf{q}}$, ale v médiu s dielektrickou konštantou $\epsilon(q, \omega) = \delta\rho_{\mathbf{q}}/\rho_{\mathbf{q}}$, ktorá môže závisieť od vlnového vektora a frekvencie. Pre malé externé náboje očakávame, že tieniace náboje lineárne závisia od celkového náboja $\rho_{\mathbf{q}}$, t.j. $\rho_{\mathbf{q}}^e = -\alpha^e(q, \omega)\rho_{\mathbf{q}}$ a $\rho_{\mathbf{q}}^i = -\alpha^i(q, \omega)\rho_{\mathbf{q}}$, kde sme definovali tzv. polarizovateľnosti $\alpha^{e,i}(q, \omega)$ elektrónov a iónov. Dielektrická konštanta potom bude daná vzťahom

$$\epsilon(q, \omega) = 1 + \alpha^e(q, \omega) + \alpha^i(q, \omega).$$

Elektrónovú polarizovateľnosť v dlhovlnnej limite $q \ll k_F$ a $\hbar\omega \ll \varepsilon_F$ sme počítali v II.12, kde sme ukázali, že

$$\alpha^e(q, \omega) = \frac{\omega_p^2}{v_s^2 q^2 - \omega(\omega + i\gamma)},$$

kde ω_p je plazmová frekvencia elektrónov s koncentráciou n a hmotnosťou m , pričom $\omega_p^2 = \frac{ne^2}{m\epsilon_0}$, $v_s = v_F/\sqrt{3}$ je rýchlosť zvuku v (hypotetickom) nenabitom elektrónovom plyne a $\gamma = 1/\tau$, kde τ je relaxačný čas elektrónov. Elektrónovú polarizovateľnosť $\alpha^e(q, \omega)$ možno presnejšie počítat pomocou mikroskopickkej teórie, pozri IV.n.

Pre iónovú polarizovateľnosť očakávame analogickú formulu, ale s iónovými parametrami. Ak predpokladáme, že ióny nesú náboj Ze a majú hmotnosť M , potom iónová plazmová frekvencia bude $\Omega_p^2 = \frac{nZe^2}{M\epsilon_0}$. Keďže $\omega_p \gg \Omega_p$, a posteriori možno overiť, že pre relevantné frekvencie možno iónovú susceptibilitu aproximovať jej vysokofrekvenčnou limitou, $\alpha^i(q, \omega) = -\Omega_p^2/\omega^2$.

Kolektívne módy

Zviazaný systém elektrónov a fonónov môže vykonávať spontánne pozdĺžne oscilácie pri frekvencii ω , ktorá rieši rovnicu $\epsilon(q, \omega) = 0$, pozri I.21. V dlhovlnnej limite $q \rightarrow 0$ existujú dve riešenia tejto rovnice. Prvé riešenie je vysokofrekvenčné, $\omega \gg v_s q, \gamma$. V tejto limite máme $\alpha^e(q, \omega) \approx -\omega_p^2/\omega^2$ a riešením je $\omega \approx \omega_p$, t.j. obyčajný plazmón. Pomer modulácií iónovej a elektrónovej hustoty v plazmóne je

$$\frac{\rho_{\mathbf{q}}^i}{\rho_{\mathbf{q}}^e} = \frac{\alpha^i(q, \omega)}{\alpha^e(q, \omega)} \approx \frac{\Omega_p^2}{\omega_p^2} \ll 1,$$

teda plazmové kmity sú dominantne kmitmi elektrónov (ióny nestíhajú kmitať).

Druhé riešenie sa realizuje v nízkofrekvenčnej limite $\omega \ll v_s q$, kedy $\alpha^e(q, \omega) \approx k_s^2/q^2$, kde $k_s = \omega_p/v_s$ je prevrátená hodnota tieniacej dĺžky. Toto riešenie má tvar $\omega_q = \Omega_p q / \sqrt{q^2 + k_s^2}$, ktorý sa v dlhovlnnej limite redukuje na $\omega_q = vq$. Ide teda o pozdĺžnu zvukovú vlnu s rýchlosťou

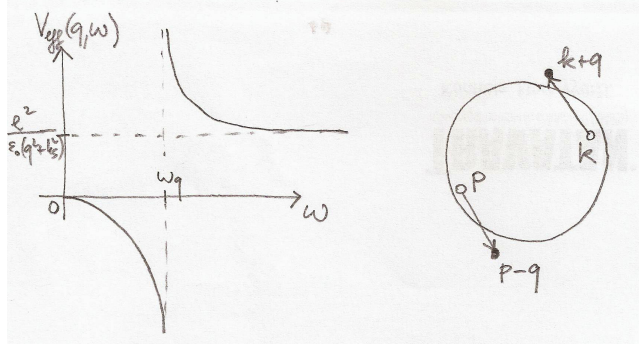
$$\frac{v}{v_F} \approx \sqrt{\frac{Zm}{3M}}.$$

Tento výsledok sa nazýva Bohmova-Staverova formula a je v dobrej kvalitatívnej zhode s experimentom. Všimnime si, že $v \ll v_s$, teda fonóny sú pomalé v porovnaní s elektrónmi. Pomer modulácií iónovej a elektrónovej hustoty vo zvukovej vlne je

$$\frac{\rho_{\mathbf{q}}^i}{\rho_{\mathbf{q}}^e} = \frac{\alpha^i(q, \omega)}{\alpha^e(q, \omega)} \approx -1,$$

⁴⁷Používame pritom nasledovnú konvenciu. Symbolmi ρ označujeme *hustoty častíc*, kým symboly $\varrho = q\rho$ označujú *nábojové hustoty* generované časticami s nábojom q .

teda celková modulácia nábojovej hustoty je malá, $\varrho_{\mathbf{q}}^i + \varrho_{\mathbf{q}}^e \approx 0$. Inými slovami, v tomto móde sa hýbu celé (neutrálne) atómy. To je zároveň dôvodom, prečo frekvencia zvukových vln môže byť malá.



Obr. 12: Vľavo: efektívna interakcia $V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega)$ ako funkcia ω pri fixovanej hodnote q . Vpravo: pri rozptyle elektrónov z okolia Fermiho plochy do okolia Fermiho plochy je energia $\hbar\omega$ prenesená v zrážke malá, ale prenesená hybnosť $\hbar q$ môže byť veľká.

Efektívny hamiltonián

Pre frekvencie ω porovnateľné s fonónovými frekvenciami, t.j. pre $\omega \ll v_s q$, má efektívna interakcia medzi dvomi nábojovými hustotami v tvare rovinných vln tvar

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{V_{\mathbf{q}}}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} = \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{1}{1 + \frac{k_s^2}{q^2} - \frac{\Omega_p^2}{\omega^2}} = \frac{e^2}{\epsilon_0(q^2 + k_s^2)} \left[1 + \frac{\omega_q^2}{\omega^2 - \omega_q^2} \right].$$

Posledná rovnica ukazuje, že efektívnu interakciu možno reprezentovať ako súčet dvoch príspevkov: tienenej Coulombovskej interakcie $\frac{e^2}{\epsilon_0(q^2 + k_s^2)}$ a efektívnej elektrón-elektrónovej interakcie spôsobenej interakciou s fonónmi $\frac{e^2}{\epsilon_0(q^2 + k_s^2)} \frac{\omega_q^2}{\omega^2 - \omega_q^2}$. Pri fixovanej hodnote vlnového vektora q je celková interakcia príťažlivá pri $\omega < \omega_q$ a odpudivá pri $\omega > \omega_q$, pozri obrázok 12.

Po uvážení tienenia preto možno efektívny hamiltonián pre systém elektrónov zapísať v tvare

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega) \rho_{\mathbf{q}}^e \rho_{-\mathbf{q}}^e,$$

kde prvý člen predstavuje grandkánonickú kinetickú energiu, t.j. kinetickú energiu zníženú o chemický potenciál. Teda na Fermiho ploche platí rovnosť $\epsilon_{\mathbf{k}} = 0$.⁴⁸ Ak teraz operátory hustoty elektrónov zapíšeme vo formalizme druhého kvantovania (pozri II.13), dostaneme

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}\sigma\mathbf{p}\sigma'} V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma'}.$$

Keď teraz uvážime, že operátor $c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$ má pre neinteragujúce elektróny v Heisenbergovom obraze časový vývoj $e^{i(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})t/\hbar}$ (pozri cvičenia), frekvenciu ω vo výraze pre H_{eff} identifikujeme ako $\hbar\omega = \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$. Na druhej strane však tiež platí $c_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma'} \propto e^{i(\epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}})t/\hbar}$, čo by indikovalo voľbu $\hbar\omega' = \epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}$. Ale ak budeme predpokladať zachovanie energie v zrážke, potom platí $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} = -(\epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}}) = \Delta\epsilon$. Ak ďalej uvážime, že $V(\mathbf{q}, \omega) = V(\mathbf{q}, -\omega)$, potom obidve voľby sú ekvivalentné a efektívny hamiltonián pre systém elektrónov možno prepísať do tvaru

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}\sigma\mathbf{p}\sigma'} V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \Delta\epsilon) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma},$$

kde sme navyše použili tzv. normálne usporiadanie, t.j. kreačné operátory sme písali naľavo od anihilačných, aby sme vylúčili nefyzikálnu interakciu elektrónu samého so sebou, pozri napr. II.13. Stojí

⁴⁸Pripomíname, že Fermiho plocha je definovaná pomocou singularity obsadzovacej funkcie elektrónov pri $T = 0$. V IV.n ukážeme, že takáto definícia má zmysel aj pre interagujúce systémy.

za zmienku, že $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ je efektívnym hamiltoniánom v zmysle kapitoly 1, pretože po odstránení fonónov z teórie sa interakcia medzi elektrónmi zmenila. Striktne vzaté, disperzný zákon $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ by mal zároveň zohľadňovať zmenu spektra elektrónov popísanú v prednáške II.16. V ďalšom výklade budeme predpokladať, že táto zmena je už vo výraze pre $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ zahrnutá.

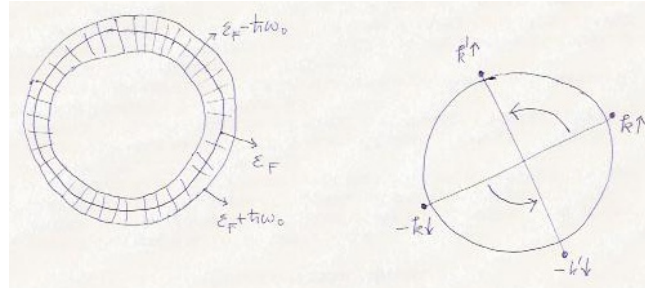
Modelový hamiltonián BCS

Z predchádzajúceho výkladu vyplýva, že (ak je energia $\Delta\varepsilon$ prenesená v zrážke dostatočne malá) amplitúda rozptylu dvoch elektrónov $V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \Delta\varepsilon)$ popisuje príťažlivú silu. V ďalšom výklade budeme skúmať vplyv malej príťažlivej interakcie na systém elektrónov. Pri riešení tejto úlohy nebudeme skúmať realistický hamiltonián $\mathcal{H}_{\text{eff}}$,⁴⁹ ale úlohu si zjednodušíme zavedením nasledovného modelového hamiltoniánu BCS, ktorý zhruba reprodukuje hlavné črty hamiltoniánu $\mathcal{H}_{\text{eff}}$:

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}. \quad (74)$$

Hamiltonián (74) si vyžaduje dlhšie zdôvodnenie:

Po prvé, čiarky nad sumami cez $\mathbf{k}$ a $\mathbf{k}'$ znamenajú, že sa obmedzujeme iba na hybnosti vnútri energetických šupiek $|\varepsilon_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_0$ a $|\varepsilon_{\mathbf{k}'}| < \hbar\omega_0$ v tesnej blízkosti Fermiho plochy, pozri obrázok 13. Za energetickú škálu $\hbar\omega_0$ pritom berieme typickú energiu fonónov (t.j. energiu rádu Debyeovej energie), čiže $\hbar\omega_0 \ll \varepsilon_F$. Hamiltonián (74) teda popisuje iba príťažlivú časť $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ (pozri obrázok 12) a odpudivá časť je úplne ignorovaná. Stav s hybnosťami mimo spomínanej energetickej šupky okolo Fermiho plochy možno (v princípe) eliminovať pomocou tzv. renormalizačnej procedúry, o ktorej sa letmo zmienime v nasledujúcej prednáške. Všimnime si tiež, že v interakčnej časti hamiltoniánu (74) sme použili opačnú znamienkovú konvenciu, než je obvyklé: príťažlivé interakcie zodpovedajú $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} > 0$.



Obr. 13: Vľavo: energetická šupka v $\mathbf{k}$ -priestore, pre ktorú konštruujeme modelový hamiltonián (74). Hrubka šupky je nadhodnotená, aby bola viditeľná. Realistickejšie by bolo prirovnať Fermiho guľu k Zemeguli a šupku k atmosfére. Vpravo: rozptylové procesy ponechané v hamiltoniáne (74). Tieto procesy sa nazývajú rozptylmi v Cooperovom kanáli alebo jednoducho Cooperovými rozptylmi.

Druhým podstatným zjednodušením je, že interakčná časť hamiltoniánu (74) popisuje iba rozptyly (Cooperových) párov elektrónov s celkovou hybnosťou $\mathbf{k} + \mathbf{p} = \mathbf{0}$. Všeobecný interakčný člen v $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ však obsahuje rozptyly párov so všetkými možnými celkovými hybnosťami $\mathbf{k} + \mathbf{p}$. Obmedzenie na rozptyl párov s nulovou celkovou hybnosťou možno zdôvodniť nasledovne. Keďže supravodivosť je nízko-teplotnou nestabilitou kovov, supravodivý stav môže zásadne ovplyvniť len rozloženie elektrónov v tesnej blízkosti Fermiho plochy. Ak však žiadame, aby elektróny v stavoch $\mathbf{k}, \mathbf{p}$ ležali v blízkosti Fermiho plochy, potom počet procesov, pri ktorých aj rozptýlené elektróny $\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{p} - \mathbf{q}$ (pozri výraz pre $\mathcal{H}_{\text{eff}}$) ležia v blízkosti Fermiho plochy, bude maximálny v prípade $\mathbf{p} = -\mathbf{k}$. Preto páry elektrónov s nulovou hybnosťou môžu najlepšie využiť existenciu príťažlivej interakcie a stačí sa obmedziť iba na ne. Dá sa tiež argumentovať, že teória s nulovou hybnosťou Cooperových párov popisuje supravodič so stojacim kondenzátom, t.j. termodynamicky rovnovážny stav.

Nakoniec pripojme ešte technickú poznámku. Aby bol hamiltonián (74) hermitovský, musíme žiadať, aby amplitúda rozptylu Cooperovho páru ($\mathbf{k}' \uparrow, -\mathbf{k}' \downarrow$) do páru ($\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$) mala symetriu $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$. Navyše budeme žiadať $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} = V_{-\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, aby sme interakčný člen mohli zapísať

⁴⁹K tejto úlohe sa vrátime v IV.n.

pomocou kreačných a anihilačných operátorov pre singletné páry, t.j. páry s celkovým spinom $S = 0$:

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} = \frac{1}{4\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \right) \left(c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} - c_{-\mathbf{k}'\uparrow} c_{\mathbf{k}'\downarrow} \right).$$

Bežné supravodiče, včítane vysokoteplotných, majú totiž singletné Cooperove páry. Teória sa však dá rozšíriť aj na popis supravodičov s tripletnými pármami.

Cvičenia

1. Ukážte, že v modeli neinteragujúcich elektrónov pre operátor $X = c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$ v Heisenbergovom obraze platí $X(t) = e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})t/\hbar} X(0)$. Návod: využite, že $\frac{\partial c_{\mathbf{k}}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} e^{iHt/\hbar} [H, c_{\mathbf{k}}] e^{-iHt/\hbar}$.
2. Pri výpočte efektívnej interakcie V_{eff} sme predpokladali, že jeden náboj generuje tienené pole a druhý (už netienený) náboj s týmto poľom interaguje. Keby obidva náboje boli tienené, muselo by platiť $V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2 \epsilon^2(\mathbf{q}, \omega)}$. Zdôvodnite, prečo by bol takýto výpočet efektívnej interakcie chybný. Návod: Skúmajte doskový kondenzátor s dielektrikom s relatívnou permitivitou ϵ_R a s plošným nábojom $\pm\sigma$ na kovových doskách. Porovnajete tri výpočty energie kondenzátora: i) pomocou makroskopickej elektrostatiky (polia E a D), ii) pomocou mikroskopickej elektrostatiky - iba pole E - pre nábojové hustoty na doskách σ/ϵ_R a $-\sigma$ (tento výpočet zahŕňa tienenie raz), iii) pomocou mikroskopickej elektrostatiky pre nábojové hustoty na doskách $\pm\sigma/\epsilon_R$ (tienenie zahrnuté dvakrát).
3. Výsledok pre $V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega)$ porovnajete s alternatívnym výrazom z II.16.
4. Ukážte, že maticový element $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ v hamiltoniáne (74) je zhruba nezávislý od izotopickej hmotnosti M .

16 Cooperova nestabilita a renormalizačná grupa

V tejto prednáške najprv ukážeme, že normálny kov s prítlačlivými interakciami medzi elektrónmi je nestabilný voči tvorbe viazaných stavov párov elektrónov. Ten istý výsledok odvodíme aj alternatívnym postupom: metódou renormalizačnej grupy.

Cooperova nestabilita

V rámci modelového hamiltoniánu BCS (74) budeme najprv skúmať nasledovnú zjednodušenú úlohu. Budeme študovať plne zaplnené neinteragujúce Fermi more (t.j. všetky stavy s $k < k_F$ budú plne obsadené) a budeme sa pýtať, čo sa stane dvom dodatočným elektrónom pridaným k takémuto systému. Budeme pritom predpokladať, že Fermiho more je inertné a jeho jedinou úlohou je zabrániť rozptylu skúmaných elektrónov do stavov s $k < k_F$.

Cooperov pár opíšeme nasledovnou vlnovou funkciou s nulovou celkovou hybnosťou:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{p>k_F} \psi_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger |FS\rangle = \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{p>k_F} \psi_{\mathbf{p}} \left(c_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger - c_{\mathbf{p}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}\uparrow}^\dagger \right) |FS\rangle,$$

kde $|FS\rangle$ je plne obsadené Fermiho more. V druhej rovnici sme predpokladali, že $\psi_{\mathbf{p}} = \psi_{-\mathbf{p}}$. Táto rovnica explicitne ukazuje, že Cooperov pár je v singletnom stave s celkovým spinom $S = 0$.

Našou úlohou bude hľadať riešenie Schrödingerovej rovnice $\mathcal{H}_{\text{BCS}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, pričom predpokladáme, že hamiltonián $\mathcal{H}_{\text{BCS}}$ nepôsobí na $|FS\rangle$. Schrödingerova rovnica tak nadobudne tvar

$$\sum_{p>k_F} (2\varepsilon_{\mathbf{p}} - E) \psi_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger |FS\rangle - \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{p>k_F} \sum_{k>k_F} V_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |FS\rangle = 0.$$

Ak teraz na ľavej strane vymeníme sumačné indexy $\mathbf{k}$ a $\mathbf{p}$ v druhom člene a vezmeme skalárny súčin s vektorom $\langle FS | c_{-\mathbf{p}\downarrow} c_{\mathbf{p}\uparrow}$, dostaneme sadu rovníc pre koeficienty $\psi_{\mathbf{p}}$:

$$(2\varepsilon_{\mathbf{p}} - E) \psi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{k>k_F} V_{\mathbf{p}\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}.$$

Aby sme ďalej zjednodušili diskusiu, budeme predpokladať, že $V_{\mathbf{p}\mathbf{k}} = V$, čo sa ukazuje ako celkom dobrá aproximácia pre jednoduché supravodiče. V takomto prípade nič nezávisí od uhlových premenných a ak sa obmedzíme na hľadanie riešení s energiou $E = -|E| < 0$, ktoré popisujú viazané stavy elektrónov,⁵⁰

⁵⁰Okrem nich samozrejme existuje kontinuum rozptylových stavov pri energiách $E > 0$.

sumy môžeme zameniť za integrály: $\frac{1}{V} \sum'_{k > k_F} = N(0) \int_0^{\hbar\omega_0} d\varepsilon_k$. Tak dostaneme integrálnu rovnicu

$$\psi_p = \frac{\lambda}{2\varepsilon_p + |E|} \int_0^{\hbar\omega_0} d\varepsilon_k \psi_k,$$

kde sme zaviedli bezrozmernú väzobnú konštantu $\lambda = N(0)V$. Integrovaním $\int_0^{\hbar\omega_0} d\varepsilon_p$ oboch strán dostaneme rovnicu pre vlastnú energiu E :

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\hbar\omega_0} \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon + |E|} = \frac{1}{2} \ln \frac{\hbar\omega_0 + |E|/2}{|E|/2}.$$

V limite slabej väzby $\lambda \ll 1$, ktorá je relevantná pre väčšinu klasických supravodičov, pre energiu E viazaného stavu napokon dostaneme výsledok $E = -2\hbar\omega_0 e^{-2/\lambda}$. Keďže energia Cooperovho páru je nižšia než energia páru neinteragujúcich elektrónov na Fermiho ploche (ktorá je rovná 0), zrejme bude energeticky výhodné vyberať elektróny z Fermiho mora a vyrábať z nich Cooperove páry zo stavov nad Fermiho plochou. Fermiho more teda bude nestabilné voči tvorbe párov.

Stojí tiež za zmienku, že nestabilita vzniká pri ľubovoľne slabej príťažlivej interakcii $\lambda > 0$ a že väzobná energia je neanalytickou funkciou λ . To naznačuje, že párovací prechod nebude možné popísať konečným rádom poruchovej teórie a supravodivý stav treba popísať neporuchovou teóriou.

Cooperova nestabilita: renormalizačná grupa

V tomto odstavci ukážeme alternatívny argument ukazujúci nestabilitu voči tvorbe párov v systémoch s príťažlivými interakciami. Ako bonus ukážeme, že (za istých okolností) je supravodivosť možná dokonca aj v systémoch s čisto odpudivými interakciami. Náš alternatívny argument bude využívať tzv. metódu renormalizačnej grupy. Ide o veľmi užitočnú teoretickú metódu s mnohými aplikáciami napr. v kvantovej teórii poľa a štatistickej fyzike. V tomto texte stručne vyložíme základné idey tejto metódy, ako sa používa vo fyzike kondenzovaných látok.

Renormalizačná grupa

Hlavným problémom pri teoretickom popise makroskopických systémov je obrovský počet stupňov voľnosti. Obvykle nás však zaujímajú iba stupne voľnosti s veľkými vlnovými dĺžkami a s malými frekvenciami, pretože tieto stupne voľnosti sú zodpovedné za makroskopické vlastnosti.⁵¹ Renormalizačná grupa je metóda, ktorá umožňuje postupne znižovať počet stupňov voľnosti študovaného modelu sériou infinitezimálnych krokov, pričom v každom kroku sa eliminujú najnepodstatnejšie stupne voľnosti. Žiadame však pritom, aby správanie ponechaných stupňov voľnosti po renormalizačnom kroku bolo také isté, ako pred týmto krokom. Túto podmienku často možno splniť nasledovne. Nech model pred renormalizačným krokom je popísaný sadou (vektorom) parametrov $\mathbf{g} = (g_1, g_2, \dots, g_N)$. Často sa stane, že správanie ponechaných stupňov voľnosti po renormalizačnom kroku je také isté ako pred ním, ak po renormalizačnom kroku zmeníme parametre modelu na $\mathbf{g}'$. Teórie, ktoré majú túto vlastnosť, nazývame renormalizovateľné. Ide o veľmi netriviálnu vlastnosť: mohlo by sa stať, že proces eliminácie stupňov voľnosti by sme museli kompenzovať novými, čoraz komplikovanejšími členmi v hamiltoniáne. V takomto prípade by metóda renormalizačnej grupy nebola užitočná.

Obvykle možno jednotlivé renormalizačné kroky charakterizovať jediným spojitým parametrom. V príklade, ktorý o chvíľu preskúmame, to bude excitačná energia jednočasticových stavov Λ : po danom kroku budú stavy s energiou väčšou než Λ eliminované. Pred začiatkom renormalizačnej procedúry má Λ veľkosť najväčšej prípustnej excitačnej energie. V procese renormalizácie budeme hodnotu Λ postupne znižovať.

Prečo hovoríme o grupe? Pri zmene škály $\Lambda_1 \rightarrow \Lambda_2$ a pri súčasnej zámene parametrov $\mathbf{g}_1 \rightarrow \mathbf{g}_2$ sme nezmenili správanie ponechaných stupňov voľnosti, teda transformácia $\{\Lambda_1, \mathbf{g}_1\} \rightarrow \{\Lambda_2, \mathbf{g}_2\}$ je operáciou symetrie. Podobne transformácia $\{\Lambda_2, \mathbf{g}_2\} \rightarrow \{\Lambda_3, \mathbf{g}_3\}$ je (pre ponechané stupne voľnosti) operáciou symetrie. Ak v množine operácií symetrie budeme násobenie definovať pomocou skladania transformácií, ľahko ukážeme, že množina operácií symetrie tvorí “grupu”.⁵²

⁵¹Peknú diskusiu čitateľ nájde napríklad v knihe Callena.

⁵²V skutočnosti ide iba o semigrupu, pretože k žiadnemu prvku (okrem identity) neexistuje inverzný prvok: stupne voľnosti vieme eliminovať, ale neexistuje univerzálna procedúra na ich pridávanie.

Aktuálnu hodnotu škály Λ je výhodné parametrizovať bezrozmerným parametrom t : $\Lambda(t) = \Lambda_0 e^{-t}$. Pri takejto voľbe zodpovedá $t = 0$ pôvodnému modelu so škálou Λ_0 . Parameter t popisuje zmenu škály. Všimnime si, že postupné zmeny škály o t_1 a t_2 možno popísať jedinou zmenou o $t_1 + t_2$, pretože $e^{-t_1} e^{-t_2} = e^{-(t_1+t_2)}$.

Ak predpokladáme, že parametre modelu $\mathbf{g}$ sú spojitými funkciami parametra t , potom je prirodzené očakávať, že vektor $\mathbf{g}(t)$ bude riešením diferenciálnej rovnice

$$\boxed{\frac{d\mathbf{g}}{dt} = \beta(\mathbf{g})} \quad (75)$$

s počiatočnou podmienkou $\mathbf{g}(0) = \mathbf{g}_0$, kde parametre $\mathbf{g}_0$ charakterizujú pôvodný, nerenormalizovaný hamiltonián. Vektorová funkcia $\beta(\mathbf{g})$, tzv. beta funkcia, je kľúčovým objektom teórie. Všimnime si, že $\beta(\mathbf{g})$ je iba funkciou aktuálnych parametrov $\mathbf{g}$. Ak poznáme beta funkciu, rovnicu (75) môžeme integrovať (prinajhoršom numericky). Zaujímá nás pritom správanie $\mathbf{g}(t)$ v limite $t \rightarrow \infty$, t.j. správanie dlhových, nízkoenergetických stupňov voľnosti. Ak v tejto limite niektorá zo zložiek $g_i \rightarrow 0$, potom príslušný proces bude irelevantný v dlhovej limite. Ak naopak $g_i \rightarrow \infty$, potom v dlhovej limite bude zodpovedajúci proces natoľko dôležitý, že ho nebude možné popísať poruchovou teóriou a bude potrebné ho zahrnúť do neporušeného hamiltoniánu. Tretia možnosť $g_i \rightarrow \text{const} \neq 0$ sa nazýva marginálnou, pretože sa realizuje medzi popísanými dvomi jednoduchšími limitami.

Cooperov problém a renormalizačná grupa

Teraz ukážeme, ako funguje metóda renormalizačnej grupy v jednoduchom kontexte Cooperovho problému. Budeme teda skúmať pár elektrónov $\mathbf{p} \uparrow, -\mathbf{p} \downarrow$ pridaných k zaplnenému Fermiho moru, pričom hamiltonián (74) budeme chápať ako súčet $\mathcal{H}_0 + H_{\text{int}}$. Hilbertov priestor pozostáva zo všetkých párov $\mathbf{p} \uparrow, -\mathbf{p} \downarrow$ s $p > p_F$, ktorých energia je menšia než $2\Lambda_0 = 2\hbar\omega_0$ (v jednotkách, v ktorých elektrón na Fermiho ploche má energiu $=0$). Pre jednoduchosť budeme predpokladať, že všetky rozptylové procesy sú popísané jediným parametrom: $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = V_0$. Renormalizácia sa bude realizovať postupným znižovaním energetickej škály Λ z počiatočnej hodnoty Λ_0 , t.j. v danom kroku budú eliminované Cooperove páry s energiou väčšou než 2Λ . Budeme pritom žiadať, aby sa nemenila amplitúda $\frac{\Gamma}{\mathcal{V}}$ pre rozptyl Cooperovho páru z nízkoenergetického stavu $\mathbf{p} \uparrow, -\mathbf{p} \downarrow$ do iného nízkoenergetického stavu $\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$, počítaná do druhého rádu poruchovej teórie podľa H_{int} . Uvidíme, že Γ sa v procese renormalizácie nemení, iba ak pri zmene škály Λ zmeníme aj parameter V . Takáto procedúra sa nazýva poruchovou renormalizáciou.

Predpokladajme, že renormalizačný proces pokročil do bodu, kedy energetická škála má hodnotu Λ a interakčná energia má hodnotu V_Λ . Podľa kapitoly 1 je všeobecný vzťah pre $\frac{\Gamma}{\mathcal{V}}$ do druhého rádu poruchovej teórie daný vzťahom

$$\frac{\Gamma}{\mathcal{V}} = \langle \mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow | H_{\text{int}} | \mathbf{p} \uparrow, -\mathbf{p} \downarrow \rangle + \langle \mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow | H_{\text{int}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - H_0 + i0} H_{\text{int}} | \mathbf{p} \uparrow, -\mathbf{p} \downarrow \rangle.$$

Ak využijeme, že pre úplný systém stavov platí $\sum_{\mathbf{K}} |\mathbf{K} \uparrow, -\mathbf{K} \downarrow\rangle \langle \mathbf{K} \uparrow, -\mathbf{K} \downarrow| = 1$, dostaneme odtiaľto

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma}{\mathcal{V}} &= \langle \mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow | H_{\text{int}} | \mathbf{p} \uparrow, -\mathbf{p} \downarrow \rangle + \sum_{\mathbf{K}} \frac{\langle \mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow | H_{\text{int}} | \mathbf{K} \uparrow, -\mathbf{K} \downarrow \rangle \langle \mathbf{K} \uparrow, -\mathbf{K} \downarrow | H_{\text{int}} | \mathbf{p} \uparrow, -\mathbf{p} \downarrow \rangle}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - 2\varepsilon_{\mathbf{K}} + i0} \\ &= -\frac{V_\Lambda}{\mathcal{V}} + \left(\frac{V_\Lambda}{\mathcal{V}} \right)^2 \sum_{\mathbf{K}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - 2\varepsilon_{\mathbf{K}} + i0} = \frac{1}{\mathcal{V}} \left[-V_\Lambda + N(0)V_\Lambda^2 \int_0^\Lambda \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - 2\varepsilon + i0} \right]. \end{aligned}$$

Preto do druhého rádu poruchovej teórie pre amplitúdu rozptylu $\Gamma(\Lambda)$ na škále Λ platí

$$\Gamma(\Lambda) = -V_\Lambda + N(0)V_\Lambda^2 \int_0^\Lambda \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - 2\varepsilon + i0}.$$

Podľa predpokladu sa však veličina Γ nemá pri zmene Λ zmeniť, t.j. má platiť $\frac{d\Gamma}{d\Lambda} = 0$. Explicitným derivovaním formuly pre $\Gamma(\Lambda)$ tak dostaneme podmienku

$$\frac{dV}{d\Lambda} = -\frac{1}{1 - 2N(0)V_\Lambda \int_0^\Lambda \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - 2\varepsilon + i0}} \times \frac{N(0)V_\Lambda^2}{2\Lambda - 2\varepsilon_{\mathbf{p}}} \approx -\frac{N(0)V_\Lambda^2}{2\Lambda},$$

kde v približnej rovnosti sme sa obmedzili iba na členy do rádu V_{Λ}^2 a predpokladali sme, že $\varepsilon_{\mathbf{p}} \ll \Lambda$, keďže skúmame rozptyl párov v tesnej blízkosti Fermiho plochy.

Ak teraz použijeme parametrizáciu energetickej škály $\Lambda = \Lambda_0 e^{-t}$ a zavedieme bezrozmernú väzobnú funkciu $\lambda(t) = N(0)V(t)$, potom rovnicu pre funkciu $\lambda = \lambda(t)$ môžeme zapísať v tvare konzistentnom so všeobecnou rovnicou (75):

$$\boxed{\frac{d\lambda}{dt} = \frac{\lambda^2}{2}},$$

teda beta funkcia pre Cooperov problém je $\beta(\lambda) = \frac{1}{2}\lambda^2$.

Riešenie diferenciálnej rovnice pre $\lambda(t)$ spĺňajúce počiatočnú podmienku $\lambda(t=0) = \lambda_0$ má tvar

$$\lambda(t) = \frac{\lambda_0}{1 - \frac{1}{2}\lambda_0 t}. \quad (76)$$

Zaujímá nás správanie funkcie $\lambda(t)$ pri rastúcom t . Začnime prípadom, kedy interakcie sú odpudivé, t.j. $\lambda_0 < 0$. V tomto prípade v limite $t \rightarrow \infty$ dostaneme $\lambda \rightarrow 0$, teda odpudivé interakcie v Cooperovom kanáli sú v nízkoenergetickej limite irelevantné.

V prípade príťažlivých síl $\lambda_0 > 0$ však cooperovské interakcie so znižovaním energetickej škály Λ rastú a divergujú pri $t^* = 2/\lambda_0$. Energetická škála zodpovedajúca t^* je $\Lambda^* = \Lambda_0 e^{-t^*} = \hbar\omega_0 e^{-2/\lambda}$. Táto škála je rádovo totožná s väzbovou energiou Cooperových párov.

Zahrnutie coulombovského odpudzovania

Napokon ukážeme jeden netriviálny dôsledok rovnice (76). Náš modelový výpočet efektívnej elektrón-elektrónovej interakcie V_{eff} ukazuje, že táto pozostáva z dvoch príspevkov: z odpudivej tienenej coulombovskej interakcie $V_c < 0$ a z príťažlivej interakcie $V_{ep} > 0$ v dôsledku interakcie s fonónmi. Pripomínáme, že v tejto prednáške máme opačnú znamienkovú konvenciu ako obvykle: príťažlivé interakcie sú kladné. Je to ekonomické, lebo hovoriac o supravodivosti, musíme študovať príťažlivé interakcie.

Pri nulovej prenesenej energii $\hbar\omega = 0$ v modeli žele dostávame $V_c + V_{ep} = 0$, teda nastáva delikátna rovnováha oboch interakcií. Keďže model žele je veľmi hrubým modelom tuhej látky, je teda na mieste otázka, či supravodivosť prežije aj v prípade, kedy $V_c + V_{ep} < 0$.

Bogoľubov si uvedomil, že interakcia V_c je prítomná medzi všetkými elektrónmi, t.j. jej škála Λ_c je daná šírkou vodivostného pásu, v bežných kovoch obvykle niekoľko eV. Na druhej strane, interakcia V_{ep} je príťažlivá len pod energetickou škálou $\Lambda_{ep} \sim \hbar\omega_0$.⁵³

Ak teda budeme študovať reálny kov, môžeme najprv metódou renormalizačnej grupy eliminovať stupne voľnosti medzi Λ_c a Λ_{ep} . Po zavedení bezrozmernej elektrón-fonónovej väzobnej funkcie $\lambda = N(0)V_{ep}$ a bezrozmernej elektrón-elektrónovej väzobnej funkcie $\mu = N(0)V_c$ pre výslednú bezrozmernú efektívnu väzobnú funkciu λ_{eff} na škále Λ_{ep} dostaneme $\lambda_{\text{eff}} = \lambda - \mu^*$, kde

$$\mu^* = \frac{\mu}{1 + \frac{1}{2}\mu \ln\left(\frac{\Lambda_c}{\Lambda_{ep}}\right)}.$$

Teda coulombovské odpudzovanie je na škále Λ_{ep} renormalizované na hodnotu μ^* , pričom $\mu^* < \mu$. Kritériom supravodivosti teda nie je $\lambda > \mu$, ale iba slabšia podmienka $\lambda > \mu^*$. Toto kritérium môže byť splnené aj v systémoch, v ktorých interakcie na pôvodnej škále sú zakaždým odpudivé.

Separácia energetických škál $\hbar\omega_0 \ll \Lambda_c$ je teda na jednej strane dobrá pre supravodivosť, keďže vedie k potlačeniu coulombovského odpudzovania, na druhej strane primalá škála $\hbar\omega_0$ znižuje energiu viazaného stavu Cooperovho páru.

Cvičenia

1. Ako závisí väzobná energia Cooperovho páru E od izotopickej hmotnosti? Ak predpokladáme, že E je rádu T_c , vysvetľuje Cooperova nestabilita experimentálne pozorovaný izotopický jav? Návod: použite Bohmovu-Staverovu formulu a výsledok cvičenia 14/4.

⁵³Nad touto škálou je elektrón-fonón-elektrónová interakcia odpudivá, preto ju možno traktovať podobne, ako coulombovské odpudzovanie.

2. Vypočítajte rozmer Cooperovho páru $\xi^2 = \frac{\langle \psi | R^2 | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$, kde R je relatívna vzdialenosť elektrónov tvoriacich pár. Návod: najprv ukážte, že $\psi(R) = \sum_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}}$, kde $\psi_{\mathbf{p}} \propto \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} + |E|}$. Použite tiež vzťah

$$\int d^3\mathbf{R} R^2 \psi^*(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} \int d^3\mathbf{R} \psi_{\mathbf{k}}^* \left(\nabla_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \right) \cdot \psi_{\mathbf{p}} \left(\nabla_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}} \right) = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^* \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}} \int d^3\mathbf{R} e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}} = V \sum_{\mathbf{p}} |\nabla_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}|^2,$$

kde v druhom kroku sme integrovali per partes podľa $\mathbf{p}$ a $\mathbf{k}$.

3. Vyriešte Cooperov problém pre dvojicu dier vnútri inertného Fermiho mora.

4. Dá sa ukázať, že v mnohočasticovom formalizme má beta funkcia tvar $\beta(\lambda) = \lambda^2$. V tomto jazyku možno divergenciu λ interpretovať ako supravodivú nestabilitu. a) Nájdite škálu Λ^* , pri ktorej λ diverguje. b) Ako sa zmení výraz pre μ^* ? c)* Preskúmajte závislosť Λ^* od ω_0 v modeli, v ktorom efektívna interakcia na škále $\hbar\omega_0$ má hodnotu $\lambda - \mu^*$.

17 Teória BCS

V tejto prednáške najprv identifikujeme parameter usporiadania pre supravodivosť a symetriu, ktorá je v supravodiči spontánne narušená. Potom prezentujeme teóriu Bardeena, Coopera a Schrieffera (BCS), t.j. diagonalizáciu hamiltoniánu (74) metódou stredného poľa.

Parameter usporiadania pre supravodič

Cooperov pár s nulovou celkovou hybnosťou je kreovaný operátorom $a^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$. Očakávame, že supravodič je kondenzátom takýchto Cooperových párov. Preto vlnová funkcia základného stavu supravodiča (t.j. pri teplote $T = 0$) bude úmerná koherentnému stavu:

$$e^{za^\dagger} |0\rangle = \exp \left[z \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right] |0\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \exp \left[z \psi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right] |0\rangle,$$

kde v druhej rovnosti sme využili, že operátory $c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ s rôznymi hybnosťami $\mathbf{k}$ navzájom komutujú.⁵⁴ Ak ďalej využijeme, že vďaka Pauliho princípu platí $(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger)^2 = 0$, vlnovú funkciu základného stavu môžeme zapísať v tvare $\prod_{\mathbf{k}} \exp \left[z \psi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right] |0\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left[1 + z \psi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right] |0\rangle$. Vlnová funkcia, ktorú sme dostali, zatiaľ nie je normovaná. BCS túto vlnovú funkciu zapísali v jednoducho normalizovateľnom tvare

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle. \quad (77)$$

Budeme pritom žiadať, aby pre všetky $\mathbf{k}$ platila nasledovná podmienka:

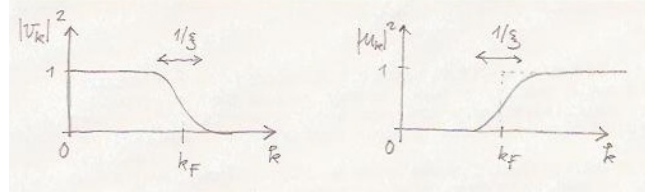
$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (78)$$

Pri tejto voľbe platí $\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = \prod_{\mathbf{k}} \langle 0 | (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}) (u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) | 0 \rangle = \prod_{\mathbf{k}} (|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2) = 1$, teda vlnová funkcia $|\Psi_0\rangle$ je normovaná. Stredný počet elektrónov v stave $|\Psi_0\rangle$ je definovaný vzťahom $\langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_0 | (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}) | \Psi_0 \rangle$, z ktorého vyplýva

$$\langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle 0 | (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}) (u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) | 0 \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2.$$

V makroskopickom systéme je teda veličina $\langle N \rangle$ úmerná objemu. Všimnime si, že $|v_{\mathbf{k}}|^2$ je pravdepodobnosť obsadenia dvojice stavov $\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow$. Keďže supravodivosť je nízkoteplotnou nestabilitou Fermiho plochy, očakávame, že $|v_{\mathbf{k}}|^2$ sa líši od rozdelenia elektrónov iba v tesnej blízkosti Fermiho plochy. Inými slovami, predpokladáme, že $|v_{\mathbf{k}}| \rightarrow 1$ hlboko vnútri Fermiho mora a $|v_{\mathbf{k}}| \rightarrow 0$ pre stavy vysoko nad Fermiho plochou.

⁵⁴Pre komutujúce operátory A a B totiž platí $e^{A+B} = e^A e^B$. Naozaj, keďže vtedy $(A+B)^n = \sum_{j=0}^n \frac{n!}{j!(n-j)!} A^{n-j} B^j$, potom $e^{A+B} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (A+B)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j=0}^n \frac{1}{j!(n-j)!} A^{n-j} B^j = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} B^j = e^A e^B$.



Obr. 14: Koefficienty $|v_{\mathbf{k}}|^2$ a $|u_{\mathbf{k}}|^2$ ako funkcie vlnového vektora. Rozdelenie elektrónov v supravodivom stave sa od rozdelenia v normálnom stave podľa teórie BCS líši len pre elektróny s excitačnou energiou $\varepsilon_{\mathbf{k}} \sim \Delta$, t.j. v šupke okolo Fermiho plochy s hrúbkou $\delta k \sim \frac{1}{\xi}$, kde $\xi \sim \frac{\hbar v_F}{\Delta}$ je tzv. (Pippardova) koherenčná dĺžka.

Keďže vlnová funkcia $|\Psi_0\rangle$ nie je vlastným stavom operátora počtu elektrónov, vypočítajme aj strednú kvadratickú odchýlku počtu elektrónov $\sqrt{\langle(N - \langle N \rangle)^2\rangle} = \sqrt{\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2}$. Dostaneme

$$\begin{aligned} \langle N^2 \rangle &= \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{p}} \langle (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}) (c_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{p}\uparrow} + c_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}\downarrow}) \rangle + \sum_{\mathbf{k}} \langle (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow})^2 \rangle \\ &= 4 \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{p}} |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{p}}|^2 + 4 \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 = 4 \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{p}} |v_{\mathbf{k}}|^2 |v_{\mathbf{p}}|^2 + 4 \sum_{\mathbf{k}} (|v_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^4). \end{aligned}$$

Preto v makroskopických systémoch je stredná kvadratická odchýlka počtu elektrónov zanedbateľná, $\sqrt{\langle(N - \langle N \rangle)^2\rangle} = 2\sqrt{\sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 |u_{\mathbf{k}}|^2} \propto \sqrt{N}$. Tento výsledok je samozrejme plne analogický výsledkom pre koherentné stavy, pozri kapitolu 11.

Ľahko nahliadneme, že v stave popísanom vlnovou funkciou BCS platí

$$b_{\mathbf{k}} = \langle \Psi_0 | c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} | \Psi_0 \rangle = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^*. \quad (79)$$

Pre vlnové vektory v blízkosti Fermiho plochy očakávame, že $v_{\mathbf{k}}$ aj $u_{\mathbf{k}}$ sú nenulové (pozri obr. 14), a teda $b_{\mathbf{k}} \neq 0$. Na druhej strane, v normálnom (nesupravodivom) stave očakávame, že $b_{\mathbf{k}} = 0$. Veličina $b_{\mathbf{k}}$ je teda parametrom usporiadania pre supravodič: supravodivý kov je v stave s nediagonálnym ďalekodosahovým usporiadaním (ODLRO), podobne ako atómy hélia v supratekutom stave.

Zostáva nám vyjadriť sa k otázke, akú symetriu narúša supravodivý stav charakterizovaný nenulovým parametrom usporiadania $b_{\mathbf{k}}$. Podobne ako pri diskusii o supratekutosti, aj modelový hamiltonián BCS (74) je invariantný voči globálnej (t.j. pre všetky stavy $\mathbf{k}$ rovnakej) kalibračnej transformácii

$$c_{\mathbf{k}}^\dagger \rightarrow e^{-i\varphi} c_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad c_{\mathbf{k}} \rightarrow e^{i\varphi} c_{\mathbf{k}}.$$

Teda pohybové rovnice nezávisia od voľby globálnej fázy. Na druhej strane sa však vlnová funkcia (77) pri takejto transformácii zmení na fyzikálne inú vlnovú funkciu (nejde pritom iba o zmenu celkovej fázy vlnovej funkcie). Teda supravodivý stav popísaný vlnovou funkciou (77) si spomedzi všetkých prípustných fáz jednu vybral a “zmrzol” v nej, podobne ako spiny magnetu pod kritickou teplotou zmrznú v jednom z prípustných smerov.

Teória BCS

Supravodič opíšeme grandkánonickým modelovým BCS hamiltoniánom (74). Pripomíname, že napr. v modeli žele platí $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$, t.j. v energii $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ je zahrnutý aj chemický potenciál a na Fermiho ploche platí $\varepsilon_{\mathbf{k}} = 0$. Naším cieľom bude nahradiť tento komplikovaný mnohočasticový hamiltonián jednoduchším hamiltoniánom.

Pre operátor $c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}$ môžeme napísať identitu $c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} = b_{\mathbf{k}} + (c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} - b_{\mathbf{k}})$. Zmyslom identity je, že akúkoľvek veličinu môžeme zapísať ako súčet jej strednej hodnoty a fluktuácie okolo strednej hodnoty. Dosadíme teraz túto identitu (a tiež identitu k nej hermitovsky združenú) do hamiltoniánu (74). Predpokladajme ďalej, že fluktuácie operátorov $c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}$ okolo ich stredných hodnôt sú malé, a preto zanedbajme členy typu (fluktuácia)². Priblíženie, pri ktorom zanedbávame fluktučné efekty, sa nazýva *priblížením stredného poľa*.⁵⁵ Takto dostaneme tzv. redukovaný BCS hamiltonián

$$\mathcal{H}_{\text{red}} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + 1 - c_{\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger b_{\mathbf{k}'} + b_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} - b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}'} \right),$$

⁵⁵Na rozdiel od magnetických systémov, kde je toto priblíženie veľmi nepresné, v prípade supravodivosti je priblíženie stredného poľa obvykle veľmi dobrým priblížením, pozri cvičenia.

kde sme kinetickú energiu prepísali do tvaru, ktorý bude neskôr výhodný. Definujme teraz dôležitú energetickú škálu (tzv. funkciu energetickej medzery)

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V} \sum'_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}'}. \quad (80)$$

Keďže podľa predpokladu $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V_{-\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, funkcia energetickej medzery je párna, $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_{-\mathbf{k}}$. Pomocou funkcie $\Delta_{\mathbf{k}}$ možno redukovaný BCS hamiltonián zapísať v kompaktnom tvare

$$\mathcal{H}_{\text{red}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\Delta_{\mathbf{k}}^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \sum_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (81)$$

Hamiltonián (81) je hľadaným zjednodušeným hamiltoniánom. Všimnime si, že jeho prvý člen je kvadratický v kreačných a anihilačných operátoroch, kým druhý člen je obyčajnou konštantou, ktorej hodnota bude dôležitá pri definovaní tzv. kondenzačnej energie. Vďaka tomu môže byť hamiltonián (81) jednoducho diagonalizovaný.

Diagonalizácia hamiltoniánu (81).

Podobne ako v kapitolách 4 a 12, diagonalizáciu zrealizujeme transformáciou od holých elektrónov k novým kvázičasticiam s kreačnými operátormi $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger$ a $\gamma_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$:

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & -v_{\mathbf{k}}^* \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}.$$

Táto transformácia je kánonickou, t.j. transformáciou od fermiónových operátorov k fermiónovým operátorom (pričom obidve sady operátorov spĺňajú kánonické komutačné vzťahy), ak transformačná matica je unitárna, t.j. ak platí (78). Ľahko overíme, že spätná transformácia má tvar

$$\begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}}^* \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}.$$

Transformačnú maticu vyberieme tak, aby hamiltonián v nových premenných bol diagonálny, t.j.

$$\begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & -v_{\mathbf{k}}^* \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\Delta_{\mathbf{k}}^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}}^* \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}.$$

Využili sme pritom, že vlastné hodnoty matice (81) sú $\pm E_{\mathbf{k}}$, kde $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$. Prvú vlastnú hodnotu sme zvolili kladnú a druhú zápornú. Ľahko možno overiť, že táto voľba je nevyhnutná, ak základný stav supravodiča má byť vákuom pre častice γ (tzv. bogolubóny). Výsledný diagonalizovaný hamiltonián má tvar

$$\mathcal{H}_{\text{red}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma}' E_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\sigma} + E_{\text{GS}}, \quad (82)$$

$$E_{\text{GS}} = \sum_{\mathbf{k}}' (b_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}). \quad (83)$$

To znamená, že v priblížení stredného poľa možno supravodič chápať ako plyn voľných fermiónov s disperzným zákonom $E_{\mathbf{k}}$. Základný stav tohto plynu má energiu E_{GS} a vlnová funkcia základného stavu $|\psi\rangle$ musí spĺňať podmienky $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}|\psi\rangle = \gamma_{\mathbf{k}\downarrow}|\psi\rangle = 0$ pre všetky $\mathbf{k}$. Ľahko možno overiť, že vlnová funkcia (77) spĺňa tieto podmienky, pozri cvičenia.

Aby sme úplne ukončili diagonalizáciu, potrebujeme nájsť funkcie $u_{\mathbf{k}}$ a $v_{\mathbf{k}}$ ako riešenia rovníc

$$(|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2)\varepsilon_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^*\Delta_{\mathbf{k}}^* + u_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}, \quad 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^2\Delta_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}}^2\Delta_{\mathbf{k}}^* = 0.$$

Riešením týchto rovníc (s funkciou $u_{\mathbf{k}}$ zvolenou ako čisto reálna) je

$$u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)}, \quad v_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*}{|\Delta_{\mathbf{k}}|} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)}.$$

Všimnime si, že $u_{\mathbf{k}} = u_{-\mathbf{k}}$ a $v_{\mathbf{k}} = v_{-\mathbf{k}}$, keďže $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ a $\Delta_{\mathbf{k}}$ sú párne funkcie. Navyiac, naša voľba dáva hlboko vnútri Fermiho mora $|v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, kým vysoko nad Fermiho energiou je $|u_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, v súlade s požiadavkami kladenými na vlnovú funkciu $|\Psi_0\rangle$, pozri obr. 14.⁵⁶

Self-konzistentná rovnica pre parameter usporiadania

Doteraz sme vyjadrili všetky veličiny pomocou funkcie $\Delta_{\mathbf{k}}$, ktorú sme však nepoznali. Teraz zostrojíme (tzv. self-konzistentnú) rovnicu pre $\Delta_{\mathbf{k}}$. Začneme s výpočtom strednej hodnoty

$$b_{\mathbf{k}} = \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \langle (-v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + u_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}) (u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \rangle = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \left[1 - \langle \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - \langle \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle \right],$$

kde v poslednej rovnici sme využili, že vo všetkých vlastných stavoch hamiltoniánu (83) existuje presne daný počet bogolubónov a preto zmiešané členy neprispievajú. Navyiac, keďže bogolubóny tvoria neinteragujúci plyn, ich počet je daný Fermiho-Diracovým rozdelením.⁵⁷

$$\langle \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\exp(E_{\mathbf{k}}/T) + 1}.$$

Ak navyiac využijeme explicitný tvar funkcií $u_{\mathbf{k}}$ a $v_{\mathbf{k}}$, ľahko overíme, že $u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}$. Po dosadení do výrazu pre $b_{\mathbf{k}}$ tak dostaneme výsledok

$$b_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} [1 - 2f_{\mathbf{k}}] = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2T}\right),$$

ktorý možno chápať ako zovšeobecnenie výrazu (79) na prípad konečných teplôt. Ak tento výsledok dosadíme do definičného vzťahu (80), dostaneme napokon

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}'}}{2T}\right). \quad (84)$$

Rovnica (84) sa nazýva rovnicou pre energetickú medzeru. Ide o tzv. self-konzistentnú rovnicu, čím sa myslí to, že funkciu $\Delta_{\mathbf{k}}$ na pravej strane treba zvoliť tak, aby táto voľba bola konzistentá s ľavou stranou. Rovnica (84) je ústrednou rovnicou BCS teórie, pretože na jej základe vieme rozhodnúť, kedy sa v danom systéme realizuje supravodivosť.

Cvičenia

1. V priblížení stredného poľa na operátor $c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ pôsobí pole $\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}'}$ namiesto presného výrazu $\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}$. Akej veľkej chyby sa pritom dopustíme, ak predpokladáme, že fluktuácie operátorov $c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}$ okolo hodnôt $b_{\mathbf{k}'}$ sú pre rôzne hodnoty $\mathbf{k}'$ navzájom nezávislé?
2. Ukážte, že vlnová funkcia (77) je vákuom pre operátory $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}$.
3. Overte, že platí vzťah $[c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}, c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger] = 1 - c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}$. Možno operátor $c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ doslovne považovať za kreačný operátor bozónu? Ďalej ukážte, že platí $[c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}, c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}] = c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}$ a $[c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}] = -c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$.
4. Pomocou cvičenia 3 ukážte, že ak za (kánonickej) hamiltonián supravodiča vezmeme $H_{\text{red}} = \mathcal{H}_{\text{red}} + \mu N_{\text{el}}$, kde $\mathcal{H}_{\text{red}}$ je grandkánonickej hamiltonián (81) a N_{el} je operátor počtu elektrónov, potom pre časový vývoj operátorov platí

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} &= [c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}, H_{\text{red}}] = 2\mu c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \left[2\varepsilon_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} - \Delta_{\mathbf{k}} (1 - c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}) \right], \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} &= [c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}, H_{\text{red}}] = \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} - \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger. \end{aligned}$$

⁵⁶Presnejšie by sme mali hovoriť iba o šupke medzi $\varepsilon_F - \hbar\omega_0$ a $\varepsilon_F + \hbar\omega_0$, v ktorej je hamiltonián (74) definovaný. Neskôr však uvidíme, že $\Delta \ll \hbar\omega_0$. Preto prívlastok "hlboko" má dobrý zmysel, aj keď sa obmedzíme iba na stavy vnútri tejto šupky.

⁵⁷Stojí za zmienku, že keďže $E_{\mathbf{k}} > 0$, v supravodivom stave pri teplote $T = 0$ je $f_{\mathbf{k}} = 0$, t.j. v základnom stave nie sú častice γ prítomné. Ďalšie dôležité pozorovanie je, že energia $E_{\mathbf{k}}$ je grandkánonickej excitačnou energiou meranou voči chemickému potenciálu, ktorý je obsiahnutý v definícii energie $\varepsilon_{\mathbf{k}}$.

Ďalej ukážte, že pre časový vývoj stredných hodnôt $b_{\mathbf{k}} = \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ a $n_{\mathbf{k}\uparrow} = \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ v BCS riešení platí $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} b_{\mathbf{k}} = 2\mu b_{\mathbf{k}}$ a $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} n_{\mathbf{k}\uparrow} = 0$, čiže $b_{\mathbf{k}}(t) = e^{-i2\mu t/\hbar} b_{\mathbf{k}}(0)$ a $n_{\mathbf{k}\uparrow}(t) = \text{konštanta}$. Rovnako sa dá ukázať, že $n_{-\mathbf{k}\downarrow}(t) = \text{konštanta}$. Porovnajte tieto výsledky s Josephsonovými rovnicami v kapitole 11. Aký je fyzikálny dôvod pre výsledok $n_{\mathbf{k}\sigma}(t) = \text{konštanta}$? Aká je energia Cooperovho páru?

5. Alternatívne odvodenie teórie BCS pomocou variačnej metódy. V takomto prístupe nahraďte hamiltonián (74) efektívnym hamiltoniánom

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left[\varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} - \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} - \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right],$$

kde $\Delta_{\mathbf{k}}, \Delta_{\mathbf{k}}^*$ chápajte ako variačné parametre. Minimalizáciou odhadu veľkého termodynamického potenciálu $\mathcal{F}_0 + \langle H - H_0 \rangle_0$ podľa $\Delta_{\mathbf{k}}, \Delta_{\mathbf{k}}^*$ odvoďte self-konzistentnú rovnicu pre parameter usporiadania (84).

18 Termodynamika supravodičov

V tejto prednáške najprv odvodíme výsledky BCS pre kritickú teplotu T_c a energetickú medzeru Δ . Potom preskúmame kondenzačnú energiu, entropiu a merné teplo supravodičov.

Riešenie self-konzistentnej rovnice

Skúmame riešenia rovnice pre energetickú medzeru (84) pre jednoduchý modelový potenciál $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V$. Ukazuje sa, že takýto potenciál dáva dobré výsledky pre konvenčné supravodiče, v ktorých príťažlivá interakcia vzniká v dôsledku interakcie elektrónov s mriežkou. V tomto prípade musíme Δ zvoliť ako konštantu nezávislú od $\mathbf{k}$. Ak navyše vezmeme Δ čisto reálne, dostaneme

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\hbar\omega_0} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}{2T}\right),$$

kde $\lambda = N(0)V$ je väzbová konštanta. Všimnime si, že $\Delta(T)$ je funkciou teploty T . Rovnicu explicitne vyriešime v limitách $T = 0$ a $T \rightarrow T_c$. Funkcia $\Delta(T)$ je spojitá a nenulová medzi týmito teplotami, preto hrá rolu parametra usporiadania.

Pri teplote $T = 0$ sa pravá strana redukuje na tabuľkový integrál. Tak dostávame presný výsledok $\Delta(0) = \frac{\hbar\omega_0}{\sinh(1/\lambda)} \approx 2\hbar\omega_0 e^{-1/\lambda}$, kde druhá rovnosť platí v limite slabšej väzby $\lambda \ll 1$.

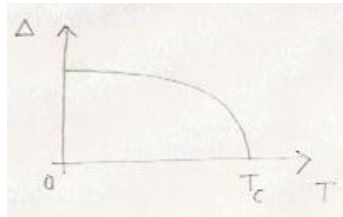
V limite $T \rightarrow T_c$ očakávame, že parameter usporiadania Δ je infinitezimálne malý. Kritickú teplotu T_c preto možno počítať z rovnice

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\hbar\omega_0} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \tanh\left(\frac{\varepsilon}{2T_c}\right) = \int_0^{\frac{\hbar\omega_0}{2T_c}} dx \frac{\tanh x}{x} \approx \ln\left(\frac{1.13\hbar\omega_0}{T_c}\right),$$

kde približná rovnosť platí v limite $\hbar\omega_0 \gg T_c$. Po invertovaní odtiaľto dostávame vzťah pre kritickú teplotu $T_c \approx 1.13\hbar\omega_0 e^{-1/\lambda}$, ktorý platí v limite $\lambda \ll 1$. Porovnaním hodnôt T_c a $\Delta(0)$ dostávame

$$\frac{\Delta(0)}{T_c} \approx 1.76,$$

teda podľa BCS teórie je podiel energetických škál T_c a $\Delta(0)$ daný univerzálnym číslom nezávislým od materiálových parametrov ω_0 a λ . Táto netriviálna predpoveď je v dobrej zhode s experimentálnymi dátami pre nízokoteplotné supravodiče so slabou väzbou, pozri tabuľku 1.



Obr. 15: Typická závislosť parametra usporiadania Δ od teploty T .

Teória BCS navyše dokáže prirodzene vysvetliť izotopický jav. K tomu si stačí uvedomiť dve veci. Po prvé, Debyeova frekvencia škáluje s hmotnosťou iónov nasledovne: $\omega_0 \propto M^{-1/2}$. Po druhé, väzbová

konštanta λ v prípade slabšej väzby nezávisí od M , ako možno ľahko overiť napr. pre model žele, v ktorom $\lambda = N(0)V \sim \frac{n}{\varepsilon_F} \frac{e^2}{\varepsilon_0 k_S^2}$. Z týchto dvoch výsledkov vyplýva pozorovaná závislosť $T_c \propto M^{-1/2}$.⁵⁸

Termodynamika supravodičov v magnetickom poli

Experimenty ukazujú, že dostatočne silné magnetické polia rozrušujú supravodivosť. V tomto odstavci ukážeme, ako možno z magnetizačných meraní určiť tzv. *kondenzačnú energiu* definovanú ako rozdiel voľných energií normálneho a supravodivého stavu. Kondenzačnú energiu teda možno určiť buď z meraní merného tepla (pozri prednášku 14), alebo z magnetizačných meraní, čo umožňuje krížovú kontrolu výsledkov.

Skúmame nasledovnú jednoduchú experimentálnu konfiguráciu. Magnetické pole nech je buďené dlhým solenoidom dĺžky L s N závitmi, nesúcim prúd I . Magnetické pole vnútri solenoidu potom bude $H = NI/L$. Do solenoidu je umiestnená homogénna kovová vzorka v tvare dlhého valca, ktorá vyplňa celý objem solenoidu. Objem vzorky označme $\mathcal{V} = LS$, kde S je prierez solenoidu. Nech M je magnetizácia vzorky a $B = \mu_0 H + \mu_0 M$ je magnetická indukcia vo vzorke. Helmholtzovu voľnú energiu vzorky v magnetickom poli definujeme vzťahom $F(T, B) = F_0(T) + \mathcal{V} \int_0^B H dB$. Definujeme tiež objemovú hustotu Helmholtzovej voľnej energie $f(T, B) = f_0(T) + \int_0^B H dB$.

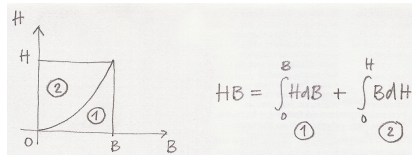
Skúmame premenu vzorky zo stavu 1 s magnetizáciou M_1 a Helmholtzovou voľnou energiou F_1 do stavu 2 s magnetizáciou M_2 a voľnou energiou F_2 . Pri infinitezimálnej zmene magnetizácie o dM sa magnetický tok cez jeden závit solenoidu zmení o $d\Phi = \mu_0 S dM$. Vďaka tomu zmena vzorky indukuje na záвите napätie $U = -d\Phi/dt$. Teda v procese transformácie vzorky zo stavu 1 do stavu 2 vzorka koná prácu A na N závitoch solenoidu, pričom $A = N \int U I dt = -NI \int d\Phi = -NI\mu_0 S(M_2 - M_1)$.⁵⁹ Ak využijeme vzťah pre pole H vnútri solenoidu, môžeme písať $A = -\mathcal{V}\mu_0(M_2 - M_1)H$.

Stavy 1 a 2 budú v termodynamickvej rovnováhe, ak sa celková energia systému “vzorka + cievka” v procese premeny nezmení, t.j. ak platí $F_2 + A = F_1$. Túto podmienku možno alternatívne zapísať ako $F_2 - \mathcal{V}\mu_0 H M_2 = F_1 - \mathcal{V}\mu_0 H M_1$ alebo, po odčítaní konštanty $\mathcal{V}\mu_0 H^2$ od oboch strán, v tvare

$$F_2 - \mathcal{V} H B_2 = F_1 - \mathcal{V} H B_1.$$

Ak zavedieme nový (Gibbsov) termodynamický potenciál $G(T, H) = F(T, B) - \mathcal{V} H B$, potom podmienku rovnováhy stavov 1 a 2 vo vonkajšom aplikovanom poli H môžeme písať ako rovnosť Gibbsových voľných energií $G_2(T, H) = G_1(T, H)$, prípadne ako rovnosť príslušných objemových hustôt $g_2(T, H) = g_1(T, H)$, kde $g(T, H) = f_0(T) + \int_0^B H dB - HB$. Ak teraz budeme predpokladať, že (rovnovážna) funkcia $B = B(H)$ monotónne rastie a naviac platí $B(0) = 0$, potom porovnaním príslušných plôch v grafe funkcie $B = B(H)$ ľahko overíme (pozri obrázok), že $\int_0^B H dB - HB = -\int_0^H B dH$. Preto pre objemovú hustotu Gibbsovej voľnej energie platí

$$g(T, H) = f_0(T) - \int_0^H B dH = f_0(T) - \frac{\mu_0}{2} H^2 + \mu_0 \int_0^H (-M) dH.$$



Obr. 16: K Legendreovej transformácii od Helmholtzovej voľnej energie $F(B)$ ku Gibbsovej voľnej energii $G(H)$.

Experimenty ukázali, že v silných aplikovaných magnetických poliach supravodiče prechádzajú do normálneho kovového stavu. Predpokladajme, že supravodivá a normálna fáza sú v rovnováhe pri kritickom magnetickom poli $H_{\max}$. Objemové hustoty (Helmholtzovej) voľnej energie v nulovom aplikovanom poli v normálnom a supravodivom stave označme $f_N(T)$ a $f_S(T)$ a príslušné magnetizácie označme

⁵⁸V systémoch so silným coulombovským odpudzovaním sa však pozorujú odchýlky od vzťahu $T_c \propto M^{-1/2}$, ktoré sú spôsobené závislosťou renormalizovaného coulombovského odpudzovania μ^* od ω_0 .

⁵⁹Pre $\Delta M = M_2 - M_1 > 0$ je práca vykonaná vzorkou na solenoide záporná, pretože $\Delta\Phi > 0$ a indukované napätie je podľa Lenzovho zákona orientované proti toku prúdu I .

$M_N(T, H)$ a $M_S(T, H)$. Ale v normálnom stave možno obvykle zanedbať slabú magnetickú odozvu, t.j. možno položiť $M_N = 0$. Podmienka rovnováhy $g_S(T, H_{\max}) = g_N(T, H_{\max})$ potom nadobudne tvar

$$f_S(T) - f_N(T) = \mu_0 \int_0^{H_{\max}} M_S(T, H) dH. \quad (85)$$

Výsledok (85) ukazuje, že kondenzačnú energiu supravodiča možno určiť (aj) z magnetizačných meraní.

V tzv. supravodičoch 1. typu označujeme pole $H_{\max}$ ako H_c . V týchto supravodičoch sa Meissnerov jav realizuje pre všetky polia $H < H_c$, preto $M_S = -H$ a všeobecný výsledok (85) sa redukuje na tvar

$$f_S(T) - f_N(T) = -\frac{1}{2}\mu_0 H_c^2(T). \quad (86)$$

Tento tvar explicitne demonštruje, že voľná energia supravodiča je nižšia ako normálneho kovu.⁶⁰

Termodynamika supravodičov v teórii BCS

Termodynamické vlastnosti supravodičov možno jednoducho počítať pomocou diagonálneho grandkanonického hamiltoniánu (83). Príslušná veľká štatistická suma je $\mathcal{Z} = \text{Tre}^{-\mathcal{H}_{\text{red}}/T}$ a veľký termodynamický potenciál $\mathcal{F}(T, \mathcal{V}, \mu) = -T \ln \mathcal{Z}$ má (až na konštantu) tvar podobný výsledku pre voľné častice $\mathcal{F}(T, \mathcal{V}, \mu) = E_{\text{GS}} - 2T \sum_{\mathbf{k}}' \ln(1 + e^{-E_{\mathbf{k}}/T})$. Ak využijeme explicitnú formulu pre E_{GS} , dostaneme odtiaľto

$$\mathcal{F}(T, \mathcal{V}, \mu) = \sum_{\mathbf{k}}' \left[b_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} - 2T \ln(1 + e^{-E_{\mathbf{k}}/T}) \right].$$

Veľký termodynamický potenciál súvisí s energiou E , entropiou S a počtom elektrónov N vzťahom $\mathcal{F} = E - TS - \mu N$. Navyše platí $d\mathcal{F} = -pd\mathcal{V} - SdT - Nd\mu$, preto E , S a N možno počítať pomocou parciálnych derivácií, ako je v termodynamike obvyklé.

Počet elektrónov

Pre počet elektrónov vo vyčlenenej šupke okolo Fermiho plochy platí $N = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mu}\right)_{T, \mathcal{V}}$, preto potrebujeme skúmať zmenu $\delta \mathcal{F}$ veľkého potenciálu pri zmene chemického potenciálu $\delta \mu$. Komplikáciou oproti skutočne voľným časticiam je, že zmena $\delta \mu$ okrem zmeny $\delta \varepsilon_{\mathbf{k}} = -\delta \mu$ vyvolá aj zmenu $\delta \Delta_{\mathbf{k}}$, a teda aj $\delta b_{\mathbf{k}}$ a $\delta E_{\mathbf{k}}$. Pre zmenu veľkého potenciálu pri zmene chemického potenciálu preto dostávame $\delta \mathcal{F} = \sum_{\mathbf{k}}' [\delta b_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^* \delta \Delta_{\mathbf{k}} + \delta \varepsilon_{\mathbf{k}} - (1 - 2f_{\mathbf{k}}) \delta E_{\mathbf{k}}]$. Ak teraz uvažíme, že $\delta E_{\mathbf{k}} = [2\varepsilon_{\mathbf{k}} \delta \varepsilon_{\mathbf{k}} + \delta \Delta_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}} + \delta \Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^*] / (2E_{\mathbf{k}})$, dostaneme

$$\delta \mathcal{F} = \sum_{\mathbf{k}}' \left[\delta b_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^* \delta \Delta_{\mathbf{k}} - \frac{(1 - 2f_{\mathbf{k}}) \Delta_{\mathbf{k}}^*}{2E_{\mathbf{k}}} \delta \Delta_{\mathbf{k}} - \frac{(1 - 2f_{\mathbf{k}}) \delta \Delta_{\mathbf{k}}^*}{2E_{\mathbf{k}}} \Delta_{\mathbf{k}} + \delta \varepsilon_{\mathbf{k}} - (1 - 2f_{\mathbf{k}}) \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \delta \varepsilon_{\mathbf{k}} \right].$$

Dá sa ukázať, že súčet prvých štyroch členov, ktoré pochádzajú od neexplicitnej závislosti $\mathcal{F}$ od chemického potenciálu, vypadne.⁶¹ Tak dostaneme nasledovnú rovnicu pre počet elektrónov

$$N = -\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu} = \sum_{\mathbf{k}}' \left[1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} + 2f_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right].$$

Stojí za zmienku, že identický výsledok dostaneme aj priamym výpočtom strednej hodnoty $N = \langle \hat{N} \rangle$ operátora počtu elektrónov $\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$, ak prejdeme k operátorom γ :

$$\begin{aligned} N &= \sum_{\mathbf{k}}' \left[\langle (u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}) (u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \rangle + \langle (-v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) (-v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + u_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}) \rangle \right] \\ &= 2 \sum_{\mathbf{k}}' [|u_{\mathbf{k}}|^2 f_{\mathbf{k}} + |v_{\mathbf{k}}|^2 (1 - f_{\mathbf{k}})]. \end{aligned}$$

⁶⁰V supravodičoch 2. typu sú síce magnetizačné krivky komplikovanejšie, ale ak definujeme tzv. termodynamické kritické pole $H_c(T)$ vzťahom $\frac{1}{2}H_c^2 = \int_0^{H_{\max}} (-M_S) dH$, výraz (86) pre kondenzačnú energiu zostane v platnosti.

⁶¹Najprv si všimnime, že tretí a štvrtý člen možno zjednodušiť s využitím vzťahu $(1 - 2f_{\mathbf{k}}) \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} = b_{\mathbf{k}}$. Potom ľahko nahliadneme, že druhý a tretí člen sa vyrušia. V súčte prvého a štvrtého člena $\sum_{\mathbf{k}}' [\delta b_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} \delta \Delta_{\mathbf{k}}^*]$ teraz nahradíme $\Delta_{\mathbf{k}}$ a $\delta \Delta_{\mathbf{k}}^*$ pomocou definičnej rovnice (80). Ak pritom využijeme, že $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$, aj tieto členy sa vyrušia.

Obvykle je koncentrácia elektrónov vo vzorke a priori známa. V takom prípade je rovnica $N = N(\mu)$ implicitnou rovnicou pre chemický potenciál. Vo všeobecnosti je chemický potenciál v supravodivom stave μ_{SC} rôzny od chemického potenciálu normálneho kovu μ_N . Jednoduchou analýzou však možno ukázať, že ak $\Delta(\varepsilon) = \Delta(-\varepsilon)$ a ak hustotu stavov v blízkosti Fermiho plochy možno v normálnom stave považovať za konštantnú, potom platí $\mu_{SC} = \mu_N$. Poznamenajme ešte, že pre nekonštantnú hustotu stavov je chemický potenciál funkciou teploty aj v neinteragujúcom Fermiho plyne, pozri napr. I.12.

Kondenzačná energia

Pod kondenzačnou energiou pri teplote $T = 0$ rozumieme rozdiel (vzťahnutý na jednotkový objem supravodiča) medzi energiou základného stavu supravodiča $E_{GS}^{SC} = \sum_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) + \mu_{SC} N$, pozri (83), a energiou (hypotetického) základného stavu normálneho kovu $E_{GS}^N = \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - |\varepsilon_{\mathbf{k}}|) + \mu_N N$:

$$\frac{1}{2} \mu_0 H_c^2 = \frac{1}{V} (E_{GS}^N - E_{GS}^{SC}).$$

Ak zanedbáme zmenu chemického potenciálu pri prechode do supravodivého stavu a využijeme vzťah $b_{\mathbf{k}}^* = \Delta_{\mathbf{k}}^* / (2E_{\mathbf{k}})$, ktorý platí pri teplote $T = 0$, dostaneme

$$\frac{1}{2} \mu_0 H_c^2 = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(E_{\mathbf{k}} - |\varepsilon_{\mathbf{k}}| - \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{2E_{\mathbf{k}}} \right) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(E_{\mathbf{k}} - |\varepsilon_{\mathbf{k}}|)^2}{2E_{\mathbf{k}}}.$$

V jednoduchom supravodiči s $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta$ možno kondenzačnú energiu explicitne vypočítať:

$$\frac{1}{2} \mu_0 H_c^2 = \frac{1}{2} N(0) \int_{-\hbar\omega_0}^{\hbar\omega_0} d\varepsilon \frac{(\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2} - |\varepsilon|)^2}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \approx N(0) \Delta^2 \int_0^\infty dx \frac{(\sqrt{x^2 + 1} - x)^2}{\sqrt{x^2 + 1}} = \frac{1}{2} N(0) \Delta^2.$$

V približnom kroku sme hornú hranicu integrovania $\hbar\omega_0$ zamenili za nekonečno, pretože integrand pre veľké ε spadá ako $\propto \varepsilon^{-3}$. Chyba, ktorej sa pritom dopustíme, je zanedbateľná, keďže $\Delta \ll \hbar\omega_0$.

Výsledok pre kondenzačnú energiu možno interpretovať nasledovne: v energetickej šupke šírky Δ okolo Fermiho plochy vzniknú viazané stavy elektrónov - Cooperove páry. Väzbová energia týchto párov je rádovo Δ a ich počet v jednotkovom objeme je rádovo $N(0)\Delta$. V modeli voľných elektrónov platí $N(0) = \frac{3}{4} \frac{n}{\varepsilon_F}$, kde n je koncentrácia elektrónov, preto kondenzačná energia pripadajúca na 1 elektrón je $\Delta^2 / \varepsilon_F \sim T_c^2 / \varepsilon_F$, v zhode s experimentálnymi výsledkami.

Entropia a merné teplo

Entropiu možno získať z veľkého termodynamického potenciálu podobne ako počet elektrónov derivovaním, $S = - \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T} \right)_{\mu, V}$. Pre zmenu veľkého potenciálu pri zmene teploty δT tentokrát dostávame

$$\delta \mathcal{F} = \sum_{\mathbf{k}} \left[\delta b_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^* \delta \Delta_{\mathbf{k}} - (1 - 2f_{\mathbf{k}}) \delta E_{\mathbf{k}} - 2\delta T \ln \left(1 + e^{-E_{\mathbf{k}}/T} \right) - 2\delta T f_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k}}}{T} \right].$$

Identickým postupom ako pri výpočte počtu častíc možno ukázať, že prvé tri členy, ktoré pochádzajú z neexplicitnej závislosti $\mathcal{F}$ od teploty, sa navzájom vyrušia. Preto pre entropiu supravodiča dostávame známy výraz pre entropiu voľných fermiónov

$$S = - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta T} = -2 \sum_{\mathbf{k}} [(1 - f_{\mathbf{k}}) \ln(1 - f_{\mathbf{k}}) + f_{\mathbf{k}} \ln f_{\mathbf{k}}].$$

Numerický výpočet ukazuje, že entropia supravodivého stavu je nižšia než entropia normálneho kovu $\frac{S_N}{V} = \frac{2\pi^2}{3} N(0) T$. Inými slovami, supravodivý stav je usporiadanejší než normálny stav. V limite nízkych teplôt $T \ll \Delta$ vieme tento výsledok ukázať pre konvenčné supravodiče s $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta$ aj analyticky. Naozaj, v tejto limite je $f_{\mathbf{k}} \approx e^{-E_{\mathbf{k}}/T} \ll 1$, a preto

$$\frac{S}{V} \approx \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \ln \frac{1}{f_{\mathbf{k}}} = \frac{4N(0)}{T} \int_{\Delta}^{\infty} \frac{dE E^2}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} e^{-E/T} \approx \frac{2N(0)\Delta\sqrt{2\Delta}}{T} e^{-\Delta/T} \int_{\Delta}^{\infty} \frac{dE}{\sqrt{E - \Delta}} e^{-\frac{E-\Delta}{T}},$$

kde v poslednej rovnici sme využili, že integrál je dominovaný energiami $E - \Delta \sim T$. Posledný integrál dáva $\sqrt{\pi T}$, a preto

$$\frac{S}{V} \approx 2\sqrt{2\pi}N(0)\Delta\sqrt{\frac{\Delta}{T}}e^{-\Delta/T}.$$

Tento výsledok explicitne ukazuje, že entropia supravodivého stavu je pri nízkych teplotách omnoho menšia než S_N .

Zo známej entropie možno určiť elektrónový príspevok k mernému teplu pri konštantnom objeme pomocou vzťahu $c_V = \frac{T}{V} \left(\frac{dS}{dT} \right)_V$. Pripomíname, že c_V je merné teplo vzťahnuté na jednotkový objem. Pri nízkych teplotách preto dostávame⁶²

$$c_V \approx 2\sqrt{2\pi}N(0)\Delta \left(\frac{\Delta}{T} \right)^{3/2} e^{-\Delta/T},$$

čiže merné teplo je exponenciálne potlačené oproti jeho hodnote v normálnom stave $c_V^N = \frac{2\pi^2}{3}N(0)T$. Všimnime si, že z merania teplotnej závislosti c_V možno v princípe určiť energetickú medzeru Δ .

Cvičenia

1. Pri teplote $T = 0$ nájdite rozdiel kinetickej aj potenciálnej energie medzi supravodivým stavom a normálnym stavom modelu (74). Ktorá energia stabilizuje supravodivý stav?
- 2.* Vypočítajte kritickú teplotu pre systém s nasledovnou interakciou medzi Cooperovými pármí: $V_{\mathbf{k}\mathbf{p}} = V_1 F_1(\mathbf{k}, \mathbf{p}) - V_2 F_2(\mathbf{k}, \mathbf{p})$, kde $F_i(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = 1$ pre $|\varepsilon_{\mathbf{k}}|, |\varepsilon_{\mathbf{p}}| < \hbar\omega_i$ a ináč $F_i(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = 0$. Člen úmerný V_1 opisuje príťažlivú interakciu s maximálnou energiou $\hbar\omega_1$, kým V_2 je odpudivá interakcia s maximálnou energiou $\hbar\omega_2 \gg \hbar\omega_1$. Takýto model realistickejšie popisuje tienené coulombovské interakcie. Návod: predpokladajte, že pre $|\varepsilon_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_1$ platí $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_1$, kým pre $\hbar\omega_1 < |\varepsilon_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_2$ platí $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_2$.
- 3.* Supravodič modelujeme Hubbardovým modelom s príťažlivou interakciou $U = -|U|$. Ukážte, že v limite silnej väzby $|U| \gg t$ sú pri nízkych teplotách $T \ll |U|$ mriežkové body alebo obsadené dvojicou elektrónov so spinmi $\uparrow, \downarrow$ (t.j. lokálnym Cooperovým párom), alebo prázdne. Odhadnite kritickú teplotu T_c takéhoto systému, ak koncentrácia elektrónov $n = \frac{N}{N} \ll 1$. Návod: najprv analogickým postupom ako pri konštrukcii efektívneho spinového modelu H_{eff} pre $U \gg t$ v kapitole 1 ukážte, že amplitúda tunelovania medzi susednými mriežkovými bodmi pre lokálne Cooperove páry je $t_{\text{eff}} = \frac{2t^2}{|U|}$. Tento výsledok interpretujte pomocou efektívnej hmotnosti m_{eff} . Kritickú teplotu odhadnite pomocou formuly pre Boseho-Einsteinovu kondenzáciu. Ukážte, že $T_c \ll |U|$, t.j. existujú tri teplotné režimy: (i) ak $T \gg |U|$, máme plyn fermiónov; (ii) ak $T_c < T \ll |U|$, máme nesupravodivý plyn bozónov; (iii) ak $T < T_c$, máme supravodič.
- 4.* Ukážte, že v termodynamicknej limite je priblíženie stredného poľa pre hamiltonián (74) presné.

19 Spektroskopia supravodičov

V tejto prednáške sa venujeme otázke, ako možno overiť teóriu BCS experimentálne. Podrobne analyzujeme predpovede BCS pre fotoemisné a tunelové experimenty a bez dôkazu popíšeme aj optickú spektroskopiu.

Excitované stavy supravodiča

Redukovaný hamiltonián BCS teórie (81) sa rozpadá na neinteragujúce sektory dvojíc jednočasticových stavov $\mathbf{k}\uparrow$ a $-\mathbf{k}\downarrow$. V každom z týchto sektorov možno skonštruovať 4 mnohoelektrónové stavy: 1 stav bez elektrónov, 2 stavy s jedným elektrónom a 1 stav s dvomi elektrónmi. Základný stav je tvorený lineárnou superpozíciou stavov bez elektrónov a s dvomi elektrónmi. Ľahko nahliadneme, že zvyšné tri

⁶²Pri derivovaní treba v princípe započítať aj teplotnú závislosť energetickej medzery $\Delta(T)$. Dá sa však ukázať, že táto je v konvenčných supravodičoch pri nízkych teplotách exponenciálne malá. Preto ju možno zanedbať.

mnohočasticové stavy možno skonštruovať ako nasledovné excitované stavy BCS:

$$\begin{aligned}\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger|\Psi_0\rangle &= c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \prod_{\mathbf{p}\neq\mathbf{k}} (u_{\mathbf{p}}^* + v_{\mathbf{p}}^* c_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger) |0\rangle, \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger|\Psi_0\rangle &= c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \prod_{\mathbf{p}\neq\mathbf{k}} (u_{\mathbf{p}}^* + v_{\mathbf{p}}^* c_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger) |0\rangle, \\ \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger|\Psi_0\rangle &= (v_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \prod_{\mathbf{p}\neq\mathbf{k}} (u_{\mathbf{p}}^* + v_{\mathbf{p}}^* c_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger) |0\rangle.\end{aligned}$$

Všimnime si, že excitované stavy $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger|\Psi_0\rangle$ a $\gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger|\Psi_0\rangle$ majú presne definovaný počet elektrónov v sektore $\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow$ - obsahujú po jednom elektróne - a ich (grandkánonická) energia je $E_{\text{GS}} + E_{\mathbf{k}}$. Odtiaľto vyplýva, že zo základného stavu sa do excitovaných stavov $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger|\psi_{\text{BCS}}\rangle$ a $\gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger|\psi_{\text{BCS}}\rangle$ môžeme dostať iba prostredníctvom procesov, ktoré menia počet elektrónov. Treba si však uvedomiť, že napríklad stav $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger|\Psi_0\rangle$ môže zo základného stavu vzniknúť dvomi spôsobmi: buď pridaním elektrónu v stave $\mathbf{k}\uparrow$, alebo odstránením elektrónu v stave $-\mathbf{k}\downarrow$.

Na druhej strane, základný stav $|\Psi_0\rangle$ a k nemu ortogonálny stav $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger|\Psi_0\rangle$ nemajú presne definovaný počet elektrónov v sektore $\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow$ - sú lineárnymi kombináciami stavov s 0 a 2 elektrónmi. Teda excitačné procesy, ktoré nemenia počet elektrónov, musia pri nulovej teplote vybudieť aspoň dva bogoľubóny - na prechod do stavu $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger|\Psi_0\rangle$ je potom potrebná energia $2E_{\mathbf{k}}$.

Alternatívny prístup

Spektrum v sektore jednočasticových stavov $\mathbf{k}\uparrow$ a $-\mathbf{k}\downarrow$ možno skonštruovať aj explicitnou diagonalizáciou vo Fockovom podpriestore, ktorého báza pozostáva zo stavu bez častíc $|0\rangle$, z dvoch jednočasticových stavov $c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger|0\rangle$ a $c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger|0\rangle$ a z plne obsadeného stavu $c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger|0\rangle$. V tejto báze je hamiltonián (81) reprezentovaný nasledovnou maticou 4×4 :

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\Delta_{\mathbf{k}}^* \\ 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} & 0 \\ -\Delta_{\mathbf{k}} & 0 & 0 & 2\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}.$$

V tomto prístupe je očividné, že stavy $c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger|0\rangle$ a $c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger|0\rangle$ sú vlastnými stavmi s presne jedným elektrónom a s energiou $\varepsilon_{\mathbf{k}}$. Zvyšné dva stavy sú lineárne superpozície bezčasticových a dvojčasticových stavov. Základným stavom je lineárna kombinácia $u_{\mathbf{k}}^*|0\rangle + v_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger|0\rangle$ s energiou $\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}$ a najvyšším excitovaným stavom je ortogonálna kombinácia $v_{\mathbf{k}}|0\rangle - u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger|0\rangle$ s energiou $\varepsilon_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}$.

Spektrálna funkcia elektrónu

Vo zvyšku tejto prednášky sa venujeme popisu fyzikálnych vlastností supravodičov. Začnime popisom experimentov, pri ktorých sa mení počet častíc v systéme. Pre jednoduchosť sa pritom obmedzíme na prípad $T = 0$. Naviac budeme pracovať v kánonickom súbore a budeme predpokladať, že základný stav $|\Psi_0\rangle$ obsahuje N elektrónov a jeho energia je E_0^N .

Ak do systému v stave $|\Psi_0\rangle$ pridáme elektrón v jednočasticovom stave $\mathbf{k}\sigma$, výsledkom bude stav $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger|\Psi_0\rangle$ systému s $N + 1$ elektrónmi. Tento stav možno rozložiť do bázy vlastných stavov $|n\rangle$ systému s $N + 1$ elektrónmi, ktorých energie sú E_n^{N+1} . Pravdepodobnosť toho, že stav $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger|\Psi_0\rangle$ má energiu E_n^{N+1} , je $\left| \langle n | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | \Psi_0 \rangle \right|^2$. Definujme nasledovnú spektrálnu funkciu pre pridávanie elektrónov:

$$A_{\sigma}^>(\mathbf{k}, E) = \sum_n \left| \langle n | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | \Psi_0 \rangle \right|^2 \delta [E - (E_n^{N+1} - E_0^N)],$$

Funkcia $A_{\sigma}^>(\mathbf{k}, E)$ meria váhu, s ktorou elektrón pridaný do jednočasticového stavu $\mathbf{k}\sigma$ zvýši energiu systému o E . Túto funkciu možno (aspoň v princípe) merať pomocou tzv. inverznej fotoemisie.⁶³

⁶³Úvodnú informáciu o fotoemisnej spektroskopii čitateľ nájde napr. v II.24. Inverzná fotoemisie je v čase obrátený proces fotoemisie.

Všimnime si, že keďže $E_n^{N+1} - E_0^N \geq E_0^{N+1} - E_0^N = \mu$, spektrálna funkcia $A_\sigma^>(\mathbf{k}, E)$ môže byť nenulová iba pre energie $E \geq \mu$. V špeciálnom prípade neinteragujúcich elektrónov môže byť funkcia $A_\sigma^>(\mathbf{k}, E)$ nenulová iba pre $k > k_F$. V tomto prípade k nej prispieva iba stav $|n\rangle = c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger |\Psi_0\rangle$ s energiou $E_n^{N+1} = E_0^N + \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu$.

Definujme tiež spektrálnu funkciu pre odoberanie elektrónov:

$$A_\sigma^<(\mathbf{k}, E) = \sum_n |\langle n | c_{\mathbf{k}\sigma} | \Psi_0 \rangle|^2 \delta [E - (E_0^N - E_n^{N-1})],$$

kde $|n\rangle$ sú tentoraz vlastné stavy systému s $N - 1$ elektrónmi, ktorých energie sú E_n^{N-1} . Funkcia $A_\sigma^<(\mathbf{k}, E)$ meria váhu, s ktorou elektrón odoberaný z jednočasticového stavu $\mathbf{k}\sigma$ zníži energiu systému o E a možno ju merať pomocou fotoemisných experimentov. Keďže $E_0^N - E_n^{N-1} \leq E_0^N - E_0^{N-1} = \mu$, spektrálna funkcia $A_\sigma^<(\mathbf{k}, E)$ môže byť nenulová iba pre energie $E \leq \mu$. V špeciálnom prípade neinteragujúcich elektrónov môže byť funkcia $A_\sigma^<(\mathbf{k}, E)$ nenulová iba pre $k < k_F$. V tomto prípade k nej prispieva iba stav $|n\rangle = c_{\mathbf{k}\sigma} |\Psi_0\rangle$ s energiou $E_n^{N-1} = E_0^N - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$.

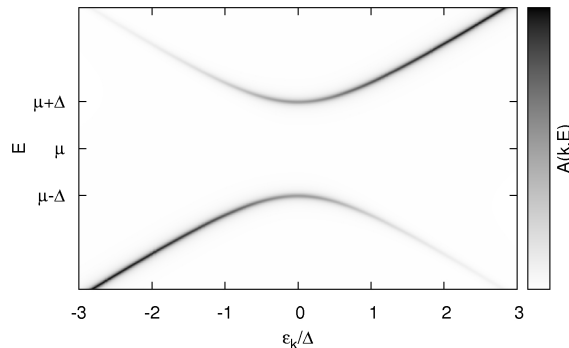
Ak definujeme celkovú spektrálnu funkciu vzťahom

$$A_\sigma(\mathbf{k}, E) = A_\sigma^>(\mathbf{k}, E) + A_\sigma^<(\mathbf{k}, E),$$

potom pre neinteragujúce elektróny dostávame $A_\sigma(\mathbf{k}, E) = \delta[E - (\mu + \varepsilon_{\mathbf{k}})]$, kde $\mu + \varepsilon_{\mathbf{k}}$ je kánonická energia stavu $\mathbf{k}$. Teda vkladanie alebo vyberanie elektrónu do stavu $\mathbf{k}\sigma$ je v neinteragujúcom systéme možné pri jedinej, presne definovanej energii. V špeciálnom prípade neinteragujúcich elektrónov je pre $k > k_F$ nenulová iba funkcia $A_\sigma^>(\mathbf{k}, E)$, kým pre $k < k_F$ je nenulová iba funkcia $A_\sigma^<(\mathbf{k}, E)$.

Spektrálna funkcia v supravodivom stave

Teraz preskúmame spektrálnu funkciu elektrónu $A_\sigma^>(\mathbf{k}, E)$ v supravodivom stave. Maticový element $|\langle n | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | \Psi_0 \rangle|^2$ ľahko vypočítame prechodom k bogoľubónovým operátorom. Jediný excitovaný stav, ktorý dá nenulový príspevok, je $|n\rangle = \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger |\Psi_0\rangle$ s grandkánonicou energiou $E_{\text{GS}} + E_{\mathbf{k}}$, preto v prípade vkladania elektrónov máme $|\langle n | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | \Psi_0 \rangle|^2 = |u_{\mathbf{k}}|^2$. V grand-kánonickej formulácii nepoznáme presné počty elektrónov v stavoch $|n\rangle$ a $|\Psi_0\rangle$, ale vieme, že v prípade vkladania elektrónov je v stave $|n\rangle$ o jeden elektrón viac ako v stave $|\Psi_0\rangle$. Preto rozdiel energií $E_n - E_0$ pozostáva z dvoch príspevkov: z nárastu grand-kánonickej energie $\mathcal{H}$ o $E_{\mathbf{k}}$ a z príspevku od zmeny počtu elektrónov $\mu\Delta N = \mu$, čiže $E_n - E_0 = \mu + E_{\mathbf{k}}$. Preto $A_\sigma^>(\mathbf{k}, E) = |u_{\mathbf{k}}|^2 \delta[E - (\mu + E_{\mathbf{k}})]$.



Obr. 17: Mapa spektrálnej funkcie elektrónu $A(\mathbf{k}, E)$ v rovine $(\varepsilon_{\mathbf{k}}, E)$ pre vlnové vektory $\mathbf{k}$ v tesnej blízkosti Fermiho plochy. Tmavé oblasti zodovedajú veľkým hodnotám $A(\mathbf{k}, E)$. (F. Horváth)

Podobne v prípade odoberania elektrónov jediný excitovaný stav, ktorý dá nenulový príspevok, je $|n\rangle = \gamma_{-\mathbf{k}-\sigma}^\dagger |\Psi_0\rangle$ s grandkánonicou energiou $E_{\text{GS}} + E_{\mathbf{k}}$. Pre maticový element dostaneme $|\langle n | c_{\mathbf{k}\sigma} | \Psi_0 \rangle|^2 = |v_{\mathbf{k}}|^2$. Rozdiel energií $E_n - E_0$ pozostáva z nárastu grand-kánonickej energie $\mathcal{H}$ o $E_{\mathbf{k}}$ a z príspevku od zmeny počtu elektrónov $\mu\Delta N = -\mu$, preto $E_n - E_0 = E_{\mathbf{k}} - \mu$ a $A_\sigma^<(\mathbf{k}, E) = |v_{\mathbf{k}}|^2 \delta[E - (\mu - E_{\mathbf{k}})]$.

Pre spektrálnu funkciu elektrónu v supravodivom stave $A_\sigma(\mathbf{k}, \varepsilon)$ teda dostávame výsledok

$$A_\sigma(\mathbf{k}, E) = |u_{\mathbf{k}}|^2 \delta[E - (\mu + E_{\mathbf{k}})] + |v_{\mathbf{k}}|^2 \delta[E - (\mu - E_{\mathbf{k}})]. \quad (87)$$

Teraz preskúmame niekoľko dôležitých dôsledkov výsledku (87). Začnime s pozorovaním, že spektrálna funkcia (87) nezávisí od projekcie spinu σ , ktorú odteraz nebudeme uvádzať. Ide o dôsledok predpokladu o singletnom párovaní (spin Cooperovho páru $S = 0$). V tripletných supravodičoch (spin $S = 1$) spektrálna funkcia môže, ale nemusí, závisieť od σ .

Ďalej si všimnime, že pre fixovanú hybnosť $\mathbf{k}$ v blízkosti Fermiho plochy v supravodivom stave existuje nenulová váha pre vkladanie a zároveň pre odoberanie elektrónu. Súčet oboch váh je konštantný, lebo $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. V limite $\Delta \rightarrow 0$ spektrálna funkcia spojitou prejde na spektrálnu funkciu neinteragujúcich elektrónov, pretože váhy $|u_{\mathbf{k}}|^2$ pre $k < k_F$ a $|v_{\mathbf{k}}|^2$ pre $k > k_F$ vymiznú.

Podobne pri fixovanej energii E k spektrálnej funkcii prispievajú dve hybnosti, jedna pod a jedna nad Fermiho plochou. Spektrálna váha je však striktne nulová v tesnej blízkosti Fermiho plochy, a síce v intervale medzi $\mu - \Delta$ a $\mu + \Delta$. Z tohto dôvodu hovoríme o Δ ako o energetickej medzere.

Tunelová hustota stavov

V niektorých prípadoch (napr. pri skúmaní difúzneho tunelovania) nás zaujíma iba celkový počet elektrónových stavov s danou energiou E , bez ohľadu na hybnosť elektrónov. V takýchto prípadoch je užitočné skúmať tzv. tunelovú hustotu stavov supravodiča,

$$N_S(E) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} A_S(\mathbf{k}, E),$$

kde $A_S(\mathbf{k}, E)$ je spektrálna funkcia supravodiča. Táto definícia, ak ju aplikujeme na neinteragujúce elektróny v normálnom kove so spektrálnou funkciou $A(\mathbf{k}, E) = \delta[E - (\mu + \varepsilon_{\mathbf{k}})]$, reprodukuje normálnu hustotu stavov $N(E)$ definovanú v I.12.

V ďalšom výklade sa (v súlade s bežnou praxou) od kánonickej energie E vrátime ku grandkánonickej energii $\varepsilon = E - \mu$. Ak spektrálna funkcia $A_S(\mathbf{k}, \varepsilon)$ nezávisí od smeru hybnosti $\mathbf{k}$, ale len od energie ε_k , potom je výhodné sumu cez $\mathbf{k}$ nahradiť integrálom, $\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_k N(\varepsilon_k)$. Naviac, pretože funkcia $N_S(\varepsilon)$ nás zaujíma iba pre energie $|\varepsilon| \sim \Delta$, t.j. v tesnej blízkosti Fermiho plochy, hustotu stavov v normálnom stave možno považovať za konštantnú, $N(\varepsilon_k) \approx N(0)$, a pre tunelovaciu hustotu stavov dostaneme

$$\frac{N_S(\varepsilon)}{N(0)} \approx \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_k A_S(\varepsilon_k, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_k [|u_k|^2 \delta(\varepsilon - E_k) + |v_k|^2 \delta(\varepsilon + E_k)].$$

Pre energie $\varepsilon > 0$ preto platí

$$\frac{N_S(\varepsilon)}{N(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_k \frac{E_k + \varepsilon_k}{2E_k} \delta(\varepsilon - E_k) = \int_0^{\infty} d\varepsilon_k \delta\left(\varepsilon - \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}\right) = \text{Re} \left[\frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}} \right],$$

kde sme v druhom kroku využili, že E_k je párna funkcia ε_k . Analogickým výpočtom ľahko overíme, že pre $\varepsilon < 0$ platí $N_S(\varepsilon) = N_S(-\varepsilon)$, teda hustota stavov je párna funkcia.

Všimnime si, že sme opäť dostali výsledok, podľa ktorého pre energie $|\varepsilon| < \Delta$ v systéme neexistujú stavy, do ktorých možno vložiť elektrón. Stojí za zmienku, že absencia stavov pre $|\varepsilon| < \Delta$ je kompenzovaná nahromadením stavov (divergenciou $N_S(\varepsilon)$) pri energiách tesne nad energiou Δ a že celkový počet stavov $\int d\varepsilon N(\varepsilon)$ zostáva nezmenený. Pre nízkoteplotné supravodiče je predpoveď teórie BCS pre tunelovú hustotu stavov v dobrom súhlase s experimentálnymi výsledkami získanými na tzv. tunelových spojoch medzi obyčajným kovom a supravodičom. Tieto experimenty nám obvykle poskytujú jedno z najpresnejších meraní parametra Δ .

Optická spektroskopia

Informáciu o energetickej medzere možno získať aj pomocou experimentov, ktoré nemenia počet častíc vo vzorke. Ako príklad takéhoto typu experimentov v tomto odstavci kvalitatívne popíšeme predpovede teórie BCS pre optickú vodivosť $\sigma(\omega)$, ktorú možno určiť napríklad z merania odrazivosti, pozri I.22.

Podľa najjednoduchšieho (tzv. Drudeho) modelu možno príspevok vodivostného pásu k frekvenčne závislej vodivosti normálneho kovu $\sigma_N(\omega) = \sigma'_N(\omega) + i\sigma''_N(\omega)$ popísať vzťahmi

$$\sigma_N(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}, \quad \sigma'_N(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 + (\omega\tau)^2}, \quad \sigma''_N(\omega) = \frac{\sigma_0\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2},$$

kde τ je doba života elektrónov a $\sigma_0 = ne^2\tau/m^*$ je statická vodivosť, pozri I.22. Drudeho model často dobre popisuje optické vlastnosti normálnych kovov. Dôvody sú aspoň tri:

Po prvé, $\sigma_N(\omega)$ ako funkcia komplexnej frekvencie ω je analytická v hornej polrovine. Táto vlastnosť musí byť splnená, ak odozva systému má byť kauzálna, pozri I.21.

Po druhé, v limite vysokých frekvencií komplexná vodivosť klesá k nule, $\sigma_N(\omega) \rightarrow 0$. V tejto limite pritom naviac platí $\sigma''_N(\omega) = \frac{ne^2}{m^*\omega}$, t.j. vodivosť nezávisí od doby života elektrónov a je totožná s výsledkom pre neinteragujúce elektróny. Tak to však aj má byť, pretože pri vysokých frekvenciách elektróny nestihnú vykonať zrážky, teda vysokofrekvenčný výraz pre $\sigma''_N(\omega)$ je presný.

Po tretie, reálna časť optickej vodivosti spĺňa nerovnosť $\sigma'_N(\omega) \geq 0$, ako aj má byť, pretože $\sigma'_N(\omega)$ meria straty elektromagnetickej energie v systéme, ktoré nemôžu byť záporné.

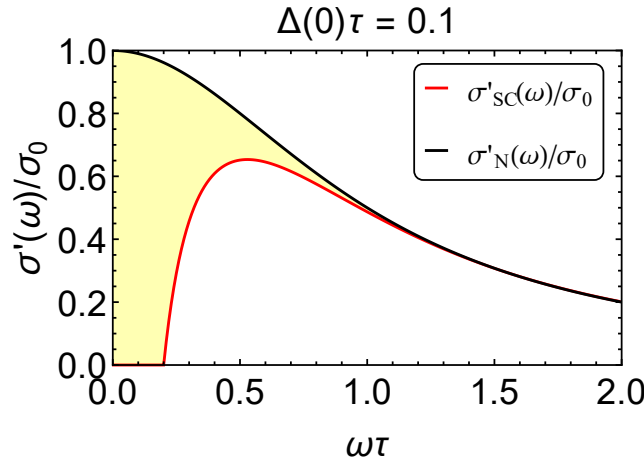
Z prvých dvoch vlastností vyplýva, že $\sigma_N(\omega)$ spĺňa Kramersove-Kronigove vzťahy. Drudeho formula naviac spĺňa exaktné tzv. sumačné pravidlo pre vodivosť

$$\int_0^\infty d\omega \sigma'(\omega) = \frac{\pi ne^2}{2m^*}, \quad (88)$$

ktoré musí platiť vždy, teda nielen v normálnom, ale aj v supravodivom stave - preto pri $\sigma'(\omega)$ nepíšeme index N . Naozaj: sumačné pravidlo (88) vyplýva z Kramersovho-Kronigovho vzťahu pre $\sigma''(\omega)$, ak ho použijeme v limite vysokých frekvencií, kde poznáme presný tvar $\sigma''(\omega) = \frac{ne^2}{m^*\omega}$:

$$\sigma''(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu \sigma'(\nu)}{\omega - \nu} \xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} \frac{ne^2}{m^*\omega} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu \sigma'(\nu)}{\omega}.$$

Vo výsledku stačí použiť, že funkcia $\sigma'(\omega)$ je párna (pozri I.21) a sumačné pravidlo (88) je dokázané.



Obr. 18: Reálna časť optickej vodivosti $\sigma_N(\omega)$ v normálnom stave (čierna) a $\sigma_{SC}(\omega)$ v supravodivom stave pri nulovej teplote (červená). Vodivosť $\sigma_{SC}(\omega)$ je nulová pri nízkych (ale konečných) frekvenciách $\hbar\omega < 2\Delta$. Pri nulovej frekvencii je vodivosť $\sigma_{SC}(\omega)$ nekonečná. Jej váhu D môžeme určiť z chýbajúcej plochy: $D = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega [\sigma'_N(\omega) - \sigma'_{reg}(\omega)]$. (F. Herman)

V supravodivom stave sa obmedzíme na analýzu reálnej časti vodivosti $\sigma'_{SC}(\omega)$, ktorá meria absorpciu pri frekvencii ω . Naviac budeme pre jednoduchosť predpokladať, že teplota $T = 0$. Keďže pri absorpcii nedochádza k zmene počtu častíc, očakávaná minimálna energia, pri ktorej supravodič môže absorbovať žiarenie, je $\hbar\omega = 2\Delta$. Explicitný výpočet, ktorý tu nebudeme reprodukovat, toto očakávanie potvrdzuje, pozri obrázok 18. Z tohto obrázku je zrejmé, že v supravodivom stave môže byť sumačné pravidlo (88) splnené, len ak $\sigma'_{SC}(\omega)$ obsahuje dodatočný príspevok, ktorý bude kompenzovať žltu vyznačenú chýbajúcu plochu. Takýto príspevok skutočne existuje: vodivosť supravodiča je totiž pri frekvencii $\omega = 0$ nekonečná, preto môžeme písať

$$\sigma'_{SC}(\omega) = \pi D \delta(\omega) + \sigma'_{reg}(\omega),$$

kde prvý (singulárny) člen popisuje nekonečnú vodivosť a $\sigma'_{\text{reg}}(\omega)$ je tzv. regulárny príspevok k $\sigma'_{SC}(\omega)$. Váhu D môžeme určiť zo sumačného pravidla: $D = \frac{ne^2}{m^*} - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \sigma'_{\text{reg}}(\omega)$. Dá sa ukázať, že váha D súvisí s hĺbkou vniku λ pomocou vzťahu $D = \frac{1}{\mu_0 \lambda^2}$, pozri cvičenia.

Cvičenia

1. Ukážte, že pôsobenie externého poľa, ktoré naruša symetriu voči otočeniu času, potláča supravodivosť. Návod: najprv uvažte, že časovo invertované stavy $\mathbf{k}\uparrow$ a $-\mathbf{k}\downarrow$ budú mať v prítomnosti poľa rôzne energie, povedzme $\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{k}}$ a $\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k}}$. Potom počítajte spektrum supravodiča v sektore jednočasticových stavov $\mathbf{k}\uparrow$ a $-\mathbf{k}\downarrow$. Čím je daná energia $\delta_{\mathbf{k}}$ pre magnetické pole? Uvážte, že magnetické pole pôsobí na orbitálne, ale aj na spinový stupeň voľnosti elektrónov.
2. Ukážte, že základný stav $(u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger)|0\rangle$ v sektore jednočasticových stavov $\mathbf{k}\uparrow$ a $-\mathbf{k}\downarrow$ nie je vlastným stavom operátora spinu. Presvedčte sa však, že základný stav $(u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger)(u_{-\mathbf{k}}^* + v_{-\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger)|0\rangle$ v sektore generovanom jednočasticovými stavmi $\mathbf{k}\uparrow$, $\mathbf{k}\downarrow$, $-\mathbf{k}\uparrow$ a $-\mathbf{k}\downarrow$ je spinový singlet, ak platí $u_{-\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} v_{-\mathbf{k}}$.
3. Ukážte, že platí $D = \frac{1}{\mu_0 \lambda^2}$, kde λ je hĺbka vniku. Návod: najprv dokážte, že imaginárna časť prislúchajúca k singulárnej reálnej vodivosti $\sigma'_{\text{sing}}(\omega) = \pi D \delta(\omega)$ je $\sigma''_{\text{sing}}(\omega) = \frac{D}{\omega}$. Potom ukážte, že výraz pre singulárny prúd $\mathbf{j}_{\text{sing}} = i\sigma''_{\text{sing}}(\omega)\mathbf{E}$ sa dá prepísať v tvare Londonovej rovnice (72), pretože $\mathbf{E} = i\omega\mathbf{A}$.
4. Pomocou sumačného pravidla a obrázku 18 ukážte, že pri teplote $T = 0$ v tzv. čistej limite $\Delta \gg \hbar/\tau$ platí $D = \frac{ne^2}{m^*}$, kým v tzv. špinavej limite $\Delta \ll \hbar/\tau$ platí $D \approx \frac{ne^2}{m^*} \frac{\tau\Delta}{\hbar}$.

20 Topologické defekty

V tejto prednáške ukážeme, že víry a antivíry zavedené v prednáške 8 sú špeciálnym prípadom topologických defektov - t.j. defektov, ktorých stabilita vyplýva z topologických úvah. Popíšeme fyzikálne dôsledky, ku ktorým vedie prítomnosť takýchto defektov.

Defekty parametra usporiadania

Pri spontánnom narušení symetrie lokálny parameter usporiadania nadobúda niektorú z viacerých možných dovolených hodnôt. Symetria, ktorá bola narušená, pritom prevádza (otáča) dovolené hodnoty z jednej na druhú. Napríklad v prípade feromagnetického stavu Heisenbergovho modelu sú (pri danej teplote) prípustné všetky natočenia magnetizácie $\mathbf{m}$ s fixovanou dĺžkou $|\mathbf{m}|$, pričom prechod medzi dvomi dovolenými hodnotami $\mathbf{m}_1$ a $\mathbf{m}_2$ je realizovaný vhodným otočením v spinovom priestore.

V tejto prednáške budeme prípustné hodnoty parametra usporiadania nazývať $\mathbf{m}$, ale budeme mať pritom na mysli nielen prípad trojrozmerného vektora magnetizácie, ale akýkoľvek parameter usporiadania, povedzme fázu supratekutiny θ . Priestor dovolených hodnôt parametra usporiadania označme ako M . Stavom s najnižšou (voľnou) energiou je obvykle stav s priestorovo homogénnym parametrom usporiadania $\mathbf{m}(\mathbf{x}) = \mathbf{m}$, ale v dôsledku pôsobenia externých polí (alebo v procese narušenia symetrie vo fázovom prechode⁶⁴) môžu vzniknúť aj konfigurácie s priestorovo závislým parametrom usporiadania $\mathbf{m}(\mathbf{x})$. Veličinu $\mathbf{m}(\mathbf{x})$ budeme pritom definovať priemerovaním cez objemy ΔV , ktoré sú veľké oproti mriežkovej konstante a zároveň malé voči makroskopickým rozmerom, vďaka čomu môžeme polohu $\mathbf{x}$ považovať za spojitú premennú. Obmedzíme sa pritom na skúmanie takých hladko sa meniacich konfigurácií $\mathbf{m}(\mathbf{x})$, ktoré nemožno odstrániť spojitou deformáciou poľa $\mathbf{m}(\mathbf{x})$. Takéto konfigurácie nazveme (topologicky) stabilnými.

Singulárne konfigurácie

Ukazuje sa, že nekonštantné stabilné konfigurácie poľa $\mathbf{m}(\mathbf{x})$ zakaždým obsahujú singulárne body, čiary alebo plochy, v ktorých sa parameter usporiadania prudko mení. Príkladom konfigurácie so singulárnym bodom sú víry a antivíry skúmané v prednáške 8, singulárnymi čiarami sú napríklad dislokácie v tuhých látkach alebo víry v supravodičoch, kým singulárnymi plochami sú napríklad doménové steny vo feromagnetoch.

⁶⁴Táto alternatíva je zaujímavá aj pre kozmológov. V kontexte fyziky tuhých látok je typickým príkladom polykryštál, ktorého existencia je dôsledkom nukleačného mechanizmu: v rôznych zárodkoch je symetria spontánne narušená rôznym spôsobom. Iným príkladom je prítomnosť termodynamicky nerovnovážnej koncentrácie dislokácií v kryštáloch, ktorá je dôsledkom rýchlejšieho rastu kryštálov v prítomnosti dislokácií.

Pre každú singulárnu konfiguráciu (odteraz budeme hovoriť o defekte) definujeme tzv. obopínajúci priestor P , t.j. vhodne zvolený uzatvorený geometrický útvar maximálnej možnej dimenzie, ktorý vo veľkej vzdialenosti obopína singularitu. Typ obopínajúceho priestoru je určený rozmernosťou defektu a priestorovou rozmernosťou D problému, pozri tabuľku 2.

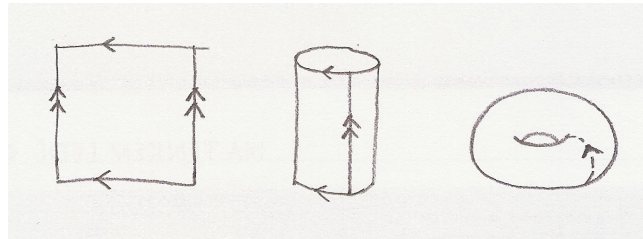
	sing. bod	sing. čiara	sing. plocha
$D = 1$	S_0	-	-
$D = 2$	S_1	S_0	-
$D = 3$	S_2	S_1	S_0

Tabuľka 2: Obopínajúce priestory P pre singulárne konfigurácie problémov s rôznou rozmernosťou: S_0 je dvojica bodov, S_1 je uzavretá čiara - napr. kružnica, S_2 je uzavretá plocha - napr. povrch gule.

Priestor parametrov usporiadania

Budeme predpokladať, že teplota skúmaného systému je ďaleko od kritickej teploty. Očakávame, že v takomto prípade možno zanedbať fluktuácie veľkosti parametra usporiadania $|\mathbf{m}|$ a stačí zohľadniť priestorovú závislosť jeho "natočenia". Priestory prípustných parametrov usporiadania M pre magnetické systémy potom sú: S_0 pre Isingov model, jednorozmerná sféra S_1 pre model XY a dvojrozmerná sféra S_2 pre Heisenbergov model. V supratekutinách a supravodičoch sa v priestore môže meniť fáza, preto podobne ako modeli XY v týchto systémoch $M = S_1$. Vo zvyšku tohto odstavca preskúmame dva fyzikálne systémy s odlišnými priestormi M .

Nematické kvapalné kryštály sú tvorené molekulami v tvare paličiek. Ťažiská paličiek nemajú (podobne ako v obyčajnej kvapaline) fixované polohy, ale natočenie paličiek v priestore má preferenčný smer $\mathbf{n}$. Keďže paličky nemajú hlavu a chvost, smery $\mathbf{n}$ a $-\mathbf{n}$ sú fyzikálne totožné. Priestor M je v takomto prípade tvorený hemisférou P_2 so stotožnenými protiľahlými bodmi.



Obr. 19: Vľavo: fyzikálne rozlíšiteľné dvojrozmerné vektory posunutia kryštálu vytvárajú rovnobežník $\mathbf{u} = x_1\mathbf{a}_1 + x_2\mathbf{a}_2$, kde $0 \leq x_{1,2} \leq 1$, s periodickými okrajovými podmienkami. Hranice s rovnakými počtami šípok treba stotožniť. V strede: po stotožnení vertikálnych hraníc vznikne valec. Vpravo: po stotožnení horizontálnych hraníc vznikne torus T_2 .

Skúmame napokon dvojrozmerný kryštál s elementárnymi vektormi $\mathbf{a}_1$ a $\mathbf{a}_2$. Pripusťme, že v okolí bodu $\mathbf{x}$ je kryštál posunutý voči referenčnému kryštálu o vektor $\mathbf{u}(\mathbf{x})$. Treba si pritom uvedomiť, že posunutie o vektor $\mathbf{u}$ je fyzikálne ekvivalentné posunutiam o $\mathbf{u} + \mathbf{a}_1$ alebo $\mathbf{u} + \mathbf{a}_2$. Teda priestor fyzikálne rozlíšiteľných posunutí $\mathbf{u}$ vytvára dvojrozmerný torus T_2 , pozri obrázok 19.

Homotopia a homotopické triedy

V každom bode $\mathbf{x}$ obopínajúceho priestoru P nadobúda parameter usporiadania hodnotu $\mathbf{m}(\mathbf{x})$ z množiny prípustných hodnôt M , teda každému defektu možno priradiť zobrazenie $P \rightarrow M$. Podľa tabuľky 2 ide o zobrazenia $\mathcal{F} : S_n \rightarrow M$, kde n je 0,1 alebo 2. Prípád $n = 0$ zodpovedá tzv. doménovým stenám (v 1D systémoch sú to body, v 2D čiary a v 3D plochy) a bude diskutovaný osve neskôr.

Spojité deformácie poľa $\mathbf{m}(\mathbf{x})$ vedie na spojitú deformáciu zobrazenia $\mathcal{F}$. V topológii sa takáto deformácia nazýva homotopiou a dve zobrazenia zviazané homotopiou nazývame homotopické. Ak skúmaný defekt má byť stabilný, potom ním definované zobrazenie $\mathcal{F}$ nesmie byť homotopické s identickým zobrazením, ktoré všetkým bodom obopínajúceho priestoru S_n priradí ten istý bod $\mathbf{m}$ z priestoru M . Množinu všetkých zobrazení $\mathcal{F}$ možno zjavne rozdeliť na homotopické triedy, pričom všetky prvky danej triedy sú navzájom homotopické.

Pre $n = 1$ možno zobrazenie $\mathcal{F}$ reprezentovať ako uzavretú orientovanú čiaru v priestore parametrov

usporiadania M . Napríklad pre bodový defekt v dvojrozmernom modeli XY, v ktorom je priestor M totožný s kružnicou S_1 , sú zobrazenia $\mathcal{F}$ reprezentované čiarami obiehajúcimi túto kružnicu. Jednotlivé homotopické triedy teda možno zjavne charakterizovať počtom obehov kružnice, t.j. celým číslom q . V modeli XY toto číslo popisuje prírastok fázy $\oint_P d\mathbf{r} \cdot \nabla\theta = 2\pi q$ pozdĺž dráhy P . Homotopická trieda s $q = 0$ zodpovedá magnetu bez defektov,⁶⁵ triedy s $q = \pm 1$ popisujú víry a antivíry z prednášky 8, kým ostatné defekty zodpovedajú viacnásobne “nabitým” vírom, pozri cvičenia. Keďže nenulové celé číslo q nemožno spojiť vynulovať, topologická stabilita defektov s $q \neq 0$ je zrejmalá.

Homotopické grupy

Nech g_1, g_2 sú homotopické triedy pre zobrazenia typu $S_1 \rightarrow M$. Najprv definujeme násobenie pre triedy nasledovným spôsobom. Nech zobrazenia $\mathcal{F}_1 : S_1 \rightarrow M$ a $\mathcal{F}_2 : S_1 \rightarrow M$ sú dve zobrazenia (orientované čiary v priestore M), ktoré patria do tried g_1, g_2 a prechádzajú cez aspoň jeden spoločný bod.⁶⁶ Skonstruujeme orientovanú čiaru, ktorá najprv obehne čiaru $\mathcal{F}_1$ a potom čiaru $\mathcal{F}_2$. Výsledná čiaru definuje nové zobrazenie $\mathcal{F} : S_1 \rightarrow M$, ktoré patrí do niektorej homotopickej triedy g . Túto triedu nazveme súčinom tried g_1 a g_2 , t.j. $g_2 * g_1 = g$. Fyzikálne možno defekt $\mathcal{F}$ interpretovať ako súčet defektov $\mathcal{F}_1$ a $\mathcal{F}_2$.

Dá sa nahliadnuť, že množina homotopických tried spolu s takto definovanou operáciou násobenia tvorí grupu.⁶⁷ Túto grupu nazývame tzv. prvou homotopickou grupou $\pi_1(M)$. Pojem homotopickej grupy možno rozšíriť aj na zobrazenia $\mathcal{F} : S_2 \rightarrow M$, ktorým priradíme homotopickú grupu $\pi_2(M)$. Ak je homotopická grupa $\pi_n(M)$ triviálna (s jediným prvkom), potom všetky zobrazenia $\mathcal{F} : S_n \rightarrow M$ sú homotopické s identitou a stabilné defekty neexistujú. Ak je však grupa $\pi_n(M)$ netriviálna, potom takéto defekty môžu existovať. V topológii sa napríklad ukazuje, že

$$\begin{aligned}\pi_n(S_n) &= Z, \\ \pi_n(S_m) &= 0, \quad m > n,\end{aligned}\tag{89}$$

kde Z je grupa celých čísel s operáciou sčítania a 0 je triviálna grupa s jediným prvkom.

Víry a vírové čiary

Výsledok $\pi_1(S_1) = Z$ znamená, že defekty $\mathcal{F} : S_1 \rightarrow S_1$ sú stabilné a skladajú sa ako celé čísla. V špeciálnom prípade 2D modelu XY je tento výsledok očividný: nech $\theta_{1,2}(\mathbf{r})$ sú konfigurácie spinov v (izolovaných) víroch 1 a 2 s nábojmi $q_{1,2}$. Potom $\theta(\mathbf{r}) = \theta_1(\mathbf{r}) + \theta_2(\mathbf{r})$ je konfigurácia spinov pre dvojicu vírov a platí $\oint_P d\mathbf{r} \cdot \nabla\theta = \oint_P d\mathbf{r} \cdot \nabla\theta_1 + \oint_P d\mathbf{r} \cdot \nabla\theta_2$, teda náboj dvojice vírov je $q = q_1 + q_2$.

Homotopická grupa $\pi_1(S_1) = Z$ sa okrem bodových defektov 2D modelu XY realizuje aj v čiarových defektoch trojrozmerných systémov s priestorom parametrov usporiadania $M = S_1$, t.j. napríklad v supratekutinách a supravodičoch, v ktorých sú tzv. vírové čiary stabilné. Keďže platí $\pi_2(S_1) = 0$, v trojrozmerných systémoch s $M = S_1$ však neexistujú stabilné bodové defekty.

Únik do tretieho rozmeru

Podľa (89) pre $m > n$ platí $\pi_n(S_m) = 0$, a preto v tomto prípade neexistujú stabilné defekty s obopínajúcim priestorom $P = S_n$ a priestorom dovolených hodnôt $M = S_m$. Podľa tohto výsledku napríklad v 2D Heisenbergovom modeli (na rozdiel od modelu XY) neexistujú stabilné bodové defekty (víry), pretože v tomto prípade platí $M = S_2$, $P = S_1$ a $\pi_1(S_2) = 0$. Tento výsledok možno interpretovať veľmi jednoducho: víry v 2D Heisenbergovom modeli sú nestabilné, pretože napr. spiny na obrázku 3 sa môžu spojiť natočiť do konfigurácie, v ktorej sú všetky spiny kolmé na rovinu obrázka - ide o tzv. “únik do 3. rozmeru”. Alternatívne možno tento výsledok vysvetliť tak, že uzavretú čiaru na sfére S_2 možno spojiť stiahnuť do bodu (t.j. do triviálnej konfigurácie).

Ježko

V trojrozmernom Heisenbergovom modeli s $M = S_2$ vďaka výsledku $\pi_2(S_2) = Z$ existujú stabilné

⁶⁵Treba si pritom uvedomiť, že v triede $q = 0$ nie je iba triviálna konštantná konfigurácia spinov, ale aj všetky nekonštantné konfigurácie, ktoré možno dostať jej hladkými deformáciami. Klasifikácia možných defektov si teda vyžaduje klasifikáciu možných homotopických tried.

⁶⁶Ak by taký bod neexistoval, potom jedno zo zobrazení spojiť deformujeme tak, aby táto podmienka bola splnená.

⁶⁷Napríklad inverzný prvok k $\mathcal{F}$ dostaneme obehnutím čiaru pre $\mathcal{F}$ v opačnom zmysle.

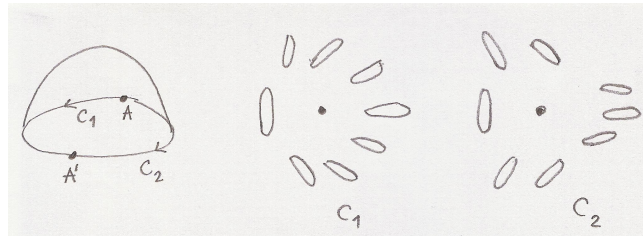
bodové defekty. Najjednoduchšia konfigurácia s nábojom $q = 1$ má tvar $\mathbf{m}(\mathbf{x}) = m\hat{\mathbf{x}}$, kde $m = |\mathbf{m}|$ a $\hat{\mathbf{x}}$ je jednotkový vektor v smere $\mathbf{x}$. Tento defekt sa nazýva jež a jeho stabilita sa interpretuje tým, že “jež sa nedá učesať”. Bohužiaľ, v prírode sa nevyskytuje, pretože jeho energia je úmerná lineárnemu rozmeru systému, pozri cvičenia.

Disklinácie

Keďže parameter usporiadania v nematických kvapalných kryštáloch (neorientovaný smer) je podobný parametru usporiadania pre Heisenbergov model, mohlo by sa zdať, že v 3D nematikách nie sú možné stabilné čiarové singularity. Nie je to však pravda, pretože platí

$$\pi_1(P_2) = Z_2,$$

kde Z_2 je cyklická grupa s dvomi prvkami: identitou e a prvkom g , pričom platí $g * g = e$. V nematikách teda okrem triviálnej konfigurácie existujú čiarové defekty, tzv. disklinácie (pozri obrázok 20). Existuje však len jeden typ defektov: všetky disklinácie možno spojito transformovať jednu na druhú, ako vidno v ľavej časti obrázka. Na rozdiel od vírov, zloženie dvoch disklinácií však nedá dvojnásobne nabitú disklináciu, ale triviálnu konfiguráciu, pozri cvičenia.



Obr. 20: Vľavo: priestor parametrov usporiadania P_2 pre nematický kvapalný kryštál. V strede: konfigurácia molekúl v disklinácii v rovine kolmej na os víru (bodka v strede obrázku). Na ľavom obrázku je táto disklinácia popísaná uzavretou orientovanou čiarou C_1 , ktorá spája bod A so s ním totožným bodom A' . Stabilita disklinácie vyplýva z pozorovania, že túto čiaru nemožno spojito stiahnuť do bodu. Vpravo: to isté ako v strede, ale pre disklináciu popísanú čiarou C_2 z A do A' .

Dislokácie

Dislokácie sú čiarové defekty 3D kryštálov podobné vírovým čiaram a disklináciám. Ide o štruktúrne defekty, preto priestorom parametrov usporiadania je priestor fyzikálne rozlíšiteľných hodnôt vektora posunutia $\mathbf{u}$. V 2D kryštáloch, kde $M = T_2$, sa dislokácie redukujú na bodové defekty. Z matematiky vieme, že

$$\pi_1(T_2) = Z \times Z,$$

kde Z je grupa celých čísel s operáciou sčítania. Teda 2D dislokácie sú charakterizované dvomi celými číslami q_1 a q_2 . Tento výsledok má jednoduchú interpretáciu: navinutie uzavretej čiary $\mathcal{F} : S_1 \rightarrow T_2$ na torus treba popísať počtom navinutí q_1 pozdĺž prvého (dlhého) švu v obrázku 19, ale aj počtom navinutí q_2 pozdĺž druhého (krátkeho) švu.

Podľa štandardnej teórie možno dislokácie charakterizovať tzv. Burgersovým vektorom $\mathbf{b}$, definovaným ako súčet prírastkov posunutia $d\mathbf{u}$ kryštálu pozdĺž uzavretej krivky C obopínajúcej dislokačnú čiaru, $\mathbf{b} = \oint_C d\mathbf{u}$. Ale Burgersov vektor $\mathbf{b}$ musí byť mriežkovým posunutím, preto v dvojrozmernom kryštáli dostaneme $\mathbf{b} = q_1\mathbf{a}_1 + q_2\mathbf{a}_2$, v súlade s topologickou argumentáciou.

Doménové steny

Striktne vzaté, prípad s obopínajúcim priestorom $P = S_0$ nie je topologickým defektom, ale doménovou “stenou” s rozmerom $D - 1$. Oblasti na opačných stranách steny navzájom komunikujú iba cez stenu, preto v prípade so spojitým priestorom M možno doménovú stenu spojito odstrániť, pozri cvičenia. Doménové steny sú preto stabilné iba v systémoch s diskretným priestorom M : napríklad pre magnety s konečným počtom osí ľahkej magnetizácie (napr. Isingov model).

Fyzikálna stabilita defektov

Striktne hovoriac, topologická a fyzikálna stabilita defektu nie sú totožné pojmy. Fyzikálne možno defekt odstrániť dvomi spôsobmi: (i) vytlačiť ho von zo systému, (ii) alebo ho “rozobrať”. Možnosť

(i) sa bez aplikácie vonkajších síl deje difúziou a v nekonečnom systéme trvá nekonečne dlho. Možnosť (ii) znamená nutnosť prekonať energetickú bariéru a preskúmame ju pre 2D víry v XY modeli. Predstavme si povedzme, že vír na obrázku 3 rozrežeme pozdĺž zápornej osi x a zafixujeme orientáciu spinov tesne pod rezom. Potom budeme žiadať, aby sa spiny pri obchádzaní kružníc so stredom v jadre víru postupne otáčali o čoraz menší uhol. Tým sa postupne znižuje hodnota $(\nabla \mathbf{m})^2$, ale za cenu skoku natočenia spinov naprieč cez rez. Tento skok stojí energiu úmernú lineárnemu rozmeru systému, čo je omnoho viac ako energia pôvodného víru - teda vír je stabilný, pozri cvičenia.

Fyzikálne dôsledky topologických defektov

Prítomnosť topologických defektov znižuje zovšeobecnenú tuhosť systému so spontánne narušenou symetriou. Napríklad v prednáške o Kosterlitzovom-Thoulessovom prechode sme explicitne ukázali, že aplikácia gradientu fázy vytláča víry von zo vzorky, čo vedie k zníženiu aplikovaného rozdielu fáz naprieč vzorkou.

V supravodičoch tiež dochádza k silovému pôsobeniu transportného prúdu na vírové čiary. Pohybujúce sa vírové čiary však spôsobujú ohmické straty, t.j. zánik bezdisipatívneho transportu náboja. Podobne aplikácia šmykového napätia spôsobuje pohyb dislokácií a následne plastickú deformáciu, t.j. stratu tvarovej pamäti tuhej látky.

Strate zovšeobecnenej tuhosti a s ňou asociovaného bezstratového transportu možno predísť zamedením pohybu topologických defektov. Často používaným spôsobom, ako dosiahnuť tzv. kotvenie týchto defektov, je zavedenie nepohyblivých bodových defektov do systému.

Cvičenia

1. Načrtnite singulárne konfigurácie spinov v 2D modeli XY pre $q = \pm 2$.
2. Ukážte, že v 3D Heisenbergovom modeli je energia ježa, t.j. konfigurácie $\mathbf{m}(\mathbf{x}) = m\hat{\mathbf{x}}$, kde $m = |\mathbf{m}|$ a $\hat{\mathbf{x}}$ je jednotkový vektor v smere $\mathbf{x}$, úmerná lineárnemu rozmeru systému.
3. Ukážte, že disklinácie C_1 a C_2 na obrázku 20 možno spojito deformovať jednu na druhú. Ďalej ukážte, že zložením dvoch disklinácií dostaneme triviálnu konfiguráciu.
4. Prečo musí byť Burgersov vektor $\mathbf{b}$ mriežkovým vektorom? Návod: použite Volterrovu konštrukciu.
5. Odhadnite hrúbku doménovej steny L v magnetoch. Návod: nech x je súradnica naprieč stenou a $\theta(x)$ nech je natočenie parametra usporiadania v rovine yz . Plošná hustota energie doménovej steny nech je

$$\sigma = \int dx [A(d\theta/dx)^2 + K \sin^2 \theta].$$

(Aký je fyzikálny význam parametrov A a K ?) Predpokladajte, že $\theta(-L/2) = 0$, $\theta(L/2) = \pi$ a že $\theta(x)$ je lineárnou interpoláciou medzi týmito bodmi. Minimalizáciou $\sigma(L)$ nájdite optimálnu hodnotu L .

6. Odhadnite energiu "víru s rezom" v 2D modeli XY, v ktorom sa spiny skrútia pri obehnutí okolo jadra o uhol $\alpha < 2\pi$.

21 Topologické izolanty

Tradičná klasifikácia látok z hľadiska elektrických vlastností rozoznávala kovy, polovodiče a izolanty. Táto klasifikácia vychádzala z obsadenia energetických hladín elektrónov vo vnútri materiálov. V tejto prednáške ukážeme, že takáto klasifikácia je neúplná, pretože neprihliada na topologické vlastnosti fáz. Pre jednoduchosť sa pritom obmedzíme na javy, ktoré možno popísať v rámci jednočasticovej teórie.

Chernove izolanty

Objav kvantového Hallovoho javu v roku 1980 ukázal, že v silných magnetických poliach môžu byť materiály hlboko vo svojom vnútri nevodivé, ale zároveň na ich povrchu môžu existovať dokonale vodivé stavy. Dnes chápeme kvantový Hallov jav ako špeciálny (a historicky prvý) príklad tzv. Chernových izolantov - čiže istých špeciálnych dvojrozmerných materiálov, v ktorých absentuje symetria vzhľadom na otočenie času. V ďalšom výklade explicitne ukážeme, že kvantovanie Hallovej vodivosti v Chernových izolantoch má topologický pôvod.

Pásová štruktúra vo formalizme LCAO

Skúmame pásovú štruktúru kryštálu v jedoelektrónovom priblížení. Za básové stavy pritom vezmeme ortogonalizované atomárne stavy $|\mathbf{R}, j\rangle$, ktoré vznikli z pôvodných atomárnych stavov j v bunke $\mathbf{R}$

kryštálu. O spinovom stupni voľnosti pre jednoduchosť neuvažujme. Predpokladajme, že báza stavov $|\mathbf{R}, j\rangle$ je ortonormálna. Hamiltonián pre elektrón v kryštáli možno v tejto báze písať v tvare

$$H = - \sum_{ij} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} t_{ij}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') c_{\mathbf{R}i}^\dagger c_{\mathbf{R}'j},$$

kde $t_{ij}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ je amplitúda preskoku zo stavu $|\mathbf{R}', j\rangle$ do stavu $|\mathbf{R}, i\rangle$ a sčítujeme cez všetky usporiadané dvojice stavov v kryštáli. Z hermitovskosti H pritom vyplýva, že $t_{ij}(\mathbf{R}) = t_{ji}^*(-\mathbf{R})$.

Podľa Blochovej vety jednočasticové vlastné stavy elektrónov v kryštáloch parametricky závisia od vlnového vektora $\mathbf{k}$. Metódou LCAO možno tieto stavy hľadať ako lineárne superpozície stavov⁶⁸ $|\mathbf{k}, j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} |\mathbf{R}, j\rangle$, ktorých kreačné operátory sú $c_{\mathbf{k},j}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} c_{\mathbf{R},j}^\dagger$. Hamiltonián pre elektrón v kryštáli $H = \sum_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k})$ sa potom dá vyjadriť ako súčet od $\mathbf{k}$ závislých hamiltoniánov

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{ij} H_{ij}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},i}^\dagger c_{\mathbf{k},j}$$

s maticovými elementmi $H_{ij}(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{R}} t_{ij}(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}$, pre ktoré platí $H_{ji}^*(\mathbf{k}) = H_{ij}(\mathbf{k})$. Nech $|n(\mathbf{k})\rangle$ sú normalizované od $\mathbf{k}$ závislé vlastné stavy hamiltoniánu $H(\mathbf{k})$ z pásu n , t.j. nech $|n(\mathbf{k})\rangle$ sú riešeniami Schrödingerovej rovnice $H(\mathbf{k})|n(\mathbf{k})\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{k})|n(\mathbf{k})\rangle$. Dá sa ukázať (pozri cvičenia), že operátor rýchlosti elektrónu $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ v podpriestore s fixovaným vlnovým vektorom má tvar $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{k}}$. Pre rýchlosť elektrónu vo vlastnom stave $|n(\mathbf{k})\rangle$ potom podľa Feynmanovej-Hellmannovej vety dostávame výsledok $\langle n(\mathbf{k}) | \mathbf{v}_{\mathbf{k}} | n(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \langle n(\mathbf{k}) | H(\mathbf{k}) | n(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$, v zhode s kváziklasickým výrazom pre grupovú rýchlosť.

Chernovo číslo

Skúmame dvojrozmerný kryštál so štvorcovou Bravaisovou mriežkou a mriežkovou konštantou a . V takom prípade ležia vektory $\mathbf{k}$ v Brillouinovej zóne $\mathbf{k} \in \langle -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \rangle \times \langle -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \rangle$, ktorá je vďaka periodičnosti hamiltoniánu $H(\mathbf{k})$ ekvivalentná s dvojrozmerným torusom T_2 . Počítajme zmenu fázy $\Delta\varphi$ stavu $|n(\mathbf{k})\rangle$ pri infinitezimálnej zmene $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}$:

$$e^{i\Delta\varphi} = \frac{\langle n(\mathbf{k}) | n(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}) \rangle}{|\langle n(\mathbf{k}) | n(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}) \rangle|}. \quad (90)$$

Taylorovým rozvojom do 1. rádu podľa $\Delta\mathbf{k}$ dostaneme $|n(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k})\rangle = |n(\mathbf{k})\rangle + \Delta\mathbf{k} \cdot |\nabla_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k})\rangle$. Ak využijeme, že stavy $|n(\mathbf{k})\rangle$ sú normované, ľahko nahliadneme, že maticový element $\langle n(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) \rangle$ je rýdzo imaginárny (pozri cvičenia). Preto do 1. rádu podľa $\Delta\mathbf{k}$ platí $|\langle n(\mathbf{k}) | n(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}) \rangle| = 1$, odkiaľ vyplýva $\Delta\varphi = \Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})$, kde sme zaviedli tzv. Berryho konexiu

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) = -i \langle n(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) \rangle = \text{Im} [\langle n(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) \rangle]. \quad (91)$$

Rozdiel fáz $\Delta\varphi$ samozrejme závisí od voľby fáz vlnových funkcií $|n(\mathbf{k})\rangle$: pri kalibračnej transformácii $|n(\mathbf{k})\rangle \rightarrow e^{i\theta(\mathbf{k})} |n(\mathbf{k})\rangle$ sa $\Delta\varphi$ zmení na $\Delta\varphi + \theta(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}) - \theta(\mathbf{k})$. Pomocou veličiny $\Delta\varphi$ ďalej definujeme tzv. Berryho fáz $\gamma = \sum_C \Delta\varphi$ ako zmenu fázy pri prenose pozdĺž uzavretej čiary C v $\mathbf{k}$ -priestore. Ľahko nahliadneme, že táto veličina už od voľby fáz nezávisí (pozri cvičenia) a dostaneme pre ňu výsledok

$$\gamma = \oint_C d\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}). \quad (92)$$

Z jednoznačnosti vlnovej funkcie pritom vyplýva, že $\gamma = 2\pi\nu$, kde ν je celé číslo. Nenulové hodnoty parametra ν sú pritom možné iba v prípade, keď sa vnútri oblasti ohraničenej čiarou C nachádzajú singulárne konfigurácie poľa $\mathbf{A}(\mathbf{k})$, ktoré obsahujú víry.

Ak za krivku C vezmeme hranicu Brillouinovej zóny ∂BZ , potom integrálnu charakteristiku ν študovaného pásu nazývame Chernovým číslom. Chernovo číslo budeme počítat z rovnice (92) pomocou Stokesovej vety

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} d^2k \left[\frac{\partial A_y}{\partial k_x} - \frac{\partial A_x}{\partial k_y} \right] = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} d^2k \mathcal{B}(\mathbf{k}), \quad (93)$$

⁶⁸Takýmto spôsobom sme napríklad v prednáške II.2 skúmali pásovú štruktúru kremíka.

kde integrujeme cez celú Brillouinovu zónu. Zaviedli sme pritom tzv. Berryho krivosť $\mathcal{B}(\mathbf{k})$, pričom

$$\mathcal{B}(\mathbf{k}) = -i \left[\left\langle \frac{\partial n}{\partial k_x} \middle| \frac{\partial n}{\partial k_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial n}{\partial k_y} \middle| \frac{\partial n}{\partial k_x} \right\rangle \right].$$

Berryho krivosť má nenulovú hodnotu iba v jadrách vírov Berryho konexie.

Dvojrozmerné izolanty s nenulovou hodnotou ν v niektorom z pásov nazývame Chernove izolanty. Dá sa ukázať, že prípad $\nu \neq 0$ nemôže nastať v systémoch, ktoré sú symetrické pri otočení času.

Hallova vodivosť

Pomocou poruchovej teórie teraz vypočítame príspevok plne obsadeného pásu dvojrozmerného materiálu k Hallovej (pričnej) vodivosti σ_H a ukážeme prekvapivý výsledok, že σ_H nemusí byť nulové.

Predpokladajme, že v systéme existuje elektrické pole E v smere osi y a počítajme prúdovú hustotu j_x v smere osi x . Elektrické pole pôsobí na elektróny poruchovým potenciálom $V = eEy$, v prítomnosti ktorého sa vlnové funkcie $|n(\mathbf{k})\rangle$ do 1. rádu zmenia na

$$|\widetilde{n(\mathbf{k})}\rangle = |n(\mathbf{k})\rangle + \sum_{m\mathbf{K}} \frac{\langle m(\mathbf{K}) | eEy | n(\mathbf{k}) \rangle}{\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_m(\mathbf{K})} |m(\mathbf{K})\rangle,$$

kde čiarka nad sumou vylučuje príspevok $m\mathbf{K} = n\mathbf{k}$. Nech skúmaný systém má rozmery $L \times L$. Potom (jednoelektrónové) operátory prúdu a prúdovej hustoty v smere osi x sú $I_x = -ev_x/L$ a $j_x = -ev_x/L^2$. Príspevok plne obsadeného pásu k prúdovej hustote v priečnom elektrickom poli preto je

$$\langle j_x \rangle = -\frac{e}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} \langle \widetilde{n(\mathbf{k})} | v_x | \widetilde{n(\mathbf{k})} \rangle.$$

Ak teraz využijeme explicitný tvar vlnových funkcií $|\widetilde{n(\mathbf{k})}\rangle$ a uvažíme, že pre $E = 0$ v systéme prúd netečie, dostaneme výsledok $\langle j_x \rangle = \sigma_H E$, kde pre Hallovu vodivosť σ_H platí

$$\sigma_H = -\frac{e^2}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m\mathbf{K}} \left[\frac{\langle n(\mathbf{k}) | v_x | m(\mathbf{K}) \rangle \langle m(\mathbf{K}) | y | n(\mathbf{k}) \rangle}{\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_m(\mathbf{K})} + \frac{\langle n(\mathbf{k}) | y | m(\mathbf{K}) \rangle \langle m(\mathbf{K}) | v_x | n(\mathbf{k}) \rangle}{\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_m(\mathbf{K})} \right].$$

V ďalšom výklade ukážeme, že Hallova vodivosť σ_H je úmerná Chernovmu číslu ν skúmaného pásu. V prvom kroku si uvedomíme, že pre operátor rýchlosti platí $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{x}, H]$, preto

$$\langle n(\mathbf{k}) | \mathbf{v} | m(\mathbf{K}) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle n(\mathbf{k}) | \mathbf{x} | m(\mathbf{K}) \rangle [\varepsilon_m(\mathbf{K}) - \varepsilon_n(\mathbf{k})],$$

kde sme využili, že stavy $|m(\mathbf{K})\rangle$ a $|n(\mathbf{k})\rangle$ sú vlastné stavy hamiltoniánu H . Ak pomocou tejto identity vylúčime maticové elementy operátora súradnice z výrazu pre σ_H , dostaneme výsledok

$$\sigma_H = -\frac{i\hbar e^2}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m\mathbf{K}} \frac{\langle n(\mathbf{k}) | v_x | m(\mathbf{K}) \rangle \langle m(\mathbf{K}) | v_y | n(\mathbf{k}) \rangle - \langle n(\mathbf{k}) | v_y | m(\mathbf{K}) \rangle \langle m(\mathbf{K}) | v_x | n(\mathbf{k}) \rangle}{[\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_m(\mathbf{K})]^2}.$$

Ak ďalej použijeme identity⁶⁹

$$\begin{aligned} \langle m(\mathbf{K}) | \mathbf{v}_{\mathbf{K}} | n(\mathbf{k}) \rangle &= \frac{1}{\hbar} [\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_m(\mathbf{K})] \langle m(\mathbf{K}) | \nabla_{\mathbf{K}} n(\mathbf{k}) \rangle, \\ \langle n(\mathbf{k}) | \mathbf{v}_{\mathbf{K}} | m(\mathbf{K}) \rangle &= \frac{1}{\hbar} [\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_m(\mathbf{K})] \langle \nabla_{\mathbf{K}} n(\mathbf{k}) | m(\mathbf{K}) \rangle, \end{aligned}$$

výraz pre priečnu vodivosť môžeme prepísať do tvaru

$$\sigma_H = -\frac{ie^2}{\hbar} \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m\mathbf{K}} \left[\left\langle \frac{\partial n}{\partial k_x} \middle| m(\mathbf{K}) \right\rangle \left\langle m(\mathbf{K}) \middle| \frac{\partial n}{\partial k_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial n}{\partial k_y} \middle| m(\mathbf{K}) \right\rangle \left\langle m(\mathbf{K}) \middle| \frac{\partial n}{\partial k_x} \right\rangle \right].$$

⁶⁹Vychádzajme z rovnice $H(\mathbf{k})|n(\mathbf{k})\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{k})|n(\mathbf{k})\rangle$ a zľava na ňu aplikujme operátor $\frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{K}}$. Výsledkom tejto operácie je $\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{K}}|n(\mathbf{k})\rangle + \frac{1}{\hbar}H|\nabla_{\mathbf{K}}n(\mathbf{k})\rangle = \mathbf{v}_{\mathbf{K}}(\mathbf{k})|n(\mathbf{k})\rangle + \frac{1}{\hbar}\varepsilon_n(\mathbf{k})|\nabla_{\mathbf{K}}n(\mathbf{k})\rangle$. Použili sme pritom, že $\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{K}} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{K}}H(\mathbf{k})$ je operátor rýchlosti (pozri cvičenia) a $\mathbf{v}_{\mathbf{K}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{K}}\varepsilon_n(\mathbf{k})$ je rýchlosť elektrónu v stave $|n(\mathbf{k})\rangle$. Ak si uvedomíme, že $|m(\mathbf{K})\rangle$ je vlastným stavom operátora H , násobením zľava výrazom $\langle m(\mathbf{K}) |$ odtiaľto dostaneme prvú identitu. Druhá identita vyplýva z prvej identity a z pozorovania, že operátor $\mathbf{v}_{\mathbf{K}}$ je hermitovský, keďže aj hamiltonián $H(\mathbf{k})$ je hermitovský.

Teraz si všimnime, že sumu cez $m\mathbf{K}$ možno doplniť o stav $|m(\mathbf{K})\rangle = |n(\mathbf{k})\rangle$, ktorý k sume aj tak neprispieva, keďže maticový element $\langle n(\mathbf{k})|\nabla_{\mathbf{k}}n(\mathbf{k})\rangle$ je rýdzo imaginárny a členy v hranatej zátvorke sa navzájom vyrušia. Ak ďalej využijeme úplnosť stavov $m\mathbf{K}$ a prejdeme od sumácie cez $\mathbf{k}$ k integrácii, dostaneme napokon

$$\sigma_H = \frac{e^2}{h} \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{B}(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{2\pi h} \int_{BZ} d^2k \mathcal{B}(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{h} \nu,$$

kde ν je Chernovo číslo (93) študovaného pásu. To však znamená, že priečna vodivosť Chernovho izolantu s plnými pásmi je nenulová, pričom jej veľkosť je celočíselným násobkom fundamentálnej vodivosti e^2/h , presne ako pri kvantovom Hallovom jave!

Výpočet, ktorý sme prezentovali, predpokladá, že študovaná dvojrozmerná vzorka nemá povrch, t.j. je zvinutá do torusu. Dá sa však ukázať, že aj vo fyzikálne relevantnejšom prípade konečnej vzorky s povrchmi je priečna vodivosť kvantovaná. V takom prípade tento výsledok možno vysvetliť, presne ako pri kvantovom Hallovom jave, prítomnosťou dokonale vodivých stavov v blízkosti rozhraní medzi Chernovými izolantmi s rôznym ν . Špeciálnym prípadom takýchto rozhraní je rozhranie medzi Chernovým izolantom a vákuom (ktoré je triviálnym izolantom s $\nu = 0$).

Príklad: jednoduchý dvojpásový model

Skúmame dvojpásový model pre elektróny na štvorcovej mriežke, pričom v každom bode $\mathbf{R}$ sa nachádza dvojica atomárnych orbitálov $\psi_{\mathbf{R}}^T = (\phi_{\mathbf{R}}, \chi_{\mathbf{R}})$. Hamiltonián modelu nech má tvar

$$H\psi_{\mathbf{R}} = m_{\mathbf{R}}\mathcal{T}_3\psi_{\mathbf{R}} + \mathcal{T}_x\psi_{\mathbf{R}+x} + \mathcal{T}_x^\dagger\psi_{\mathbf{R}-x} + \mathcal{T}_y\psi_{\mathbf{R}+y} + \mathcal{T}_y^\dagger\psi_{\mathbf{R}-y}, \quad (94)$$

kde sme zaviedli označenie

$$\mathcal{T}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{T}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{T}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

V jednoduchom translačne invariantnom prípade s $m_{\mathbf{R}} = m$ sú riešením Schrödingerovej rovnice (SchR) $H\psi_{\mathbf{R}} = \varepsilon\psi_{\mathbf{R}}$ rovinné vlny $\psi_{\mathbf{R}}^T = (\phi, \chi)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$ s vlnovým vektorom $\mathbf{k}$ a SchR nadobudne tvar

$$H(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \varepsilon(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix},$$

kde od $\mathbf{k}$ závislý hamiltonián má tvar $H(\mathbf{k}) = \mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$, pričom $\boldsymbol{\sigma}^T = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ sú Pauliho matice a $\mathbf{h}(\mathbf{k})^T = (\sin k_x, \sin k_y, m + \cos k_x + \cos k_y)$. Vlastné energie problému potom sú $\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm|\mathbf{h}(\mathbf{k})|$ a parametricky závisia od hodnoty parametra m . Ľahko nahliadneme (pozri cvičenia), že medzi pásmi zakaždým existuje konečná energetická medzera, okrem prípadov $m = -2$, $m = 0$ a $m = 2$, kedy medzera v spektre neexistuje. Explicitný výpočet ukazuje (pozri cvičenia), že pre $-2 < m < 0$ nadobúda Chernovo číslo dolného pásu hodnotu $\nu = 1$ a pre $0 < m < 2$ je $\nu = -1$, kým pre ostatné hodnoty m platí $\nu = 0$. K zmene Chernovho čísla teda prichádza pri tých hodnotách parametra m , pri ktorých sa energetická medzera zatvára.

Povrchové stavy

Skúmame ďalej ten istý model (94), ale s pomaly a monotónne sa meniacim parametrom $m_{\mathbf{R}}$, ktorý závisí od súradnice x . Predpokladajme pritom, že pre $x \rightarrow -\infty$ platí $m_{\mathbf{R}} < -2$, čo zodpovedá Chernovmu číslu $\nu = 0$. Podobne pre $x \rightarrow +\infty$ nech $-2 < m_{\mathbf{R}} < 0$, čo zodpovedá Chernovmu číslu $\nu = 1$. Keďže zmena Chernovho čísla ν je možná, len ak medzera v spektre neexistuje, v okolí $m_{\mathbf{R}} \approx -2$, t.j. na rozhraní oblastí s rôznymi Chernovými číslami, očakávame existenciu povrchových stavov s energiou ≈ 0 . Dá sa nahliadnuť, že tieto stavy sú chirálne, t.j. bežiacie iba jedným smerom, podobne ako hranové stavy pri kvantovom Hallovom jave. Tieto stavy prispievajú k Hallovej vodivosti a sú dokonale vodivé.

Topologické izolanty

Z hľadiska pásovej teórie sú Chernove izolanty obyčajné izolanty, avšak topológia ich pásovej štruktúry (konečné Chernovo číslo ν) zabezpečuje, že na rozhraniach medzi Chernovými izolantmi a topologicky triviálnymi materiálmi (napr. vákuom) existujú dokonale vodivé povrchové stavy. Kvalitatívne podobné

správanie - t.j. konečná energetická medzera v spektre vnútri materiálu a excitácie s nulovou excitačnou energiou v blízkosti povrchov - sa realizuje v celej triede nových materiálov, tzv. topologických izolantov. Ich názov zohľadňuje, že podobne ako pri Chernových izolantoch, má toto výnimočné správanie topologický pôvod.

Cvičenia

1.* Ukážte, že $\mathbf{v}_\mathbf{k} = \frac{1}{\hbar} \nabla_\mathbf{k} H(\mathbf{k})$ je operátor rýchlosti v podpriestore stavov typu LCAO s vlnovým vektorom $\mathbf{k}$. Návod: Najprv ukážte, že $\frac{\partial}{\partial t} (c_{\mathbf{R}i}^\dagger c_{\mathbf{R}i}) = \frac{1}{i\hbar} [c_{\mathbf{R}i}^\dagger c_{\mathbf{R}i}, H] = \sum_{\mathbf{R}'j} j_{\mathbf{R}i, \mathbf{R}'j}$. Preto operátor

$$j_{\mathbf{R}i, \mathbf{R}'j} = \frac{i}{\hbar} \left[t_{ij} (\mathbf{R} - \mathbf{R}') c_{\mathbf{R}i}^\dagger c_{\mathbf{R}'j} - t_{ij}^* (\mathbf{R} - \mathbf{R}') c_{\mathbf{R}'j}^\dagger c_{\mathbf{R}i} \right]$$

možno interpretovať ako pravdepodobnosť preskoku z orbitálu $\mathbf{R}'j$ do orbitálu $\mathbf{R}i$ za jednotku času. Operátor rýchlosti definujte vzťahom $\mathbf{v} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{R}i, \mathbf{R}'j} j_{\mathbf{R}i, \mathbf{R}'j} (\mathbf{R} - \mathbf{R}')$, pretože preskoky medzi orbitálmi $\mathbf{R}'j$ a $\mathbf{R}i$ majú dĺžku $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$; faktor 2 v menovateli zohľadňuje skutočnosť, že každá dvojica orbitálov je započítaná dvakrát. Prechodom do $\mathbf{k}$ -priestoru napokon ukážte, že platí $\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \nabla_\mathbf{k} H(\mathbf{k})$, č.b.t.d.

2. Nech $|n(\mathbf{k})\rangle$ sú normalizované stavy závislé od parametra $\mathbf{k}$. Ukážte, že maticový element $\langle n(\mathbf{k}) | \nabla_\mathbf{k} n(\mathbf{k}) \rangle$ je rýdzo imaginárny.

3. Ukážte, že Berryho fáza definovaná vzťahom (92) nezávisí od voľby kalibrácie.

4. Skúmajte model (94) v homogénnom prípade $m_\mathbf{R} = m$.

a) Ukážte, že spektrum neobsahuje energetickú medzeru, iba ak $m = -2$, $m = 0$ a $m = 2$.

b)* Nájdite tvar Berryho konexie pre dolný pás a vypočítajte Chernovo číslo ako funkciu m .

22 Záver

V tomto kurze sme vyložili základné myšlienky tzv. Landauovej-Andersonovej paradigmy. V poslednej prednáške najprv stručne zrekapitulujeme kľúčové body tejto paradigmy a na záver sa zmienime o niektorých nových javoch, ktoré idú nad jej rámec.

Paradigma Landaua-Andersona

Z mikroskopického hľadiska si látku za bežných laboratórnych podmienok možno predstaviť ako obrovský súbor jadier a elektrónov. Ak hmotnosti jadier a elektrónov označíme m_i a ich náboje q_i , a ak zohľadníme iba elektrostatické interakcie medzi časticami, potom hamiltonián látky H má tvar

$$H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}. \quad (95)$$

Verí sa, že model (95) predstavuje “veľkú zjednotenú teóriu” fyziky tuhých látok: všetky pozorované javy by malo byť možné vysvetliť v rámci tohto modelu.⁷⁰ Ich fenomenológia je pritom veľmi bohatá. Pozorované bolo množstvo rôznych fáz, ktoré sa navzájom líšia fyzikálnymi vlastnosťami, napríklad mechanickými, elektrickými, alebo magnetickými. Ústrednou otázkou fyziky tuhých látok je, ako vzniká táto komplexná fenomenológia. Na túto otázku dáva odpoveď teória, ktorú načrtol Landau a zavšil Anderson.

Efektívne hamiltoniány a renormalizačná grupa

Z hľadiska termodynamiky sa jednotlivé fázy líšia správaním v dlhovoľnej a nízkoenergetickej limite. Vlastnosti v tejto limite popisujú efektívne hamiltoniány, ktoré vznikajú postupným eliminovaním krátkovoľných a vysokenergetických stupňov voľnosti. Všeobecná procedúra, ktorou možno takéto odstránenie dosiahnuť, sa nazýva renormalizačná grupa. Relevantné stupne voľnosti pritom môžu závisieť od energetickej škály: napríklad Hubbardov model je efektívnym modelom pre jeden pás elektrónov so spinom $\frac{1}{2}$ a nábojom $-e$. V limite silných interakcií pri polovičnom zaplnení pásu je jeho nízkoenergetickým efektívnym modelom antiferomagnetický Heisenbergov model pre častice so spinom $\frac{1}{2}$ a

⁷⁰V mnohoelektrónových atómoch, v ktorých je rýchlosť elektrónov porovnateľná s rýchlosťou svetla, však treba zohľadniť relativistické korekcie. Podobne pri opise optických javov je potrebné zahrnúť väzbu elektrónov s priečnym elektromagnetickým poľom a pri štúdiu magnetizmu hrajú rolu aj interakcie spinov s magnetickým poľom a/alebo s orbitálnym pohybom.

nábojom 0, ktorého nízkoenergetickou limitou je zas model spinových vln, t.j. nenabitých bozónov.

Klasifikácia fáz

V rámci paradigmy Landaua-Andersona sa jednotlivé fázy odlišujú symetriami, ktoré môžu byť nižšie, než symetrie pohybových zákonov. V takom prípade hovoríme o spontánnom narušení symetrie, ktoré možno kvantifikovať lokálnymi parametrami usporiadania, t.j. veličinami, ktoré možno určiť meraniami v konečnom okolí študovaného bodu. Parametre usporiadania sa správajú ako klasické (nekvantové) polia.

Fyzikálne vlastnosti fáz

V stave s najnižšou voľnou energiou obvykle jednotlivé fázy vykazujú aj tzv. usporiadanie na dlhú vzdialenosť, t.j. symetria je narušená rovnakým spôsobom v celej vzorke. Ak bola narušená spojitá symetria, potom nárast voľnej energie spôsobený (pomalou) priestorovou nehomogenitou parametra usporiadania možno popísať pomocou zovšeobecnenej tuhosti. Existencia konečnej zovšeobecnenej tuhosti garantuje bezdisipatívny transport veličiny združenej s parametrom usporiadania. V excitačnom spektre takýchto systémov existujú nízkoenergia kolektívne módy s nulovou energiou v dlhovlnnej limite, tzv. Goldstoneove módy.⁷¹ Pole parametra usporiadania môže obsahovať aj tzv. topologické defekty, t.j. také nekonštatné konfigurácie parametra usporiadania, ktoré nemožno odstrániť pomocou spojitých deformácií. Takéto defekty podstatným spôsobom ovplyvňujú zovšeobecnenú tuhosť systému.

Adiabatická kontinuita

Verí sa, že efektívne modely s rovnakou symetriou možno spojito (adiabaticky) deformovať jeden na druhý. Preto je užitočné v každej triede symetrie identifikovať jednoduchého reprezentanta tejto triedy a vlastnosti ostatných členov triedy ďalej skúmať poruchovou teóriou so zvoleným reprezentantom ako štartovacím bodom.

ZOO pozorovaných fáz

V tomto odstavci budeme klasifikovať fázy podľa ich mechanických, elektrických a magnetických vlastností. Náš výklad však nemá ambíciu podať vyčerpávajúci prehľad všetkých pozorovaných fáz.

Z hľadiska mechanických vlastností je triviálnou fázou plyn, ktorý sa od všetkých ostatných fáz líši tým, že nejde o viazaný stav častíc. Plyny a kvapaliny (súhrnne tekutiny) sa zas od všetkých ostatných fáz líšia tým, že v nich nie sú spontánne narušené žiadne symetrie. Popis vybraných fáz a ich vlastností uvádzame v tabuľke 3. V tabuľke neuvádzame napr. kvapalné kryštály, pretože na ich popis by bolo potrebné zaviesť ďalšie pojmy.

Z hľadiska elektrických vlastností rolu plynu hrajú izolanty, t.j. fázy bez voľných nábojov pri teplote $T = 0$. Ostatné fázy majú konečné nábojové hustoty. Izolanty a kovy sú jedinými stavmi bez spontánne narušenej symetrie, na rozdiel od ostatných fáz, ktoré možno vnímať ako kovy s narušenými symetriami. V tabuľke 4 z takýchto fáz uvádzame iba supravodiče, existujú však aj fázy, v ktorých elektróny spontánne narušajú priestorové symetrie (translácie, rotácie) kryštalickej mriežky.

Z hľadiska magnetických vlastností rolu plynu (alebo izolantu) hrajú diamagnety, t.j. fázy bez voľných magnetických momentov pri teplote $T = 0$. Ostatné fázy majú konečné hustoty magnetických momentov. Diamagnety a paramagnety sú jedinými stavmi bez spontánne narušenej symetrie, na rozdiel od ostatných fáz, ktoré možno vnímať ako paramagnety s narušenými symetriami. V tabuľke 5 z takýchto fáz uvádzame len tie, o ktorých sme hovorili v tomto kurze. Vynechávame teda napr. všetky magneticky usporiadané fázy kovov.

Klasifikáciu fáz z hľadiska elektrických a magnetických vlastností možno zľúčiť. O oboch klasifikáciách predovšetkým platí, že sa zameriavajú výlučne na elektrónové stupne voľnosti,⁷² opierajúc sa o Bornovu-Oppenheimerovu separáciu elektrónových a iónových stupňov voľnosti. Podľa (jednoelektrónovej) pásovej teórie však existujú iba dve možnosti: izolanty (ktoré sú obvykle diamagnetické)

⁷¹Toto tvrdenie platí iba pre dostatočne krátkodosahové sily. Napríklad v nabitom supravodiči medzi elektrónmi pôsobí ďalekodosahové sily a v ich dôsledku v takomto systéme neexistuje Goldstoneov mód a kolektívne kmity kondenzátu sa realizujú na (konečnej) plazmovej frekvencii - tento jav sa nazýva Andersonov-Higgssov mechanizmus.

⁷²Toto obmedzenie nie je celkom opodstatnené. Napríklad pri veľmi nízkych teplotách boli pozorované aj magneticky usporiadané fázy jadrových spinov.

a kovy (ktoré sú obvykle paramagnetické). Všetky ostatné fázy z tabuliek 4 a 5 možno chápať ako nestability kovu. V prípade supravodivosti je to zrejme z tohto kurzu, kým rôzne magnetické izolanty sú nízkoteplotnými fázami Mottových-Hubbardových izolantov.

Zovšeobecnená tuhosť jednotlivých fáz, ako aj s ňou asociovaný bezdisipatívny transport, sú potlačené prítomnosťou defektov. V tabuľkách 3,4,5 uvádzame iba tie defekty, ktorých stabilita je garantovaná topológiou. Neuádzame napríklad hranice zŕn v polykryštáloch, hoci za bežných podmienok sú tieto defekty vďaka pomalosti difúznym procesom stabilné. V procese žihania však môžu veľké zrná rásť na úkor malých, pretože stabilita doménových stien v kryštáloch nie je kontrolovaná topológiou.

Fázové prechody

Podľa veľkosti skoku entropie ΔS v bode fázového prechodu (alebo skupenského tepla prechodu) fázové prechody delíme na spojité, pri ktorých $\Delta S = 0$, a nespojité, kedy $\Delta S \neq 0$. Pri spojitých fázových prechodoch sa obvykle zúčastnené fázy A a B líšia symetriou, pričom symetria fázy A s nenulovým parametrom usporiadania je podgrupou symetrie fázy B. Bod fázového prechodu oddeľuje oblasti stability fáz: na jednej strane prechodu je lokálne stabilná iba fáza A, kým na opačnej strane prechodu je lokálne stabilná iba fáza B. Preto nemôže dochádzať k prehriatiu a podchladeniu, ani k hysterézii. Pri približovaní k bodu prechodu zo strany nesymetrickej fázy A v nej vznikajú oblasti s ináč než majoritne orientovaným parametrom usporiadania, ktorých rozmer ξ_- rastie, až v bode prechodu $\xi_- \rightarrow \infty$ a všetky orientácie parametra usporiadania sú rovnako pravdepodobné. Naopak na strane symetrickej fázy B v nej vznikajú zárodky usporiadanej fázy A o veľkosti ξ_+ , pričom rôzne zárodky majú rôzne orientovaný parameter usporiadania. Pri približovaní k bodu prechodu ξ_+ rastie, až v bode prechodu $\xi_+ \rightarrow \infty$ a jedna z orientácií parametra usporiadania začne dominovať. Korelačné dĺžky $\xi_{\pm}$ rastú ako mocniny vzdialenosti od fázového prechodu, napríklad pri teplotou kontrolovanom prechode s kritickou teplotou T_c platí $\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}$, obvykle s tým istým exponentom ν v oboch fázach A aj B. Aj ďalšie fyzikálne veličiny vykazujú podobné správanie, napríklad merné teplo diverguje podľa $c \propto |T - T_c|^{-\alpha}$, susceptibilita (t.j. závislosť parametra usporiadania od vonkajšieho poľa) diverguje podľa $\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma}$ a veľkosť parametra usporiadania (v usporiadanej fáze) sa mení podľa $m \propto (T_c - T)^{\beta}$. Bezrozmerné čísla α, β, γ a ν sa nazývajú kritické exponenty. Platia medzi nimi tzv. škálovacie vzťahy, napríklad v d -rozmernom systéme platí

$$\nu d = 2 - \alpha = 2\beta + \gamma.$$

Hodnoty kritických exponentov závisia od priestorovej rozmernosti systému d a od rozmernosti parametra usporiadania, ale nie od jeho fyzikálnej povahy. Rovnaké exponenty sa napríklad pozorujú v blízkosti kritického bodu prechodu kvapalina-plyn (pozri prednášku I.3; v tomto prípade je parametrom usporiadania rozdiel hustôt pozdĺž krivky nasýtených pár) a pri T_c feromagnetu s ľahkou osou magnetizácie MnF_2 . Fázové prechody teda vytvárajú triedy univerzality. Obidva spomínané príklady majú jednorozmerný parameter usporiadania, podobne ako Isingov model. Ich trieda univerzality je teda tzv. 3D Isingovho typu s exponentami

$$\alpha \approx 0.110, \quad \beta \approx 0.326, \quad \gamma \approx 1.237, \quad \nu \approx 0.630,$$

ktoré možno nájsť napr. technikou renormalizačnej grupy. Tieto exponenty majú iné hodnoty ako predpovede teórie stredného poľa (alebo Ginzburga-Landaua)

$$\alpha_{\text{MF}} = 0, \quad \beta_{\text{MF}} = \frac{1}{2}, \quad \gamma_{\text{MF}} = 1, \quad \nu_{\text{MF}} = \frac{1}{2},$$

ktoré nezávisia ani od d , ani od rozmernosti parametra usporiadania.

Nespojité fázové prechody nazývame aj prechodmi 1. druhu. V tomto prípade bod prechodu nie je ničím výnimočný ani pre fázu A, ani pre fázu B: napríklad na oboch stranách prechodu sú lokálne stabilné obidve fázy. Bod prechodu je význačný iba tým, že sa v ňom rovnajú voľné energie fáz A a B, a teda na rôznych stranách prechodu sú globálne stabilné rôzne fázy. Pri prechodoch 1. druhu preto môže dochádzať k prehriatiu a podchladeniu, ako aj k hysterézii. Kritické správanie sa pri nespojitých prechodoch nepozoruje: fáza A sa premieňa na fázu B nukleačným mechanizmom. O symetrii fáz A,B

nemožno vo všeobecnosti nič povedať, napríklad symetria jednej fázy nemusí byť podgrupou symetrie druhej fázy⁷³ - v takomto prípade sa nedá hovoriť o symetrickej a nesymetrickej fáze.

V prírode sa občas realizujú aj tzv. slabé prechody 1. druhu. V takomto prípade prechod vyzerá ako spojitý, ak nie sme vo veľmi tesnej blízkosti k bodu prechodu. Veľmi blízko prechodu sa však rast korelačných dĺžok ξ zastaví. V bode prechodu potom ξ nadobúda konečné hodnoty a existuje v ňom malý, ale konečný skok entropie ΔS .

Topologické fázy a topologické fázové prechody

V rámci paradigmy Landaua-Andersona sú vlastnosti fáz diktované narušenými symetriami. Na príklade 2D modelu XY sme však videli, že nenulová tuhosť je možná aj v systéme bez spontánneho narušenia symetrie. V tomto prípade konečnú tuhosť zabezpečuje absencia voľných topologických defektov (vírov a antivírov) a prechod do tekutej vysokoteplotnej fázy s voľnými topologickými defektmi nazývame topologickým fázovým prechodom.

Ďalším príkladom neúplnosti paradigmy Landaua-Andersona je kvantový Hallov jav, alebo všeobecnejšie Chernove izolanty. Z hľadiska pásovej teórie ide o obyčajné izolanty, avšak konečnosť Chernovho čísla (t.j. topologická vlastnosť) zabezpečuje kvalitatívne nové správanie: existenciu dokonale vodivých povrchových stavov. Kvalitatívne podobné správanie - t.j. konečná energetická medzera v spektre vnútri materiálu a excitácie s nulovou excitačnou energiou v blízkosti povrchov - sa realizuje v celej triede nových materiálov, tzv. topologických izolantov. Ich názov zohľadňuje, že podobne ako pri Chernových izolantoch, aj v tomto prípade má pozorované výnimočné správanie topologický pôvod.

⁷³Takáto situácia môže nastať napríklad pri štruktúrnom prechode medzi dvomi rôznymi kryštalickými štruktúrami. Iným príkladom je prechod z tuhého do supratekutého hélia.

	neviaz./viaz.	naruš. sym.	efekt. teória	parameter usp.	Goldstone	zovšeob. tuhosť	bezdisip. transport	topolog. defekty
plyn	neviaz.	0	Navier-Stokes	0	0	0	0	0
kvapalina	viaz.	0	Navier-Stokes	0	0	0	0	0
tuhá látka	viaz.	rot.+transl.	teória elasticity	$\langle \rho(\mathbf{x}) \rangle$	priečny zvuk	tuhosť v šnkyku	sila, moment sily	dislokácie
supratekutina	viaz.	kalibračná	Ginzburg-Landau	$\langle \psi \rangle$	zvuk	tuhosť fázy	hmota	víry

Tabuľka 3: Klasifikácia fáz z hľadiska mechanických vlastností.

	voľné náboje	naruš. sym.	efekt. teória	parameter usp.	Goldstone	zovšeob. tuhosť	bezdisip. transport	topolog. defekty
izolant	0	0	makroskop. eldyn.	0	0	0	0	0
kov	1	0	Landauova teória	0	0	0	0	0
supravodič	1	kalibračná	Ginzburg-Landau	$\langle \psi_L \psi_T \rangle$	0 (Anderson-Higgs)	tuhosť fázy	náboj	víry

Tabuľka 4: Klasifikácia fáz z hľadiska elektrických vlastností.

	voľné mag. mom.	naruš. sym.	efekt. teória	parameter usp.	Goldstone	zovšeob. tuhosť	bezdisip. transport	topolog. defekty
diamagnet	0	0	makroskop. eldyn.	0	0	0	0	0
paramagnet	1	0	makroskop. eldyn.	0	0	0	0	0
Heisenberg FM	1	rot.	Ginzburg-Landau	$\langle \mathbf{S} \rangle$	spin. vlny	tuhosť spinov	moment sily	0
Heisenberg AFM	1	rot.+transl.	Ginzburg-Landau	$\langle \mathbf{S}(\mathbf{x}) \rangle$	spin. vlny	tuhosť spinov	moment sily	0
XY FM	1	rot.	Ginzburg-Landau	$\langle \mathbf{S} \rangle$	spin. vlny	tuhosť spinov	moment sily	víry
Ising FM	1	inv. času	Ginzburg-Landau	$\langle S^z \rangle$	0	0	0	domén. steny

Tabuľka 5: Klasifikácia fáz z hľadiska magnetických vlastností.

23 Dodatok

Priestorová Fourierova transformácia

Obvykle skúmame systémy v tvare (veľkého) rovnobežnostenu s objemom $\mathcal{V}$ a s periodickými okrajovými podmienkami. Dovoľené hodnoty vlnových vektorov $\mathbf{q}$ sú potom diskkrétne a Fourierove transformácie pre ľubovoľnú veličinu $F(\mathbf{r})$ definujeme vzťahmi

$$F(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}.$$

Fourierovsky transformovanú funkciu $F_{\mathbf{q}}$ teda obvykle označujeme tým istým písmenom ako pôvodnú funkciu $F(\mathbf{r})$. Aby sme tieto dve rôzne funkcie rozlíšili, závislosť od vlnových vektorov $\mathbf{q}$ píšeme ako index. Inverzná Fourierova transformácia má tvar:

$$F_{\mathbf{q}} = \int d^3\mathbf{r} F(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}.$$

Časová Fourierova transformácia

K ľubovoľnej časovo závislej veličine $F(t)$ definujeme jej Fourierovu transformáciu F_{ω} vzťahom

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} F_{\omega} e^{-i\omega t}.$$

Inverzná Fourierova transformácia má tvar:

$$F_{\omega} = \int_{-\infty}^{\infty} dt F(t) e^{i\omega t}.$$

Stirlingova formula: pre $n \gg 1$ platí

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n.$$

Diagonalizácia hermitovskej matice 2×2

prvky matice 2×2 :

$$H = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix}$$

vlastné čísla:

$$E_{\pm} = \frac{a+c}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a-c}{2}\right)^2 + |b|^2}$$

vlastné vektory:

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}_{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1-\lambda\alpha} \\ \lambda e^{-i\delta} \sqrt{1+\lambda\alpha} \end{pmatrix},$$

kde $\lambda = \pm 1$, $\alpha = \frac{(c-a)/2}{\sqrt{|b|^2 + (c-a)^2/4}}$, $e^{i\delta} = b/|b|$

Operátor nábojovej hustoty

1. kvantovanie

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

Fourierova transformácia

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i}$$

druhé kvantovanie pre bezspinové častice

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}$$

Operátor prúdovej hustoty pre častice s hmotnosťou m

1. kvantovanie

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \sum_i [\mathbf{p}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{p}_i]$$

Fourierova transformácia

$$\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2m} \sum_i [\mathbf{p}_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} + e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \mathbf{p}_i]$$

druhé kvantovanie pre bezspinové častice

$$\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \frac{\hbar}{2m} \sum_{\mathbf{k}} (2\mathbf{k} - \mathbf{q}) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$$

Reprezentácia operátorov spinu pomocou elektrónových operátorov

Nech $\mathbf{S}_i$ a $\mathbf{S}_j$ sú operátory spinu pre elektróny v ortogonálnych orbitáloch i a j . Pre tieto operátory platia nasledovné komutačné vzťahy:

$$[S_i^\alpha, S_j^\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \delta_{ij} S_i^\gamma.$$

Namiesto zložiek S_i^x, S_i^y často používame zvyšovacie a znižovacie operátory $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$. Pre trojicu operátorov $S_i^z, S_i^\pm$ platia komutačné vzťahy:

$$[S_i^z, S_j^\pm] = \pm \delta_{ij} S_i^\pm, \quad [S_i^+, S_j^-] = 2\delta_{ij} S_i^z.$$

Na druhej strane, nech $c_{i\alpha}^\dagger$ a $c_{i\alpha}$ sú kreačné a anihilačné operátory pre elektrón v orbitáli i s priemetom spinu α , $\alpha \in (\uparrow, \downarrow)$, ktoré spĺňajú kánonické (anti)komutačné vzťahy:

$$\{c_{i\alpha}, c_{j\beta}\} = \{c_{i\alpha}^\dagger, c_{j\beta}^\dagger\} = 0; \quad \{c_{i\alpha}, c_{j\beta}^\dagger\} = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}.$$

Pomocou $c_{i\alpha}^\dagger$ a $c_{i\alpha}$ možno spinové operátory reprezentovať nasledovne:

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} c_{i\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta}, \quad S_i^+ = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}, \quad S_i^- = c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow},$$

kde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ je trojica Pauliho matíc, ktorých explicitný tvar je

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

identity pre Pauliho matice:

$$\begin{aligned} \sigma^\mu \sigma^\nu + \sigma^\nu \sigma^\mu &= 2\delta_{\mu\nu} \mathbf{1} \\ \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\gamma\delta} &= 2\delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \end{aligned}$$

skalárny súčin spinov:

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$$

Atómové jednotky

dĺžka:

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{Å}$$

energia:

$$\varepsilon_B = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} = \frac{1}{2} \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} = 13.6 \text{ eV}$$

Štatistická mechanika: kánonický súborkánonický hamiltonián: H kánonická štatistická suma: $Z = \text{Tre}^{-H/T}$; $Z = Z(T, \mathcal{V}, N)$ rovnovážna matica hustoty: $\rho = \frac{1}{Z} e^{-H/T}$ stredná hodnota veličiny X : $\langle X \rangle = \text{Tr} \rho X$ voľná energia: $F = -T \ln Z$; $F = F(T, \mathcal{V}, N)$ logaritmovanie definície ρ : $-T \ln Z = H + T \ln \rho$ štatistická fyzika: $F = -T \ln Z = \langle H \rangle + T \langle \ln \rho \rangle$ termodynamika: $F = E - TS$ porovnanie štatistiky a termodynamiky: vnútorná energia $E = \langle H \rangle$, entropia $S = -\langle \ln \rho \rangle = -\text{Tr} \rho \ln \rho$

$$dF = -pd\mathcal{V} - SdT + \mu dN; \quad p = -\left(\frac{\partial F}{\partial \mathcal{V}}\right)_{T,N}; \quad S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{\mathcal{V},N}; \quad \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,\mathcal{V}}$$

nech hamiltonián závisí od parametra: $H = H(\lambda)$ potom $Z = Z(T, \mathcal{V}, N, \lambda) = \text{Tre}^{-H(\lambda)/T}$, $F = F(T, \mathcal{V}, N, \lambda) = -T \ln \text{Tre}^{-H(\lambda)/T}$ analog Feynmanovej-Hellmanovej vety: $\left(\frac{\partial F}{\partial \lambda}\right)_{T,\mathcal{V},N} = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[\frac{\partial H}{\partial \lambda} e^{-H(\lambda)/T}\right] = \langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \rangle_{T,\mathcal{V},N,\lambda}$ **Štatistická mechanika: grandkánonický súbor**grandkánonický hamiltonián: $\mathcal{H} = H - \mu N$ grandkánonická štatistická suma: $\mathcal{Z} = \text{Tre}^{-\mathcal{H}/T}$; $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}(T, \mathcal{V}, \mu)$ rovnovážna matica hustoty: $\rho = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\mathcal{H}/T}$; preto $-T \ln \mathcal{Z} = H - \mu N + T \ln \rho$ stredná hodnota veličiny X : $\langle X \rangle = \text{Tr} \rho X$ grandkánonická voľná energia: $\mathcal{F} = -T \ln \mathcal{Z} = \langle H \rangle + T \langle \ln \rho \rangle - \mu \langle N \rangle = E - TS - \mu N$ entropia: $S = -\langle \ln \rho \rangle = -\text{Tr} \rho \ln \rho$

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}(T, \mathcal{V}, \mu); \quad d\mathcal{F} = -pd\mathcal{V} - SdT - Nd\mu; \quad p = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{V}}\right)_{T,\mu}; \quad S = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T}\right)_{\mathcal{V},\mu}; \quad N = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mu}\right)_{T,\mathcal{V}}$$

nech hamiltonián závisí od parametra: $\mathcal{H}(\lambda) = H(\lambda) - \mu N$ analog Feynmanovej-Hellmanovej vety: $\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \lambda}\right)_{T,\mathcal{V},\mu} = \langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \rangle_{T,\mathcal{V},\mu,\lambda}$ veta o malých prírastkoch pri zmene δH : $(\delta F)_{T,\mathcal{V},N} = \langle \delta H \rangle_{T,\mathcal{V},N,\lambda} = \langle \delta H \rangle_{T,\mathcal{V},\mu,\lambda} = (\delta \mathcal{F})_{T,\mathcal{V},\mu}$ **Feromagnetický Heisenbergov model**

Skúmame feromagnetický Heisenbergov model $H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ pre spiny $S = \frac{1}{2}$ na hyperkubickej mriežke s $\mathcal{N}$ spinmi. Ľahko nahliadneme, že za základný stav takéhoto modelu možno vziať akýkoľvek homogénny stav so spinmi spontánne zamrznutými v smere $\mathbf{n}$, napríklad stav $|0\rangle$ so všetkými spinmi $\uparrow$, kedy $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$. Zjavne ide o stavy so spontánne narušenou rotačnou symetriou v spinovom priestore. Stojí za zmienku, že feromagnetický Heisenbergov model v spontánne zmagnetizovanom stave v smere $\mathbf{n}$ síce nie je symetrický vzhľadom na všetky otočenia, ale má zbytkovú spojitú symetriu: je totiž symetrický voči otočeniam okolo osi $\mathbf{n}$.

Parametrom usporiadania pre feromagnet bude $\hat{\mathbf{M}} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_i \mathbf{S}_i$, pričom bude platiť $\langle \hat{\mathbf{M}} \rangle = \mathbf{n}$. Keďže $[\hat{\mathbf{M}}, H] = 0$, parameter usporiadania je zachovávacou sa veličinou. Vďaka tejto skutočnosti kvantové fluktuácie absentujú a pri teplote $T = 0$ dochádza (na rozdiel od antiferomagnetického modelu) k spontánnemu narušeniu symetrie aj na jednorozmernej mriežke.

Celkový spin základného stavu $|0\rangle$ a jeho priemet na os z sú $S = S_z = \mathcal{N}/2$. V ďalšom výklade sa sústreďme na štúdium stavov s projekciou celkového spinu $S_z = \mathcal{N}/2 - 1$. V tomto podpriestore existuje $\mathcal{N}$ konfigurácií, ktoré dostaneme zo stavu $|0\rangle$ preklopením jediného spinu v ľubovoľnom bode $\mathbf{R}$ mriežky. Takéto konfigurácie označíme $|\mathbf{R}\rangle$. Keďže hamiltonián komutuje s operátorom S_z , výsledkom pôsobenia operátora H na konfiguráciu $|\mathbf{R}\rangle$ musia byť konfigurácie z podpriestoru $S_z = \mathcal{N}/2 - 1$. Explicitný výpočet ukazuje, že

$$H|\mathbf{R}\rangle = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z |\mathbf{R}\rangle - \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) |\mathbf{R}\rangle = \left(E_0 + \frac{zJ}{2}\right) |\mathbf{R}\rangle - \frac{J}{2} \sum_{\hat{\tau}} |\mathbf{R} + \hat{\tau}\rangle,$$

kde z je koordinačné číslo mriežky, t.j. počet najbližších susedov na mriežke,⁷⁴ E_0 je energia základného stavu $|0\rangle$ a $\hat{\tau}$ označuje z spojnic mriežkového bodu s jeho najbližšími susedmi. Teda vďaka preklápaniu spinov sa na stav $|\mathbf{R}\rangle$ môžeme pozrieť ako na časticu pohybujúcu sa cez mriežku. Ak predpokladáme periodické okrajové podmienky, problém možno diagonalizovať Fourierovou transformáciou:

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle; \quad H|\mathbf{k}\rangle = (E_0 + \varepsilon_{\mathbf{k}})|\mathbf{k}\rangle; \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{zJ}{2} [1 - \gamma_{\mathbf{k}}]; \quad \gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\hat{\tau}} e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\tau}}.$$

Vlastné stavy $|\mathbf{k}\rangle$ nazývame spinovými vlnami. Náš výsledok pre energiu spinovej vlny $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ je identický s výsledkom klasického výpočtu pri $T = 0$.⁷⁵ Spinová vlna nesie kvázihybnosť $\mathbf{k}$, ktorá je pozorovateľná v rozptylových experimentoch podobne ako pre fonóny.⁷⁶ V dlhovlnnej limite $k \rightarrow 0$ pre energiu magnónov platí $\varepsilon_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$, ide teda o Goldstoneov mód.

Teraz ukážeme, že výsledok $\varepsilon_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$ v dlhovlnnej limite je prirodzeným dôsledkom narušenia symetrie. Naozaj, projekcia celkového spinu S_z v stave $|\mathbf{k}\rangle$ je očividne $S_z = \mathcal{N}/2 - 1$. Aký je však celkový spin v stave $|\mathbf{k}\rangle$? Z kvantovej mechaniky vieme, že spomedzi $\mathcal{N}$ stavov s $S_z = \mathcal{N}/2 - 1$ iba jeden stav má celkový spin $S = \mathcal{N}/2$ a ostatné stavy majú $S = \mathcal{N}/2 - 1$. Stav s celkovým spinom $S = \mathcal{N}/2$ dostaneme aplikáciou znižovacieho operátora celkového spinu S^- na stav $|0\rangle$. Ľahko nahliadneme, že takto dostaneme “spinovú vlnu” $|\mathbf{k} = 0\rangle$. Ukázali sme teda, že stav $|\mathbf{k} = 0\rangle$ nie je excitovaným stavom. V skutočnosti je to stav degenerovaný so stavom $|0\rangle$, s tým rozdielom, že kým v stave $|0\rangle$ je $S_z = \mathcal{N}/2$, v stave $|\mathbf{k} = 0\rangle$ je to $S_z = \mathcal{N}/2 - 1$. Tým sme dokázali, že spinová vlna je Goldstoneov mód, podobne ako v antiferomagnetickom modeli. Avšak, na rozdiel od antiferomagnetického modelu, vo feromagnetickom modeli so zachovávajúcim sa parametrom usporiadania má Goldstoneov mód v dlhovlnnej limite energiu $\varepsilon_k \propto k^2$.

Ďalším pôsobením znižovacieho operátora S^- na stav $|\mathbf{k} = 0\rangle$ by sme dostali ďalší z degenerovaných základných stavov s celkovým spinom $S = \mathcal{N}/2$ a projekciou $S_z = \mathcal{N}/2 - 2$, atď. Posledný stav, ktorý takto dostaneme, obsahuje všetky spiny natočené nadol, teda $S_z = -\mathcal{N}/2$. Na druhej strane, stavy $|\mathbf{k}\rangle$ s $\mathbf{k} \neq 0$ majú kvantové čísla $S = S_z = \mathcal{N}/2 - 1$. Môžeme ich teda interpretovať ako prítomnosť častice so spinom $S = 1$, tzv. magnónu. Kreačné a anihilačné operátory pre magnóny možno definovať vzťahmi

$$a_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}}^-; \quad a_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}}^+; \quad [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{q}}] = [a_{\mathbf{k}}^\dagger, a_{\mathbf{q}}^\dagger] = 0$$

Komutačné vzťahy pre magnónové kreačné a anihilačné operátory sa podobajú na bozónové vzťahy, ale s jednou výnimkou:

$$[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{q}}^\dagger] = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}'} [S_{\mathbf{R}}^+, S_{\mathbf{R}'}^-] = \frac{2}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}}^z \approx \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}$$

kde sme využili, že $[S_{\mathbf{R}}^+, S_{\mathbf{R}'}^-] = \delta_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} S_{\mathbf{R}}^z$. Približná rovnosť platí, iba ak môžeme operátor $S_{\mathbf{R}}^z$ nahradiť číslom $1/2$, t.j. v základnom stave a pre stavy s malým počtom magnónov.

Podobným spôsobom možno postupovať pri štúdiu sektorov s nižšími S_z . Napríklad pre $S_z = \mathcal{N}/2 - 2$ dostaneme $\frac{1}{2}\mathcal{N}(\mathcal{N} - 1)$ konfigurácií. Jeden stav má celkový spin $S = \mathcal{N}/2$ a zodpovedá ďalšiemu z degenerovaných základných stavov. $\mathcal{N} - 1$ stavov s celkovým spinom $S = \mathcal{N}/2 - 1$ dostaneme aplikovaním znižovacieho operátora S^- na $\mathcal{N} - 1$ spinových vln; keďže $a_0^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle = a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0^\dagger |0\rangle$, môžeme tieto stavy považovať za (otočené) jednomagnónové stavy. Zvyšné stavy majú celkový spin $S = \mathcal{N}/2 - 2$ a možno ich považovať za dvojmagónové stavy. Magnóny v týchto stavoch navzájom interagujú, čo vedie ku konečným dobám života, ako aj k vzniku viazaných stavov. Podrobnejšiu diskusiu o dvojmagónových stavoch čitateľ nájde napr. v Mattisovej knihe.

⁷⁴Pre hyperkubické mriežky je $z = 2D$, kde D je rozmernosť systému.

⁷⁵Pozri napr. I.25.

⁷⁶Pozri napr. II.8.

24 Literatúra

1. P. W. Anderson, Basic notions of condensed matter physics, Addison Wesley, 1984
2. A. Auerbach, Interacting electrons and quantum magnetism, Springer, 1994
3. K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, Superconductivity, Vols. 1 & 2, Springer, 2008
4. H. B. Callen, Thermodynamics and an introduction to thermostatistics, 2nd Ed., Wiley, 1985
5. J. Celý, Kvazičástice v pevných látkách, VUT Brno, 2004
6. P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, Principles of condensed matter physics, Cambridge University Press, 1995
7. P. G. de Gennes, Superconductivity of metals and alloys, Westview, 1999
8. D. L. Goodstein, States of matter, Dover, 1985
9. W. Jones and N.H. March, Theoretical Solid State Physics, Wiley, 1973
10. C. Kittel, Kvantová teória tuhých látok, Alfa, 1977
11. G. Mahan, Many particle physics, Plenum Press, 1981
12. M. P. Marder, Condensed matter physics, Wiley, 2000
13. D. C. Mattis, The theory of magnetism I, Springer, 1988
14. “NP1”: P. Nozières and D. Pines, The theory of quantum liquids, Vol. 1, Addison-Wesley, 1989
15. “NP2”: P. Nozières and D. Pines, The theory of quantum liquids, Vol. 2, Addison-Wesley, 1990
16. R. D. Parks, Superconductivity, Vols. 1 & 2, Marcel Dekker, 1969
17. P. Phillips, Advanced solid state physics, Westview, 2003
18. G. Rickayzen, Green’s functions and condensed matter, Academic Press, 1980
19. J. P. Sethna, Statistical mechanics: entropy, order parameters, and complexity, Oxford, 2006
20. J. R. Schrieffer, Theory of superconductivity, Westview, 1999
21. M. Tinkham, Introduction to superconductivity, 2nd Ed., Dover, 2004
22. “Zelená kniha”: J. Pišút, L. Gomolčák a V. Černý, Úvod do kvantovej mechaniky, Alfa, 1983