Краткие сообщения по физике № 3-1989 г.

УДК 546.06

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ МОДЕЛИ БКШ

А.Ф. Измайлов, А.Р. Кессель

Методом континуального интегрирования произведен точный расчет статистической суммы редуцированной модели БКШ. Найдено условие существования фазового перехода.

Гамильтониан редуцированной модели БКШ $H = H_0 + H_{int}$ в представлении Шредингера имеет вид:

$$H_0 = \sum_{j,l=1}^{N} \sum_{\sigma} \Psi^+_{\sigma}(x_j, 0)\, t^{\sigma}_{jl}\, \Psi_{\sigma}(x_l, 0), \quad t^{\sigma}_{jl} = \frac{1}{N} \sum_{k} e^{ik(x_j - x_l)}\, t^{\sigma}_{k},$$
$$H_{int} = \frac{U}{N} \sum_{j,l=1}^{N} \Psi^+_{1/2}(x_j, 0)\,\Psi^+_{-1/2}(x_j, 0)\,\Psi_{1/2}(x_l, 0)\,\Psi_{-1/2}(x_l, 0), \tag{1}$$

где $\Psi^+_{\sigma}(x_j, \tau)$ и $\Psi_{\sigma}(x_j, \tau)$ – полевые операторы Ферми рождения и уничтожения электрона в точке x_j в момент времени τ с проекцией спина σ; t^{σ}_{jl} – матричные элементы, описывающие перескок электрона с атома j на атом l в спиновом состоянии σ; U – константа электронного взаимодействия; N – число элементарных ячеек в кристалле.

Воспользуемся представлением статистической суммы через континуальный интеграл /1/:

$$\mathrm{Sp}\, e^{-\beta H} = Z \int d\mu\, e^{A_c/\hbar}. \tag{2}$$

Ковариантный символ действия A_c для редуцированной модели БКШ дается выражением

$$A_c = \lim_{N_\tau \to \infty} \frac{\hbar}{N_\tau} \sum_{j,l=1} \sum_{\tau} \Big[\sum_{\sigma} \Psi^+_{c,\sigma}(x_j, \tau) D^{\sigma}_{jl}(\tau) \Psi_{c,\sigma}(x_l, \tau) -$$
$$- \frac{U\beta\hbar}{N} \Psi^+_{c,1/2}(x_j, \tau)\Psi^+_{c,-1/2}(x_j, \tau)\, \Psi_{c,1/2}(x_l, \tau)\, \Psi_{c,-1/2}(x_l, \tau)\Big], \tag{3}$$

где $D^{\sigma}_{jl}(\tau) = \hbar\beta\delta_{jl}\partial_\tau - \beta t^{\sigma}_{jl}$; $\Psi^+_{c,\sigma}(x_j, \tau)$ и $\Psi_{c,\sigma}(x_j, \tau)$ – ковариантные символы введенных выше полевых операторов, составляющие бесконечномерную грассманову алгебру. Выражение (3) соответствует решеточной аппроксимации интеграла по переменной τ, в которой интервал $[0, \hbar\beta]$ разбивается на N_τ равных частей /1, 2/. В этом случае мерой континуального интегрирования является

$$d\mu = \lim_{N_\tau \to \infty} \prod_{j=1}^{N} \prod_{\tau}^{N_\tau} \prod_{\sigma} d\Psi^+_{c,\sigma}(x_j, \tau) d\Psi_{c,\sigma}(x_j, \tau). \tag{4}$$

Результат континуального интегрирования (2) с действием (3) и мерой (4) можно представить в форме:

$$\int d\mu\, e^{A_c/\hbar} = \lim_{N_\tau \to \infty} \prod_{\tau}^{N_\tau} \sum_{p=0}^{N} \left(\frac{U\beta}{N}\right)^p Q_p(\tau),$$

$$Q_p(\tau) = \frac{1}{[(N-p)!]^2 p!} \sum_{i_1 m_1} \dots \sum_{i_p m_p} \sum_{j_1 l_1} \dots \sum_{j_{N-p} l_{N-p}} \sum_{j_1^1 l_1^1} \dots \sum_{j_{N-p}^1 l_{N-p}^1} \epsilon^{i_1 \dots i_p j_1 \dots j_{N-p}}_{m_1 \dots m_p l_1 \dots l_{N-p}} \times$$

$$\times \quad \epsilon^{i_1 \dots i_p j_1^1 \dots j_{N-p}^1}_{m_1 \dots m_p l_1^1 \dots l_{N-p}^1} D^{(-1/2)}_{j_1 l_1}(\tau) \dots D^{(-1/2)}_{j_{N-p} l_{N-p}}(\tau) D^{(1/2)}_{j_1^1 l_1^1}(\tau) \dots D^{(1/2)}_{j_{N-p}^1 l_{N-p}^1}(\tau),$$

где $\epsilon^{i_1 \dots i_N}_{m_1 \dots m_N}$ – обобщенный символ Кронекера ранга N.

Введем два набора фермиевских полей $\{\eta_j\}$ и $\{\xi_j\}$ $(j = 1, \dots, N)$, обладающих свойствами:

$$[\eta_j, \eta_l]_+ = [\xi_j, \xi_l]_+ = 2\delta_{jl}, \quad [\eta_j, \xi_l]_+ = 0,$$
$$\langle \eta_j \rangle_{0\eta} = \langle \xi_j \rangle_{0\xi} = 0, \quad \langle \eta_j^2 \rangle_{0\eta} = \langle \xi_j^2 \rangle_{0\xi} = 1,$$

где $\langle \dots \rangle_{0\eta}$ и $\langle \dots \rangle_{0\xi}$ обозначают усреднение по вакууму соответствующего фермиевского поля. Тогда выражение для $Q_p(\tau)$ может быть представлено в форме:

$$Q_p(\tau) = (-1)^p (p!)^{-3} \lim_{a \to 0} \langle \frac{d^p}{da^p} \det D^{(-1/2)}(a, \tau) \frac{d^p}{da^p} \det D^{(1/2)}(a, \tau) \rangle_{0, \eta, \xi},$$

$$D(a, \tau) = \sum_{j,l=1}^{N} D_{jl}(a, \tau) \hat{p}_{jl}, \quad D_{jl}(a, \tau) = D_{jl}(\tau) + a\eta_j \xi_l,$$

где $\{\hat{p}_{jl}\}$ – базис Окубо в алгебре матриц Mat (N, C). После некоторых преобразований функционал $Q_p(\tau)$ можно представить в виде:

$$Q_p(\tau) = \frac{(-1)^p}{p!} [\prod_k B_k(\tau)]^{2p} \lim_{a \to 0} \frac{d^{2p}}{da^{2p}} \prod_k \cos \frac{a}{B_k(\tau)}, \tag{5}$$
$$B_k(\tau) = \hbar\beta\partial_\tau - \beta t_k, \quad t_k = (\hbar k)^2/2M.$$

Для простоты выражение (5) выписано при условии малости энергии Зеемана электрона по сравнению с его кинетической энергией.

Вычисление в термодинамическом пределе производных, входящих в выражение (5), и последующий переход к фурье-представлению /3/ позволяют представить статистическую сумму в форме:

$$\mathrm{Sp}e^{-\beta H} = \mathrm{Sp}e^{-\beta H_0} \lim_{N \to \infty} \prod_\omega \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(2p)!}{(p!)^2} [\frac{U\beta}{N} \sum_k D_k(i\omega)]^p, \tag{6}$$
$$D_k(i\omega) = \sum_{\omega_1} B^{-1}_k(i\omega_1) B^{-1}_k(i\omega - i\omega_1),$$

где $\omega = 2\pi n/\hbar\beta$, $\omega_1 = \pi(2n_1 + 1)/\hbar\beta$ $(n, n_1 \subset Z)$. Правая часть выражения (9) преобразуется к виду

$$\mathrm{Sp}e^{-\beta H} = \mathrm{Sp}e^{-\beta H_0} \lim_{N \to \infty} \prod_\omega [1 - \frac{2U\beta}{N} \sum_k D_k(i\omega)]^{-1/2} \tag{7}$$

при условии $|2U\beta \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_k \mathrm{th}(\beta t_k/2)/(i\hbar\beta\omega - 2\beta t_k)| < 1$. Произведение по ω в правой части выражения (7) тоже удается вычислить в явном виде:

$$\mathrm{Sp}\,e^{-\beta H} = \mathrm{Sp}\,e^{-\beta H_0}\,F(\beta),\; F(\beta) = \lim_{N\to\infty} \exp\left\{\frac{1}{8N}\sum_{k} h_k(\beta)\left[\mathrm{ch}^{-2}(\beta t_k/2) - 2\right]\right\},$$
$$h_k(\beta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-2U\beta)^n}{n}\, f_{n,k}(\beta), \tag{8}$$

где функции $f_{n,k}(\beta)$ определяются из рекуррентного соотношения

$$f_{n,k}(\beta) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}\sum_{k_1}\left[f_{n-1,k}(\beta) + f_{n-1,k_1}(\beta)\right]\mathrm{th}(\beta t_{k_1}/2)/2\beta(t_{k_1} - t_k),\quad f_{1,k}(\beta) = 1.$$

Выражение (8) является окончательным итогом нашего точного расчета статистической суммы редуцированной модели БКШ. Функция $F(\beta)$ описывает отклонения статистической суммы, связанные со взаимодействием между электронами.

Точка фазового перехода II рода определяется как особенность статистической суммы на действительной оси. Особенностью на действительной оси обладает только центральный сомножитель, соответствующий $\omega = 0$. Условие обращения в бесконечность центрального сомножителя

$$1 - U\lim_{N\to\infty} N^{-1}\sum_{k} \mathrm{th}(\beta t_k/2)/t_k = 0 \tag{9}$$

дает уравнение, определяющее температуру фазового перехода. Условие (7) сходимости ряда (6) также приводит к этому уравнению. В пределе $\hbar\omega_D \gg T_c$ (ω_D – частота Дебая) выражение (9) дает:

$$T_c = 2\omega_D\gamma/\pi e^{1/2\lambda},\quad \lambda = \lim_{N\to\infty}(\rho U/N), \tag{10}$$

где ρ – плотность электронных состояний на поверхности Ферми. Результат (10) совпадает с традиционным выражением для T_c за исключением множителя 1/2 в показателе экспоненты, что при одинаковых λ приводит к большему значению T_c.

Авторы признательны Д.А. Киржницу, В.Я. Файнбергу, Е.С. Фрадкину и всем участникам семинара отдела теоретической физики ФИАН СССР за постоянное внимание и многочисленные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Березин Ф. А. Метод вторичного квантования. М., Наука, 1986.
2. Ефимов Г. В. Проблемы квантовой теории нелокальных взаимодействий. М., Наука, 1985.
3. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М., ГИФМЛ, 1962.

Поступила в редакцию 27 октября 1988 г.