

Уравнения Ричардсона и энергия связи куперовской пары

В. В. Погосов,

*Институт теоретической и прикладной
электродинамики РАН, Москва*

M. Combescot,

*Institut des NanoSciences de Paris, Universite Pierre et
Marie Curie & CNRS, Paris*

*W. V. Pogosov, M. Combescot, and M. Crouzeix, PRB 81, 174514 (2010); W. V. Pogosov, M. Combescot,
Письма в ЖЭТФ 92, 534 (2010).*

План

- Мотивация/Введение
- Решение уравнений Ричардсона в разреженном пределе
- Обобщение теории БКШ
- Выводы

Мотивация/Введение

Проблема перехода БЭК-БКШ (ультрахолодные газы, ВТСП, экситоны)

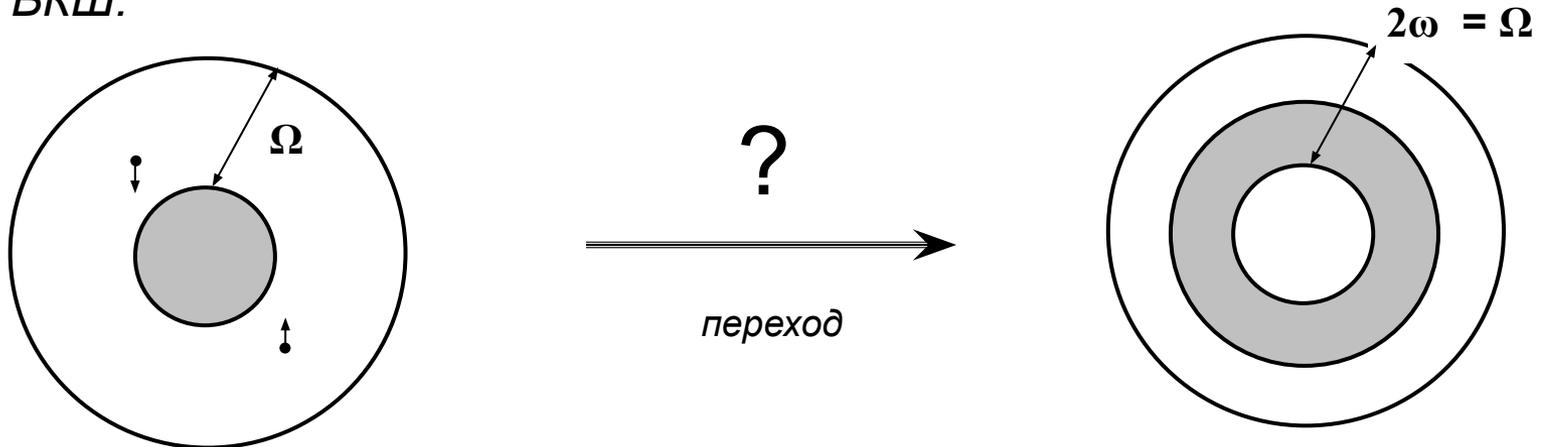
- Предел локальных пар

поверхность Ферми размыта

- Предел БКШ

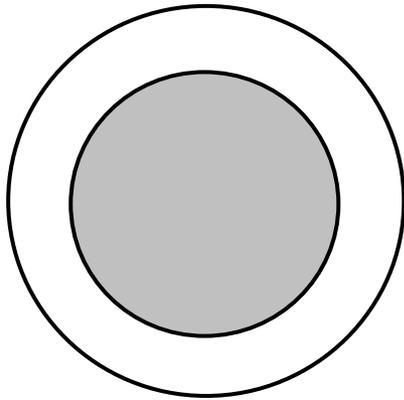
плотность пар очень велика, есть поверхность Ферми

- **Как описать переход?** Проблема осуждалась еще Шриффером в связи с переходом от двухчастичной модели Купера к многочастичной модели БКШ.



- Предыдущие работы по “*density-induced*” кроссоверу

Модель Иглса (1969): «сверхпроводящие полупроводники»



Обобщение формализма БКШ

- Уравнение на «щель»

- Уравнение на химический потенциал

Адекватное описание обоих пределов

См. также: N. Andrenacci et al. (1999).

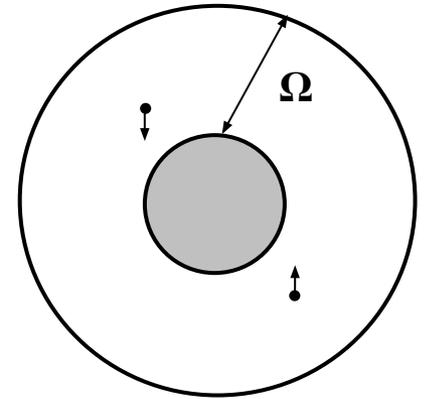
A. Leggett (1980): ферми-газы – кроссовер за счет изменения силы притяжения

Задача Купера и теория БКШ: ключевые моменты

Задача Купера

$$\mathcal{V} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}$$

$$V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = -V w_{\mathbf{k}'} w_{\mathbf{k}}$$



$$|\psi_1\rangle = \sum_{\mathbf{k}} w_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |F_0\rangle$$

Уравнение Шрёдингера:

$$G(\mathbf{k}) (2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_1) - V \sum_{\mathbf{p}} w_{\mathbf{p}} G(\mathbf{p}) = 0$$

Уравнение на собственные значения:

$$1 = V \sum_{\mathbf{k}} \frac{w_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_1}$$

$$V \sum_{\mathbf{k}} \frac{w_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E} \simeq \frac{\rho_0 V}{2} \int_{\varepsilon_{F_0}}^{\varepsilon_{F_0} + \Omega} \frac{2d\varepsilon}{2\varepsilon - E}$$

Энергия связи пары:

$$\epsilon_c \simeq 2\Omega e^{-2/\rho_0 V}$$

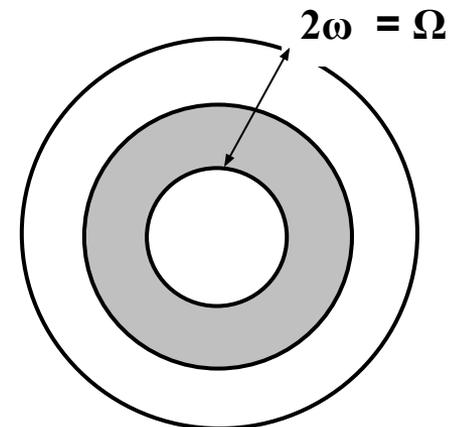
БКШ

Энергия сверхпроводящего состояния:

$$E_{BCS} \simeq \frac{1}{2} \rho_0 \Delta^2$$

Сверхпроводящая щель:

$$\Delta \simeq \Omega e^{-1/\rho_0 V}$$



Утверждение Шриффера: пары перекрыты так сильно, что концепция изолированной пары не имеет смысла (“has a little meaning”)

- вводятся «виртуальные» пары с “энергией” = щели
- сконцентрированы вблизи поверхности Ферми
- отличаются от «сверхтекучих» пар из волновой функции БКШ
- их число гораздо меньше числа пар в слое
- вводятся не ab initio, а для понимания результата, «руками»

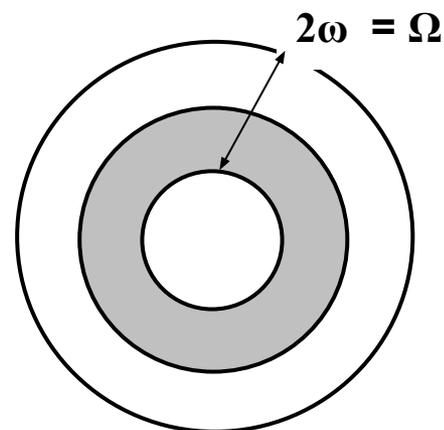
В настоящее время под куперовскими парами в БКШ обычно понимаются как раз виртуальные пары (см., например, Walecka-Fetter)

Мотивация:

- Установить возможную связь между «куперовскими парами» в обоих пределах
- Попытаться описать переход, выходя за рамки обобщенной теории БКШ

Альтернативное представление:

$$E_{BCS} = \frac{1}{2} \rho_0 \Omega^2 e^{-2/\rho_0 V} = \frac{N_{\Omega}}{2} \frac{\epsilon_c}{2}$$



Подход Ричардсона

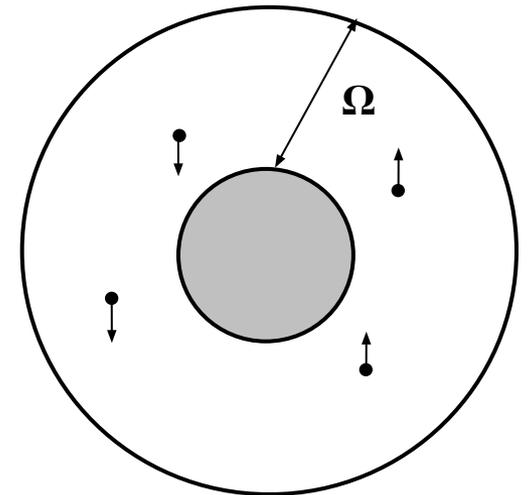
- Мысленный эксперимент: начнем добавлять пары в слой, пока он не заполнится наполовину

- *На примере двух пар*

$$\mathcal{V} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}$$

Волновая функция основного состояния:

$$|\psi_2\rangle = \sum w_{\mathbf{k}_1} w_{\mathbf{k}_2} G(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \beta_{\mathbf{k}_1}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_2}^\dagger |F_0\rangle$$



R.W. Richardson (1963)

$$G_R(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_1)(2\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - R_2)} + \frac{1}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_2)(2\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - R_1)}$$

$$E_2 = R_1 + R_2$$

используется тождество (расцепление):

$$\frac{1}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_1)(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_2)} = \frac{1}{R_1 - R_2} \left[\frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_1} - \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_2} \right]$$

- Уравнения Ричардсона для двух пар

$$1 = V \sum_{\mathbf{p}} \frac{w_{\mathbf{p}}}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - R_1} + \frac{2V}{R_1 - R_2}$$

$$1 = V \sum_{\mathbf{p}} \frac{w_{\mathbf{p}}}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - R_2} + \frac{2V}{R_2 - R_1}$$

Уравнения Ричардсона для трех пар

$$\begin{aligned} 1 &= V \sum_{\mathbf{p}} \frac{w_{\mathbf{p}}}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - R_1} + \frac{2V}{R_1 - R_2} + \frac{2V}{R_1 - R_3} \\ 1 &= V \sum_{\mathbf{p}} \frac{w_{\mathbf{p}}}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - R_2} + \frac{2V}{R_2 - R_1} + \frac{2V}{R_2 - R_3} \\ 1 &= V \sum_{\mathbf{p}} \frac{w_{\mathbf{p}}}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - R_3} + \frac{2V}{R_3 - R_1} + \frac{2V}{R_3 - R_2} \end{aligned}$$

- неявная зависимость от N !
- многочастичная классическая задача,
(имеется электростатическая аналогия)

Решение уравнений с помощью разложения

Разложение сумм в разреженном пределе

$$V \sum_{\mathbf{p}} \frac{w_{\mathbf{p}}}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - R} = V \sum_{\mathbf{p}} w_{\mathbf{p}} \left[\frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - E_1} + \frac{R - E_1}{(2\varepsilon_{\mathbf{p}} - E_1)(2\varepsilon_{\mathbf{p}} - R)} \right]$$
$$= 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \sigma_m (R - E_1)^m$$

где $\sigma_m = V \sum_{\mathbf{p}} \frac{w_{\mathbf{p}}}{(2\varepsilon_{\mathbf{p}} - E_1)^{m+1}} = \frac{v}{2m} \frac{I_m}{\epsilon_c^m}$

$$v = \rho_0 V$$

$$I_m = 1 - e^{-2m/v}$$

Вводим безразмерную переменную:

$$R - E_1 = z\epsilon_c$$



$$V \sum_{\mathbf{p}} \frac{w_{\mathbf{p}}}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - R} = 1 + v \sum_{m=1}^{\infty} \frac{I_m}{m} z^m$$

- Приведенные уравнения Ричардсона для двух пар:

$$0 = \sum_{m=1} \frac{I_m}{m} z_1^m + \frac{\gamma}{z_1 - z_2}$$

$$0 = \sum_{m=1} \frac{I_m}{m} z_2^m + \frac{\gamma}{z_2 - z_1}$$

- малый параметр

$$\gamma = \frac{4}{\rho_0 \epsilon_c} = \frac{4}{N_c}$$

- В первом приближении по $\sqrt{\gamma}$:

$$z_1 \simeq -z_2 \simeq a_1 \sqrt{\gamma}$$

$$a_1^2 \simeq -1/2I_1$$



$$z_1 + z_2 \simeq 0$$

(невзаимодействующие пары)

- Следующий порядок по $\sqrt{\gamma}$:

$$z_1 + z_2 \simeq -\frac{I_2}{2I_1} (z_1^2 + z_2^2) \simeq \frac{1}{2} \gamma \frac{I_2}{I_1^2}$$

- Энергия основного состояния:

$$E_2 \simeq 2 \left(E_1 + \frac{1}{\rho_0} \frac{I_2}{I_1^2} \right)$$

...переписываем.

$$E_2 \simeq 2 \left[2 \left(\varepsilon_{F_0} + \frac{1}{2\rho_0} \right) - \epsilon_c \left(1 - \frac{1}{N_\Omega} \right) \right]$$

↑
добавление 1-ой пары

↑
«выведание» энергии
связи пары (аналогично экситонам)

Три пары

В первом приближении:

$$z_1 = -z_2 \simeq a_1 \sqrt{\gamma}, \quad z_3 \simeq 0$$

Во втором приближении:

$$0 \simeq I_1(z_1 + z_2 + z_3) + \frac{I_2}{2} (z_1^2 + z_2^2 + z_3^2)$$
$$z_1 + z_2 + z_3 \simeq \frac{3}{2} \gamma \frac{I_2}{I_1^2}$$

$$E_3 = 3 \left(E_1 + \frac{2}{\rho_0} \frac{I_2}{I_1^2} \right) \longrightarrow E_3 \simeq 3 \left[2 \left(\varepsilon_{F_0} + \frac{2}{2\rho_0} \right) - \epsilon_c \left(1 - \frac{2}{N_\Omega} \right) \right]$$

и т.д. для большего количества пар

Четное число пар (общий случай)

I. В первом приближении

$$z_1 = -z_{2n} \simeq a_1 \sqrt{\gamma}, \quad z_2 = -z_{2n-1} \simeq a_2 \sqrt{\gamma}, \quad \dots,$$

$$z_n = -z_{n+1} \simeq a_n \sqrt{\gamma}$$

Уравнения Ричардсона:

$$0 \simeq I_1 a_1 + \frac{1}{a_1 - a_2} + \frac{1}{a_1 - a_3} + \dots + \frac{1}{a_1 + a_3} + \frac{1}{a_1 + a_2} + \frac{1}{2a_1}$$

умножаем на a_i и складываем

$$0 \simeq I_1 (a_1^2 + \dots + a_n^2) + 2C_n^2 + \frac{n}{2}$$

$$C_n^2 = n(n-1)/2$$

II. Во втором приближении (сумма уравнений Ричардсона):

$$0 \simeq I_1 \sum_{i=1}^{2n} z_i + \frac{I_2}{2} \sum_{i=1}^{2n} z_i^2$$

- Энергия основного состояния

$$E_N \simeq N \left[2 \left(\varepsilon_{F_0} + \frac{N-1}{2\rho_0} \right) - \epsilon_c \left(1 - \frac{N-1}{N_\Omega} \right) \right]$$

$$E_N^{(normal)} = 2 \sum_{p=0}^{N-1} \left(\varepsilon_{F_0} + \frac{p}{\rho_0} \right) = 2 \left[N\varepsilon_{F_0} + \frac{N(N-1)}{2\rho_0} \right]$$

$$E_N - E_N^{(normal)} \simeq -N \left(1 - \frac{N-1}{N_\Omega} \right) \epsilon_c$$

- Уменьшение энергии связи пары из-за принципа Паули
- Полное совпадение с результатами БКШ при экстраполяции в «полузаполненную» конфигурацию!

$$E_{BCS} = \frac{1}{2} \rho_0 \Omega^2 e^{-2/\rho_0 V} = \frac{N_\Omega}{2} \frac{\epsilon_c}{2}$$

Second order term in the expansion

$$E_N = N \left[E_1 + (N-1) \left\{ \frac{1}{\rho_0} (\dots) + \frac{1}{\rho_0^2} (\dots) \right\} \right]$$

still in $N(N-1)$

so that it vanishes in the large sample limit

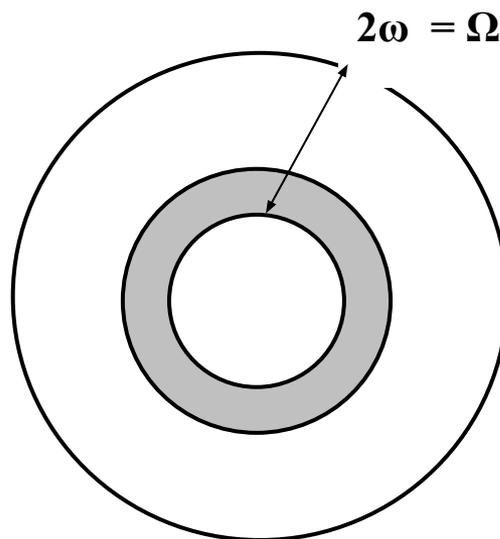
Similar to Frenkel excitons

same one-to-one coupling ...

$$\langle H \rangle_N = \frac{\langle v | B_0^N H B_0^{\dagger N} | v \rangle}{\langle v | B_0^N B_0^{\dagger N} | v \rangle}$$

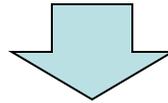
Обобщение БКШ

- Конфигурация с несимметричным расположением слоя с притяжением (произвольное число пар в слое)

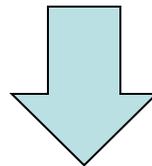


- Уравнение на щель

$$1 = \frac{\rho_0 V}{2} \int_{-\varepsilon_F + \varepsilon_{F_0}}^{\Omega - \varepsilon_F + \varepsilon_{F_0}} (\xi^2 + \Delta^2)^{-1/2} d\xi$$
$$= \frac{\rho_0 V}{2} \left[\sinh^{-1} \left(\frac{\varepsilon_{F_0} + \Omega - \varepsilon_F}{\Delta} \right) + \sinh^{-1} \left(\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_{F_0}}{\Delta} \right) \right]$$



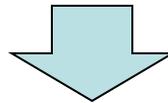
$$1 \simeq \frac{\rho_0 V}{2} \ln \left[4 \frac{(\varepsilon_{F_0} + \Omega - \varepsilon_F) (\varepsilon_F - \varepsilon_{F_0})}{\Delta^2} \right]$$



$$\Delta \simeq 2 [(\varepsilon_{F_0} + \Omega - \varepsilon_F) (\varepsilon_F - \varepsilon_{F_0})]^{1/2} e^{-1/\rho_0 V}$$

• Вычисление энергии конденсации

$$U_s - U_n = \frac{\rho_0}{2} \left[(\varepsilon_F - \varepsilon_{F_0})^2 - (\varepsilon_F - \varepsilon_{F_0}) \sqrt{(\varepsilon_F - \varepsilon_{F_0})^2 + \Delta^2} \right] \\ + \frac{\rho_0}{2} \left[(\varepsilon_{F_0} + \Omega - \varepsilon_F)^2 - (\varepsilon_{F_0} + \Omega - \varepsilon_F) \sqrt{(\varepsilon_{F_0} + \Omega - \varepsilon_F)^2 + \Delta^2} \right]$$



$$U_s - U_n \simeq -\frac{1}{2} \rho_0 \Delta^2$$



$$U_s - U_n \simeq -[\rho_0 (\varepsilon_F - \varepsilon_{F_0})] [2\Omega e^{-2/\rho_0 V}] \left[1 - \frac{\varepsilon_F - \varepsilon_{F_0}}{\Omega} \right] = -N\epsilon_c \left(1 - \frac{N}{N_\Omega} \right)$$

Совпадение с результатами решения уравнений Ричардсона ($N \gg 1$)

- Подход можно обобщить и на «разреженный» предел
Добавляется уравнение на химпотенциал:

$$\sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 = N$$

$$\left[\begin{array}{l} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}} \right) = N \\ \frac{V}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}} = 1 \end{array} \right.$$

энергия возбужденного состояния:

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}$$

Выражения для энергии основного состояния и Δ
сохраняются, но меняется смысл Δ

$$N < \rho_0 \epsilon_c / 2 \quad \Rightarrow \quad E_{\mathbf{k}}^{(\min)} = \sqrt{(\varepsilon_{F_0} - \mu)^2 + \Delta^2} \simeq \varepsilon_{F_0} - \mu \simeq \epsilon_c / 2$$

слабая сингулярность

• Спектр возбуждений из уравнений Ричардсона

- разрыв пары означает блокировку двух состояний («соловьевская блокировка»), что ведет к модификации энергии оставшихся пар

$$\mathcal{V} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}$$

Начальное состояние: N пар

Конечное состояние: (N - 1) пара + 1 неспаренный электрон

Уравнения Ричардсона:

$$1 = V \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}_1} \frac{w_{\mathbf{p}}}{2\varepsilon_{\mathbf{p}} - R_1} + \frac{2V}{R_1 - R_2} + \dots + \frac{2V}{R_1 - R_N}$$
$$R_i = R_i^{(0)} + \delta_i$$

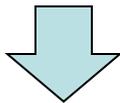
Разреженный предел:

$$\sum_i \delta_i = \frac{(N-1)}{2\varepsilon_{\mathbf{p}_1} - E_1} \left[\sum_{\mathbf{p}} (2\varepsilon_{\mathbf{p}_1} - E_1)^{-2} \right]^{-1}$$

Разница энергий:

$$E^{(exc)} = (E_{N-1} - E_N) + \varepsilon_{\mathbf{p}_1} + \frac{2(N-1)}{2\varepsilon_{\mathbf{p}_1} - 2\varepsilon_{F_0} + \epsilon_c} \frac{\epsilon_c}{\rho_0}$$

- конкуренция между кинетической энергией «дефекта» и изменением энергий оставшихся пар!



$$2(\varepsilon_{\mathbf{p}_1} - \varepsilon_{F_0}) + \epsilon_c = \sqrt{4(N-1)\epsilon_c/\rho_0}$$

$$E^{(exc)} \sim [(\varepsilon_F - \varepsilon_{F_0}) \Omega]^{1/2} e^{-1/\rho_0 V}$$

(!)

щель типа БКШ

На самом деле, должно выполняться неравенство:

$$\sqrt{4(N-1)\epsilon_c/\rho_0} > \epsilon_c \implies N > \rho_0\epsilon_c/4$$

-Если не выполняется:

$$E^{(exc)} \approx \epsilon_c$$

Итак,

- в разреженном пределе выгодно поместить «дефект» как можно ниже. Энергия возбуждения контролируется энергией связи пары.
- в плотном пределе выгодно поместить «дефект» повыше. Появляется щель типа БКШ. Поведение системы становится коллективным. Щель типа БКШ – это многочастичный отклик системы.

Выводы

- Предложена интерпретация результатов теории БКШ в терминах «сверхтекучих», а не «виртуальных» пар. Преимуществом этого представления является простая связь между разреженным и плотным режимами.
- Предложен новый метод аналитического решения уравнений Ричардсона в *разреженном* пределе пар. Несмотря на это ограничение, полученное выражение для энергии основного состояния совпадает с результатом теории БКШ в *плотном* режиме.