УДК 519.2+517.983

О НОВОЙ МОДЕЛИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

В. П. Маслов

(*кафедра квантовой статистики и теории поля*)

E-mail: viktor_maslov@hotmail.com

В отличие от других работ автора по высокотемпературной сверхпроводимости в настоящей статье подробно рассмотрена точно решаемая задача и получена элементарная асимптотика, приводящая к сверхпроводимости. В приведенной модели наблюдается фазовый переход «нулевого рода», т. е. имеет место скачок свободной энергии в точке, где теплоемкость обращается в бесконечность. В работе используется аналогия с методом БКШ — короткодействующее притяжение электронов, близких по энергии.

Температура, при которой имеет место сверхпроводимость в рассматриваемых моделях, зависит от соотношения величины притяжения и расстояния между зонами. Приведен пример, который показывает, что, уменьшая расстояние между зонами при величине притяжения ≈ 0.01 эВ, можно достичь фазового перехода при $t^0 \sim 100$ К.

1. Точно решаемая модель низкотемпературной сверхпроводимости

В работах [1–3] приводится общая схема новой модели высокотемпературной сверхпроводимости, существенно отличающаяся от всех предложенных ранее. Здесь обнаруживается фазовый переход, названный автором фазовым переходом *нулевого рода*, при котором возникает скачок свободной энергии. Он происходит при переходе от одного уравнения состояний к другому, причем константы в свободных энергиях этих двух состояний согласованы. Для бозе-газа этот эффект объясняет по-новому эффект фонтанирования, открытый еще Дж. Алленом и Х. Джонсом в 1938 г. (см. [5–7]).

В настоящей работе мы приведем точно решаемую задачу сверхпроводимости в кристалле, полагая все ячейки кристаллической решетки прямоугольными.

Рассмотрим уравнение Шрёдингера для одной частицы, находящейся на окружности длины L во внешнем поле $U(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x), \tag{1}$$

где m — масса частицы, $\hbar$ — постоянная Планка, E — энергия частицы, $\psi(x)$ — волновая функция частицы. Так как частица находится на окружности, то будем считать, что функции $\psi(x)$ и $U(x)$ являются периодическими функциями с периодом L. Уравнению Шрёдингера (1) соответствует оператор в пространстве функций на окружности $L_2(T^1)$:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x). \tag{2}$$

Оператор (2) обычно называют гамильтонианом одной частицы. Далее рассмотрим случай, когда потенциал внешнего поля $U(x)$ является следующей функцией:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{при } \ 0 < x < b, \ b+a < x < 2b+a, \\ 0 & \text{при } \ b \leqslant x \leqslant b+a, \ 2b+a \leqslant x \leqslant L, \end{cases} \tag{3}$$

где U_0, a, b — некоторые положительные параметры, причем $2b+a < L$. Потенциал (3) представляет собой потенциальную яму, находящуюся между двумя потенциальными барьерами, далее будем называть U_0 высотой потенциального барьера, а b и a — шириной потенциального барьера и потенциальной ямы соответственно. Рассмотрим случай, когда $0 < E < U_0$, волновая функция $\psi(x)$ в этом случае имеет вид

$$\begin{aligned}
&\psi(x) = C_{0k}e^{ikx} + D_{0k}e^{-ikx} && \text{при } 2b+a-L \leqslant x \leqslant 0, \\
&\psi(x) = A_{1k}e^{i\eta_k x} + B_{1k}e^{-i\eta_k x} && \text{при } 0 \leqslant x \leqslant b, \\
&\psi(x) = {}_{1k}e^{ikx} + D_{1k}e^{-ikx} && \text{при } b \leqslant x \leqslant a+b, \\
&\psi(x) = A_{2k}e^{i\eta_k x} + B_{2k}e^{-i\eta_k x} && \text{при } b+a \leqslant x \leqslant 2b+a, \\
&\psi(x) = C_{2k}e^{ikx} + D_{2k}e^{-i\eta_k x} && \text{при } 2b+a \leqslant x \leqslant L,
\end{aligned} \tag{4}$$

где

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \tag{5}$$

$$\eta_k = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2} - k^2}; \tag{6}$$

кроме того, числовые коэффициенты A_{nk}, B_{nk}, C_{nk}, D_{nk} $(n = 0, 1, 2)$ определяются из условия непрерывности волновой функции (4) и ее производной в точках $x = 0$, $x = b$, $x = b+a$ и $x = 2b+a$, а также из условия периодичности функции (4) с периодом L. Условия непрерывности функции (4) и ее производной приводят к системе уравнений

$$C_{0k} + D_{0k} = A_{1k} + B_{1k},$$

$$ik(C_{0k} - D_{0k}) = \eta_k(A_{1k} - B_{1k}),$$

$$\begin{aligned}
&e^{\eta_k b}A_{1k}+e^{-\eta_k b}B_{1k}=e^{ikb}C_{1k}+e^{-ikb}D_{1k},\\
&\eta_k(e^{\eta_k b}A_{1k}-e^{-\eta_k b}B_{1k})=ik(e^{ikb}C_{1k}-e^{-ikb}D_{1k}),\\
&C_{1k}e^{ik(b+a)}+D_{1k}e^{-ik(b+a)}=\\
&\qquad=A_{2k}e^{\eta_k(b+a)}+B_{2k}e^{-\eta_k(b+a)},\\
&ik(C_{1k}e^{ik(b+a)}-D_{1k}e^{-ik(b+a)})=\\
&\qquad=\eta_k(A_{2k}e^{\eta_k(b+a)}-B_{2k}e^{-\eta_k(b+a)}),\\
&A_{2k}e^{\eta_k(2b+a)}+B_{2k}e^{-\eta_k(2b+a)}=\\
&\qquad=C_{2k}e^{ik(2b+a)}+D_{2k}e^{-ik(2b+a)},\\
&\eta_k(A_{2k}e^{\eta_k(2b+a)}-B_{2k}e^{-\eta_k(2b+a)})=\\
&\qquad=ik(C_{2k}e^{ik(2b+a)}-D_{2k}e^{-ik(2b+a)}),
\end{aligned}\tag{7}$$

а условие периодичности функции (4) приводит к уравнениям

$$C_{0k}=C_{2k}e^{ikL},\quad D_{0k}=D_{2k}e^{-ikL}.\tag{8}$$

Система уравнений (7) и система уравнений (8) вместе образуют однородную линейную систему уравнений. Условие разрешимости этой системы имеет вид

$$2-\alpha_k^2e^{ikL}-(\alpha_k^*)^2e^{-ikL}-2|\beta_k|^2\cos\left(k(L-2a-2b)\right)=0,\tag{9}$$

где

$$\alpha_k=e^{-ikb}\left(\cosh(\eta_k b)+\frac{i}{2}\left(\frac{k}{\eta_k}-\frac{\eta_k}{k}\right)\sinh(\eta_k b)\right),$$

$$\beta_k=e^{ikb}\frac{i}{2}\left(\frac{k}{\eta_k}+\frac{\eta_k}{k}\right)\sinh(\eta_k b).\tag{10}$$

Уравнение (9) не удовлетворяется тождественно для любых значений k, таким образом, согласно (5), это уравнение определяет дискретный спектр возможных значений энергии частицы в рассматриваемой задаче. Рассмотрим асимптотику спектра энергий частицы при $U_0\to\infty$. В этом предельном случае для любого фиксированного k, согласно (6), $\eta_k\to\infty$. Отсюда следует, что при $k>0$ для выражений (10) справедливы асимптотические равенства

$$\alpha_k\sim\beta_k^*\sim-e^{-ikb}\frac{i\eta_k}{2k}\sinh(\eta_k b).\tag{11}$$

Так как выражение в правой части равенств (11) стремится к бесконечности при $U_0\to\infty$, то для k, удовлетворяющих уравнению (9), должно выполняться

$$\cos(k(L-2b))\sim\cos(k(L-2a-2b)).\tag{12}$$

Из (12) следует, что в пределе при $U_0\to\infty$ решения уравнения (9) распадаются на две серии решений:

$$k_{1l}\sim\frac{\pi l}{a},\tag{13}$$

$$k_{2l}\sim\frac{\pi l}{L-a-2b},\tag{14}$$

где l — ненулевое целое число. Решениям (13), (14) уравнения (9) по формуле (5) соответствуют энергетические уровни

$$E_{1l}\sim\frac{\hbar^2\pi^2l^2}{2ma^2},\tag{15}$$

$$E_{2l}\sim\frac{\hbar^2\pi^2l^2}{2m(L-a-2b)^2}.\tag{16}$$

Используя формулы (4) и (7,8) с помощью простых, хотя и несколько громоздких вычислений, можно показать, что решения уравнения (1), соответствующие энергиям (15), (16), при $U_0\to\infty$ имеют предел

$$\lim_{U_0\to\infty}\psi_{1l}=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi l}{a}(x-b)\right)\\ \qquad\qquad\text{при } b\leqslant x\leqslant b+a,\\ 0\quad\text{при } 0\leqslant x\leqslant b,\ b+a\leqslant x\leqslant L,\end{cases}\tag{17}$$

$$\lim_{U_0\to\infty}\psi_{2l}=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{L-2b-a}}\sin\left(\frac{\pi l}{a}(x-2b-a)\right)\\ \qquad\qquad\text{при } 2b+a\leqslant x\leqslant L,\\ 0\qquad\qquad\text{при } 0\leqslant x\leqslant 2b+a.\end{cases}\tag{18}$$

Таким образом, при больших U_0 пространство L_2 функций на окружности можно представить в виде суммы двух подпространств. Первое подпространство состоит из решений уравнения (1), сходящихся в пределе к (15) и (17), а второе состоит из решений, сходящихся к (16) и (18). Указанные подпространства являются инвариантными подпространствами оператора (2). Введем теперь оператор парного взаимодействия между частицами $\widehat{V}$ следующим образом: будем считать, что 1) оператор взаимодействия коммутирует с суммой одночастичных гамильтонианов $\widehat{H}$ (2); 2) пара частиц с энергиями E и E' испускает квант энергии γ в случае, когда $|E-E'|<\delta E$, где γ и δE — положительные параметры размерности энергии; 3) пара частиц не взаимодействует между собой, если для их энергий выполняется условие $|E-E'|\geqslant\delta E$. Поскольку оператор взаимодействия коммутирует с суммой одночастичных гамильтонианов, то подпространство, состоящее из собственных функций первой серии, сходящихся в пределе при $U_0\to\infty$ к (15), (17), является инвариантным для оператора взаимодействия.

Рассмотрим систему из N частиц. Обозначим гамильтониан i-й частицы

$$\widehat{H_i}=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_i^2}+U(x_i)\tag{19}$$

(см. формулу (2)).

Общий гамильтониан невзаимодействующих N частиц имеет вид

$$\widehat{H}=\sum_{i=1}^N\widehat{H}_i.\tag{20}$$

Очевидно, что $\widehat{H_i}$ коммутируют между собой. Описанному выше взаимодействию между i-й и k-й частицами соответствует следующий оператор:

$$\widehat{V}_{ik} = -\gamma\Psi(\widehat{H_i} - \widehat{H_k}), \tag{21}$$

где $\Psi(z)$ — финитная функция, равная нулю при $|z| > \delta E$ и единице при $|z| < \delta E$. Далее рассматривается случай, когда для δE выполняется неравенство

$$\delta E < \frac{3\hbar^2\pi^2}{2ma^2}. \tag{22}$$

Кроме того, далее считаем, что γ зависит от N: $\gamma = V/N$, где $V > 0$. Очевидно, что оператор $\widehat{V}_{ik}$ коммутирует с оператором $\widehat{H}$. Гамильтониан системы N взаимодействующих частиц имеет вид

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{N}\widehat{H_i} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=i+1}^{N}\widehat{V}_{ij}. \tag{23}$$

Поскольку оператор взаимодействия коммутирует со свободным гамильтонианом, то собственные функции N-частичного гамильтониана являются антисимметризованным произведением N собственных функций одночастичного гамильтониана. Далее рассматривается подпространство, состоящее только из функций, соответствующих собственным значениям E_{1l} (15) при $l = 1, 2$. Соответствующие собственные значения N-частичного гамильтониана (23) имеют вид

$$\begin{gathered}\mathcal{E}(N_1, N_2) = E_{11}N_1 + E_{12}N_2 - \\ - \frac{V}{2N}\left(N_1(N_1-1) + N_2(N_2-1)\right),\end{gathered} \tag{24}$$

где N_1, N_2 — неотрицательные целые числа, удовлетворяющие условию

$$N_1 + N_2 = N. \tag{25}$$

Будем предполагать, что все уровни энергии ниже E_k не только заполнены электронами, но и все эти электроны находятся в стабильном состоянии. В метастабильном состоянии находятся только электроны верхнего заполненного уровня E_k (при температуре, равной нулю).

Однако описанная модель не дает достаточно высокой температуры фазового перехода, как и достаточно сильного тока.

2. Точно решаемая модель высокотемпературной сверхпроводимости

В этом разделе рассмотрим случай, когда потенциал внешнего поля $U(x)$ является следующей функцией:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < x < a,\ a+b < x < 2a+b, \\ U_1 & \text{при } a \leqslant x \leqslant a+b, \\ U_0 & \text{при } 2a+b \leqslant x \leqslant 2a+b+c, \end{cases} \tag{26}$$

где U_0, U_1, a, b, c — положительные параметры, для которых выполняется условие $2a + b + c = L$. Потенциал (26) соответствует случаю двух потенциальных ям ширины a, разделенных на окружности двумя энергетическими барьерами высоты U_1 и U_0 и ширины b и c. Далее будем говорить, что такой потенциал описывает частицу в *двойной потенциальной яме*. Уравнение (1) с потенциалом (26) имеет точное решение. Рассмотим случай, когда справеливы неравенства $E < U_0$, $E < U_1$. Тогда волновая функция, удовлетворяющая уравнению (1), имеет вид

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= A_1e^{ikx} + B_1e^{-ikx} && \text{при } 0 \leqslant x \leqslant a, \\
\psi(x) &= C_1e^{\eta_1 x} + D_1e^{-\eta_1 x} && \text{при } a \leqslant x \leqslant a+b, \\
\psi(x) &= A_2e^{ikx} + B_2e^{-ikx} && \text{при } a+b \leqslant x \leqslant 2a+b, \\
\psi(x) &= C_2e^{\eta_0 x} + D_2e^{-\eta_0 x} && \text{при } 2a+b \leqslant x \leqslant L,
\end{aligned} \tag{27}$$

где

$$\begin{gathered} k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \\ \eta_0 = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad \eta_1 = \sqrt{\frac{2m(U_1 - E)}{\hbar^2}}, \end{gathered} \tag{28}$$

а коэффициенты $A_{1,2}$, $B_{1,2}$, $C_{1,2}$, $D_{1,2}$ определяются из условий непрерывности функции (27) и ее производной в точках $x = 0$, $x = a$, $x = a + b$, $x = 2a + b$, а также из условия периодичности этой функции и ее производной. Условия непрерывности функции и ее производной принимают вид следующей системы уравнений:

$$\begin{aligned}
&A_1e^{ika} + B_1e^{-ika} = C_1e^{\eta_1 a} + D_1e^{-\eta_1 a}, \\
&ik(A_1e^{ika} - B_1e^{-ika}) = \eta_1(C_1e^{\eta_1 a} - D_1e^{-\eta_1 a}), \\
&A_2e^{ik(a+b)} + B_2e^{-ik(a+b)} = C_1e^{\eta_1(a+b)} + D_1e^{-\eta_1(a+b)}, \\
&ik(A_2e^{ik(a+b)} - B_2e^{-ik(a+b)}) = \\
&\qquad = \eta_1(C_1e^{\eta_1(a+b)} - D_1e^{-\eta_1(a+b)}), \\
&A_2e^{ik(2a+b)} + B_1e^{-ik(2a+b)} = \\
&\qquad = C_2e^{\eta_0(a+2b)} + D_2e^{-\eta_0(a+2b)}, \\
&ik(A_2e^{ik(2a+b)} - B_2e^{-ik(2a+b)}) = \\
&\qquad = \eta_0(C_2e^{\eta_0(a+2b)} - D_2e^{-\eta_0(2a+b)}),
\end{aligned} \tag{29}$$

а условие периодичнности функции и производной принимает вид

$$\begin{aligned}
&A_1 + B_1 = C_2e^{\eta_0 L} + D_2e^{-\eta_0 L}, \\
&ik(A_1 - B_1) = \eta_0(C_2e^{\eta_0 L} - D_2e^{-\eta_0 L}).
\end{aligned} \tag{30}$$

Система (29), (30) содержит восемь уравнений для определения семи коэффициентов, решения существуют при дискретных уровнях энергии E. В предельном случае, когда $U_0 = +\infty$, $U_1 = +\infty$, из системы (29), (30) следует, что энергетические уровни частицы имеют вид

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, \tag{31}$$

где $n = 1, 2, \ldots$, причем каждый уровень является в пределе двухкратно вырожденным — каждому соответствуют две волновые функции, удовлетворяющие уравнению (1):

$$\psi_{1n} = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right) & \text{при } 0 \leqslant x \leqslant a, \\ 0 & \text{при } x \leqslant 0,\ a \leqslant x, \end{cases}$$

$$\psi_{2n} = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n (x-a-b)}{a}\right) & \text{при } a+b \leqslant x \leqslant 2a+b, \\ 0 & \text{при } x \leqslant a+b,\ 2a+b \leqslant x. \end{cases} \tag{32}$$

В случае, когда U_0 и U_1 достаточно большие, но конечные, каждый энергетический уровень (31) расщепляется на два невырожденных, причем разность энергий этих уровней является малой величиной порядка

$$\min\left(\exp\left(-\frac{b\sqrt{2mU_1}}{\hbar}\right), \exp\left(-\frac{c\sqrt{2mU_0}}{\hbar}\right)\right). \tag{33}$$

Из (33) следует, что за счет выбора высот U_0 и U_1 потенциальных барьеров между потенциальными ямами в рассмотренной модели можно добиться сколь угодно малой разности между двумя энергетическими уровнями.

Рассмотрим теперь уравнение Шрёдингера (1), в котором потенциал внешнего поля $U(x)$ состоит из G *двойных ям*. В таком случае длина окружности равна $L = G(2a+b+c)$, кроме того, потенциал внешнего поля при $0 < x \leqslant (2a+b+c)$ выражается формулой (26), а на остальную окружность он распространяется равенством

$$U(x + 2a + b + c) = U(x). \tag{34}$$

В этом случае уравнение Шрёдингера также имеет точное решение. В силу свойства (34) гамильтониан одной частицы (3) коммутирует с оператором сдвига переменной x на величину $2a+b+c$. Это означает, что собственные функции гамильтониана являются функциями Блоха, т. е. для них выполняется условие

$$\psi(x + 2a + b + c) = e^{i\gamma_n}\psi(x), \tag{35}$$

где γ_n — действительное число вида $2\pi n/G$, $n = 0, 1, \ldots, G-1$. При $0 < x \leqslant 2a+b+c$ собственные функции имеют вид (27), числовые коэффициенты $A_{1,2}$, $B_{1,2}$, $C_{1,2}$, $D_{1,2}$ определяются из системы уравнений (29), а кроме того, из (35) следует, что уравнения (30) заменяются следующими уравнениями:

$$\begin{aligned} &e^{i\gamma}(A_1 + B_1) = C_2 e^{\eta_0 L} + D_2 e^{-\eta_0 L}, \\ &ike^{i\gamma}(A_1 - B_1) = \eta_0 (C_2 e^{\eta_0 L} - D_2 e^{-\eta_0 L}). \end{aligned} \tag{36}$$

На остальную окружность функция распространяется с отрезка $0 < x \leqslant 2a+b+c$ с помощью равенства (35). Будем далее считать, что $U_0 \gg U_1$. В таком случае каждому энергетическому уровню одной *двойной ямы* соответствует *энергетическая зона* из G состояний. Состояния внутри одной энергетической зоны естественно нумеруются числом $n = 0, 1, \ldots, G-1$, поскольку для соответствующих собственных функций выполняется условие (35). Заметим, что собственные функции с номером $n \neq 0$ соответствуют *токовым состояниям*, поскольку в силу (35) такие функции являются комплексными. Разности энергий состояний внутри одной зоны являются малыми величинами порядка

$$\frac{1}{N}\exp\left(-\frac{c\sqrt{2mU_0}}{\hbar}\right). \tag{37}$$

Учитывая (37) и выполнение условия $U_0 \gg U_1$, далее будем пренебрегать этими разностями и считать, что энергетические уровни частицы в G *двойных ямах* совпадают с энергетическими уровнями в одной *двойной яме* и являются G-кратно вырожденными.

Рассмотрим систему из N частиц. Обозначим гамильтониан i-й частицы

$$\widehat{H_i} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_i^2} + U(x_i) \tag{38}$$

(см. формулу (3)). Общий гамильтониан системы N невзаимодействующих частиц имеет вид

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{N} \widehat{H}_i. \tag{39}$$

Очевидно, что $\widehat{H_i}$ коммутируют между собой. Введем теперь оператор парного взаимодействия между частицами $\widehat{V}$ следующим образом: будем считать, что 1) оператор взаимодействия коммутирует с суммой одночастичных гамильтонианов $\widehat{H}$ (3); 2) пара частиц с энергиями E и E' испускает квант энергии γ в случае, когда $|E - E'| < \delta E$, где γ и δE — положительные параметры размерности энергии; 3) пара частиц не взаимодействует между собой, если для их энергий выполняется условие $|E - E'| \geqslant \delta E$. Такому взаимодействию между i-й и k-й частицами соответствует следующий оператор:

$$\widehat{V}_{ik} = -\gamma\Psi(\widehat{H_i} - \widehat{H_k}), \tag{40}$$

где $\Psi(z)$ — финитная функция, равная нулю при $|z| > \delta E$ и единице при $|z| < \delta E$. Кроме того, далее считаем, что γ зависит от N: $\gamma = V/N$, где $V > 0$. Очевидно, что оператор $\widehat{V}_{ik}$ коммутирует с оператором $\widehat{H}$. Гамильтониан системы N взаимодействующих частиц имеет вид

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{N} \widehat{H_i} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=i+1}^{N} \widehat{V}_{ij}. \tag{41}$$

Выберем два соседних энергетических уровня в двойной потенциальной яме, обозначим их через λ_1 и λ_2, причем будем считать, что $\lambda_1 < \lambda_2$. Далее рассмотрим случай, когда для δE выполняется неравенство

$$\delta E < \lambda_2 - \lambda_1. \tag{42}$$

Будем считать, что все частицы находятся в энергетических зонах, сосредоточенных около выбранных энергетических уровней двойной потенциальной ямы. Поскольку, как оговорено выше, мы пренебрегаем расщеплением уровней в зоны, а кроме того, накладываем условие (42), энергетические уровни такой системы из N фермионов имеют вид

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(N_1, N_2) = \lambda_1 N_1 + \lambda_2 N_2 - \\ - \frac{V}{2N}\left(N_1(N_1-1) + N_2(N_2-1)\right),\end{aligned} \tag{43}$$

где N_n — число электронов, находящихся на одночастичном уровне λ_n, эти числа удовлетворяют условию

$$N_1 + N_2 = N. \tag{44}$$

Поскольку рассматривается фермионная система, то кратность энергетических уровней (43) выражается формулой, приведенной в [4]:

$$\Gamma(N_1, N_2) = \frac{G!}{N_1!(G-N_1)!}\frac{G!}{N_2!(G-N_2)!}. \tag{45}$$

Свободная энергия системы фермионов при температуре θ имеет вид

$$F_\theta(N_1, N_2) = \mathcal{E}(N_1, N_2) - \theta \ln\left(\Gamma(N_1, N_2)\right). \tag{46}$$

Далее будем считать, что выполняется условие

$$0 < V < \lambda_2 - \lambda_1. \tag{47}$$

Рассмотрим точки минимума функции (46) при условии (44) в предельном случае, когда $N \to \infty$, а G зависит от N так, что

$$\lim_{N\to\infty}\frac{G}{N} = g > 1. \tag{48}$$

В таком случае элементарное исследование показывает, что при $\theta = 0$ в силу (47) функция (46) имеет два минимума: глобальный минимум достигается при

$$N_2 = 0, \quad N_1 = N, \tag{49}$$

а локальный — при

$$N_1 = 0, \quad N_2 = N. \tag{50}$$

В случае, когда $\theta > 0$, точки минимума свободной энергии в пределе при $N \to \infty$ имеют вид $N_1 \approx Nn(\theta)$, $N_2 \approx N(1 - n(\theta))$, где $n(\theta)$ определяется из следующего уравнения:

$$\lambda_1 - \lambda_2 + V(1-2n) + \theta \ln\left(\frac{n}{g-n}\frac{g-1+n}{1-n}\right). \tag{51}$$

Решение уравнения (51) невозможно выписать в явном виде, однако его можно найти численно. Автором было проведено подробное исследование свойств решений этого уравнения. При достаточно малых значениях температуры θ это уравнение имеет три решения, два из которых соответствуют глобальному и локальному минимумам функции (46) при условии (44), и в пределе при $\theta \to 0$ приводят к (49), (50). Третье решение соответствует точке условного максимума функции (46). При $\theta \to 0$ асимптотика решения, отвечающего глобальному минимуму свободной энергии (46) и сходящегося к (49), имеет вид

$$n(\theta) \approx 1 - \frac{g}{g-1}\exp(-(\lambda_2 - \lambda_1 + V)/\theta), \tag{52}$$

а асимптотика решения, соответствующего локальному минимуму и сходящегося к (50), имеет вид

$$n(\theta) \approx \frac{g}{g-1}e^{-(\lambda_1 - \lambda_2 + V)/\theta}. \tag{53}$$

Исследование решений уравнения (51) показывает также, что при достаточно больших значениях температуры θ существует только одно решение, соответствующее единственному минимуму функции (46) при условии (44). Асимптотика этого решения при $\theta \to \infty$ имеет вид

$$n(\theta) \approx \frac{1}{2} + \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\theta}\frac{2g-1}{8g}. \tag{54}$$

Разное число решений уравнения (51) при разных значениях температуры θ означает, что при некотором критическом значении температуры θ_c происходит исчезновение локального условного минимума функции (46). Такому исчезновению локального минимума соответствует фазовый переход нулевого рода, при котором терпит разрыв свободная энергия. Критическая температура определяется из уравнения

$$\frac{1}{n_0} + \frac{1}{g-n_0} + \frac{1}{g-1+n_0} + \frac{1}{1-n_0} = \frac{2V}{\theta_c}, \tag{55}$$

где n_0 — решение уравнения (51) при $\theta = \theta_c$.

В заключение покажем, что минимумам функции (46) на самом деле соответствуют метастабильные состояния. Собственным значениям (43) N-частичного гамильтониана соответствуют следующие собственные функции:

$$\Phi_{i_1\ldots i_N}(x_1, \ldots, x_N) = \mathrm{Asymm}\left(\varphi_{i_1}(x_1)\ldots\varphi_{i_N}(x_N)\right), \tag{56}$$

где $\varphi_i(x)$ при $i = 1, \ldots, 2G$ — собственные функции одночастичного гамильтониана, отвечающие двум рассматриваемым уровням, а Asymm — оператор антисимметризации по переменным $x_1, \ldots, x_N$. Функции $\varphi_i(x)$ и $\varphi_j(x)$ ортогональны, если $i \neq j$. Кроме того, функции $\varphi_i(x)$ при $i = 1, \ldots, G$ соответствуют состояниям электрона с энергией λ_1, а при $i = G+1, \ldots, 2G$ эти функции отвечают состояниям с энергией λ_2. Каждой функции (56) сопоставим набор чисел n_i, $i = 1, \ldots, 2G$:

$$n_i(i_1, \ldots, i_N) = \sum_{s=1}^{2G}\delta_{ii_s}, \tag{57}$$

где δ_{ij} — символ Кронекера, а также

$$N_1(i_1, \dots, i_N) = \sum_{i=1}^{G} n_i(i_1, \dots, i_N),$$
$$N_2(i_1, \dots, i_N) = \sum_{i=G+1}^{2G} n_i(i_1, \dots, i_N). \tag{58}$$

Собственное значение, соответствующее функции (56), выражается через (58) по формуле (43). Рассмотрим оператор, который действует на N-частичные функции следующим образом:

$$(\widehat{A}\Phi)(x_1, \dots, x_N) = = \sum_{1 \leqslant a_1 \neq a_2 \neq \dots \neq a_k \leqslant N} A(x_{a_1}, \dots, x_{a_k}) \Phi(x_1, \dots, x_N), \tag{59}$$

где число k удовлетворяет условию $1 \leqslant k \leqslant N$. Оператор $\widehat{A}$ является частным случаем k-частичного оператора. Матричные элементы таких операторов на собственных функциях (56) обладают следующим важным свойством:

$$\int \dots \int dx_1 \dots dx_N \Phi^*_{l_1 \dots l_N}(x_1, \dots, x_N) \times \times \left(\widehat{A}\Phi_{j_1 \dots j_N}\right)(x_1, \dots, x_N) = 0, \tag{60}$$

если для функций $\Phi_{l_1 \dots l_N}$, $\Phi_{j_1 \dots j_N}$ справедливо неравенство

$$\sum_{i=1}^{2G} |n_i(l_1, \dots, l_N) - n_i(j_1, \dots, j_N)| > 2k. \tag{61}$$

Это свойство следует из ортогональности функций φ_i с разными номерами i непосредственно из рассмотрения матричного элемента (60) для оператора вида (59) и функций (56). В силу определения (58) справедливо неравенство

$$|N_1(j_1, \dots, j_N) - N_1(l_1, \dots, l_N)| + + |N_2(j_1, \dots, j_N) - N_2(l_1, \dots, l_N)| < < \sum_{i=1}^{2G} |n_i(l_1, \dots, l_N) - n_i(j_1, \dots, j_N)|, \tag{62}$$

поэтому (60) также справедливо, если выполняется неравенство

$$|N_1(j_1, \dots, j_N) - N_1(l_1, \dots, l_N)| + + |N_2(j_1, \dots, j_N) - N_2(l_1, \dots, l_N)| > k. \tag{63}$$

Указанное свойство имеет место для любого k-частичного оператора, не обязательно являющегося оператором умножения, как оператор (59). Заметим теперь, что для точек N_n^g и N_n^l соответственно глобального и локального минимумов функции (46) при $N \to \infty$ выражение

$$|N_1^g - N_1^l| + |N_2^g - N_2^l| \tag{64}$$

есть величина порядка N. Отсюда в силу указанного свойства собственных функций N-частичного гамильтониана следует, что перейти из состояния локального минимума в состояние глобального минимума система может только под действием k-частичных операторов, для которых $k \sim N$. Это означает, что локальный минимум является устойчивым по отношению к возмущениям k-частичными операторами с $k \sim 1$, т. е. локальному минимуму соответствует метастабильное состояние.

Литература

1. *Маслов В.П.* // Мат. заметки. 2003. **73**, № 6. С. 942.
2. *Маслов В.П.* // ДАН. 2003. **391**, № 5. С. 605.
3. *Маслов В.П.* // Функц. анализ и его приложения. 2003. **37**, № 2. С. 16.
4. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М., 1976.
5. *Маслов В.П.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2003. № 1. С. 3 (Moscow University Phys. Bull. 2003. N 1. P. 1).
6. *Маслов В.П.* // ДАН. 2003. **89**, № 4. С. 468.
7. *Маслов В.П.* // ТМФ. 2003. **135**, № 3. С. 524.
8. *Маслов В.П.* // ДАН. 2004. **397**, № 6. С. 755.
9. *Маслов В.П.* // ДАН. 2004. **398**, № 3. С. 323.
10. *Maslov V.P.* // Russian J. Math. Phys. 2004. **11**, N 2. P. 199.

Поступила в редакцию
16.11.04