

Если принять во внимание (Н.11), то неравенство (Н.12) примет вид:

$$\frac{4n_0^{1/3}}{a_0} < \frac{1}{a_0^2};$$

или, поскольку  $n_0 = 1/a^3$ , мы получим диэлектрик, когда

$$a > 4a_0. \quad (\text{Н.13})$$

Видно, что полученное этим путем условие весьма близко к результату (Н.8).

**Модель экситонного состояния Нокса.** Экситоны в полупроводниках с непрямой энергетической щелью рассмотрел Нокс (см. его книгу [15]). Энергия образования экситона равна  $E_g - E_B$ , где  $E_B$  — энергия связи экситона. Для водородной модели экситона (см. гл. 18) имеем:

$$E_B = \mu e^4 / 2\epsilon^2 \hbar^2, \quad (\text{Н.14})$$

где  $\mu$  — приведенная масса электронно-дырочной пары, определяемая соотношением

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h}, \quad (\text{Н.15})$$

а  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость. Для непрямой энергетической щели величины  $\mu$  и  $\epsilon$  мало чувствительны к ширине щели, но они сильно от нее зависят в случае прямой энергетической щели. Разумно предположить, что под действием давления ширина  $E_g$  непрямой щели может уменьшиться и стать сколь угодно малой, тогда как  $E_B$  остается конечной величиной. Когда  $E_g$  станет меньше  $E_B$ , энергия, необходимая для образования экситона, окажется отрицательной и нормальное основное состояние кристалла по отношению к образованию экситонов будет неустойчивым.

## І. ВЕКТОРНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ С ИМПУЛЬСОМ ПОЛЯ, КАЛИБРОВОЧНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ И КВАНТОВАНИЕ ОРБИТ

Это приложение включено в книгу, во-первых, потому, что нелегко найти в литературе достаточно хорошее описание магнитного векторного потенциала, и, во-вторых, потому, что нам оно необходимо для изложения теории сверхпроводимости. Может показаться загадочным, что гамильтониан частицы в магнитном поле имеет вид

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2M} \left( \mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + Q\phi, \quad (\text{I.1})$$

где  $Q$  — заряд,  $M$  — масса,  $\mathbf{A}$  — векторный потенциал,  $\phi$  — электростатический (скалярный) потенциал [вывод формулы для  $\mathcal{H}$  дается ниже, см. (I.18)]. Выражение (I.1) справедливо как в классической, так и в квантовой механике. Поскольку статическое магнитное поле не изменяет кинетической энергии частицы, может показаться неожиданным, что в гамильтониане входит векторный потенциал магнитного поля. Однако, как мы увидим ниже, это легко объяснить, поскольку импульс  $\mathbf{p}$  представляет собой сумму двух членов: первый член — это знакомое нам количество движения,

$$\mathbf{p}_{\text{kin}} = M\mathbf{v}, \quad (\text{I.2})$$

а второй член — это потенциальный импульс, или импульс поля:

$$\mathbf{p}_{\text{field}} = \frac{Q}{c} \mathbf{A} \quad (1.3)$$

Таким образом, полный импульс

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_{\text{kin}} + \mathbf{p}_{\text{field}} = M\mathbf{v} + \frac{Q}{c} \mathbf{A}. \quad (1.4)$$

Теперь, имея в виду (1.4), запишем кинетическую энергию:

$$\frac{1}{2} Mv^2 = \frac{1}{2M} (Mv)^2 = \frac{1}{2M} \left( \mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} \right)^2. \quad (1.5)$$

Векторный потенциал <sup>1)</sup>  $\mathbf{A}$  связан с магнитным полем  $\mathbf{B}$  известным соотношением

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}. \quad (1.6)$$

Будем считать, что мы имеем дело с немагнитным материалом и поэтому нет необходимости различать  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{H}$ .

**Уравнения движения Лагранжа.** Согласно предписаниям классической механики, чтобы найти гамильтониан, мы сначала должны выписать лагранжиан. В обобщенных координатах для лагранжиана имеем следующее выражение:

$$L = \frac{1}{2} M\dot{q}^2 - Q\varphi(\mathbf{q}) + \frac{Q}{c} \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}). \quad (1.7)$$

Сейчас мы увидим, что это — правильное выражение для  $L$ , ибо оно приводит к правильным уравнениям движения заряженной частицы при наличии одновременно и электрического, и магнитного полей.

Запишем уравнения движения Лагранжа в декартовых координатах:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad (1.8)$$

и аналогично для осей  $y$  и  $z$ . Пользуясь (1.7), найдем необходимые производные:

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -Q \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{Q}{c} \left( \dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_y}{\partial x} + \dot{z} \frac{\partial A_z}{\partial x} \right), \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = M\dot{x} + \frac{Q}{c} A_x, \quad (1.10)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = M\ddot{x} + \frac{Q}{c} \frac{dA_x}{dt} = M\ddot{x} + \frac{Q}{c} \left( \frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_x}{\partial y} + \dot{z} \frac{\partial A_x}{\partial z} \right). \quad (1.11)$$

Итак, уравнение (1.8) примет вид:

$$M\ddot{x} + Q \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{Q}{c} \left[ \frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{y} \left( \frac{\partial A_x}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial x} \right) + \dot{z} \left( \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right] = 0, \quad (1.12)$$

или

$$M \frac{d^2 x}{dt^2} = QE_x + \frac{Q}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]_x. \quad (1.13)$$

<sup>1)</sup> Элементарная трактовка векторного потенциала дана в учебнике Парселла [16].

где

$$E_x = -\frac{\partial\varphi}{\partial x} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t}, \quad (\text{I.14})$$

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} \quad (\text{I.15})$$

В правой части уравнения (I.13), как легко заметить, стоит выражение для силы Лорентца. Этот факт подтверждает правильность выбора лагранжиана в форме (I.7). Заметим также, что согласно (I.14) электрическое поле  $\mathbf{E}$  состоит из двух частей: первая определяется электростатическим потенциалом  $\varphi$ , а вторая — производной по времени от магнитного векторного потенциала  $\mathbf{A}$ .

**Вывод гамильтониана.** Импульс  $\mathbf{p}$  определяется как производная лагранжиана по  $\dot{\mathbf{q}}$ :

$$\mathbf{p} \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = M\dot{\mathbf{q}} + \frac{Q}{c} \mathbf{A} \quad (\text{I.16})$$

Это выражение находится в согласии с (I.4). Гамильтониан  $\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  определяется, как известно, соотношением:

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \equiv \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - L. \quad (\text{I.17})$$

Раскрывая правую часть, получим:

$$\mathcal{H} = M\dot{\mathbf{q}}^2 + \frac{Q}{c} \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{A} - \frac{1}{2} M\dot{\mathbf{q}}^2 + Q\varphi - \frac{Q}{c} \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{2M} \left( \mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + Q\varphi. \quad (\text{I.18})$$

**Импульс поля.** Импульс в электромагнитном поле, сопутствующий частице, движущейся в магнитном поле, определяется интегралом по объему от вектора Пойнтинга:

$$\mathbf{p}_{\text{field}} = \frac{1}{4\pi c} \int dV \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (\text{I.19})$$

Мы работаем в нерелятивистском приближении, т.е. считаем, что скорость частицы  $v \ll c$ . При малых значениях отношения  $v/c$  мы можем считать, что поле  $\mathbf{B}$  обусловлено лишь внешними источниками, а поле  $\mathbf{E}$  создается лишь зарядом частицы. Если заряд  $Q$  находится в точке  $\mathbf{r}'$ , то

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi, \quad \nabla^2\varphi = -4\pi Q \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (\text{I.20})$$

Следовательно, для импульса  $\mathbf{p}_{\text{field}}$  имеем:

$$\mathbf{p}_{\text{field}} = -\frac{1}{4\pi c} \int dV \nabla\varphi \times \text{rot } \mathbf{A}. \quad (\text{I.21})$$

Используя стандартное векторное тождество для  $\nabla\varphi \times \text{rot } \mathbf{A}$ , получим:

$$\int dV \nabla\varphi \times \text{rot } \mathbf{A} = - \int dV [\mathbf{A} \times \text{rot}(\nabla\varphi) - \mathbf{A} \text{ div } \nabla\varphi - (\nabla\varphi) \text{ div } \mathbf{A}]. \quad (\text{I.22})$$

Но, поскольку  $\text{rot}(\nabla\varphi) = 0$ , мы всегда можем выбрать калибровку так, чтобы  $\text{div } \mathbf{A} = 0$ . Эта калибровка называется поперечной.

Итак, имеем:

$$\mathbf{p}_{\text{field}} = -\frac{1}{4\pi c} \int dV \mathbf{A} \nabla^2\varphi = \frac{1}{c} \int dV \mathbf{A} Q \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{Q}{c} \mathbf{A}. \quad (\text{I.23})$$

Этот результат раскрывает смысл вклада поля в полный импульс:

$$\mathbf{p} = M\mathbf{v} + Q\mathbf{A}/c$$

**Калибровочное преобразование.** Пусть мы имеем уравнение Шредингера  $\mathcal{H}\psi = \varepsilon\psi$ , где

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2M} \left( \mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} \right)^2. \quad (1.24)$$

Произведем следующее калибровочное преобразование от  $\mathbf{A}$  к  $\mathbf{A}'$ :

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi, \quad (1.25)$$

где  $\chi$  — скалярная функция. Очевидно, что  $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} = \text{rot } \mathbf{A}'$ , ибо  $\text{rot } (\nabla\chi) \equiv 0$ . Тогда уравнение Шредингера примет вид:

$$\frac{1}{2M} \left( \mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A}' + \frac{Q}{c} \nabla\chi \right)^2 \psi = \varepsilon\psi. \quad (1.26)$$

Поставим вопрос: какая волновая функция  $\psi'$  удовлетворяет уравнению вида

$$\frac{1}{2M} \left( \mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A}' \right)^2 \psi' = \varepsilon\psi', \quad (1.27)$$

где собственные значения  $\varepsilon$  — те же, что и уравнения для  $\psi$ ? Уравнение (1.27) эквивалентно уравнению

$$\frac{1}{2M} \left( \mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} - \frac{Q}{c} \nabla\chi \right)^2 \psi' = \varepsilon\psi'. \quad (1.28)$$

Попробуем положить

$$\psi' = \left( \exp \frac{iQ\chi}{\hbar c} \right) \psi. \quad (1.29)$$

Тогда

$$\mathbf{p}\psi' = \left( \exp \frac{iQ\chi}{\hbar c} \right) \mathbf{p}\psi + \frac{Q}{c} (\nabla\chi) \left( \exp \frac{iQ\chi}{\hbar c} \right) \psi;$$

следовательно,

$$\left( \mathbf{p} - \frac{Q}{c} \nabla\chi \right) \psi' = \left( \exp \frac{iQ\chi}{\hbar c} \right) \mathbf{p}\psi$$

и

$$\begin{aligned} \frac{1}{2M} \left( \mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} - \frac{Q}{c} \nabla\chi \right)^2 \psi' &= \\ &= \left( \exp \frac{iQ\chi}{\hbar c} \right) \frac{1}{2M} \left( \mathbf{p} - \frac{Q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi = \left( \exp \frac{iQ\chi}{\hbar c} \right) \varepsilon\psi. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Мы показали, что волновая функция

$$\psi' = \left( \exp \frac{iQ\chi}{\hbar c} \right) \psi$$

удовлетворяет уравнению Шредингера после калибровочного преобразования (1.25). Энергия  $\varepsilon$  — инвариант этого преобразования. Калибровочное преобразование векторного потенциала просто изменяет локальную фазу волновой функции. Можно поэтому записать:

$$\psi'^* \psi' = \psi^* \psi, \quad (1.31)$$

откуда видно, что и плотность заряда является инвариантом калибровочного преобразования.

**Калибровка уравнения Лондонов.** В силу уравнения непрерывности для потока электрического заряда в сверхпроводнике должно выполняться условие:

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = 0.$$

Отсюда следует, что в уравнении Лондонов  $\mathbf{j} = -c\mathbf{A}/4\pi\lambda_L^2$  для  $\mathbf{A}$  имеем:

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0. \quad (I.32)$$

Очевидно, что через границу сверхпроводник — вакуум ток не идет. Нормальная компонента тока (перпендикулярная к поверхности образца) должна обращаться в нуль, т. е.  $j_n = 0$ ; следовательно, для векторного потенциала  $\mathbf{A}$  в уравнении Лондонов должно выполняться условие:

$$A_n = 0. \quad (I.33)$$

Калибровка векторного потенциала в уравнении Лондонов для сверхпроводника должна выбираться так, чтобы удовлетворялись условия (I.32) и (I.33).

**Квантование орбит в магнитном поле.** Для рассмотрения эффекта де Хааза — ван Альфена мы предполагаем, что орбита частицы с зарядом  $Q$  в магнитном поле квантуется и набор разрешенных орбит дается формулой Бора — Зоммерфельда:

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = (n + \gamma) 2\pi\hbar, \quad (I.34)$$

где  $n$  — целое число,  $\gamma$  — фазовая поправка, которая для свободного электрона равна  $1/2$ . Запишем выражение (I.4) для импульса в виде:

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} + \frac{Q}{c} \mathbf{A}, \quad (I.35)$$

где  $\hbar\mathbf{k}$  — кинетический импульс частицы,  $\mathbf{A}$  — векторный потенциал магнитного поля. Тогда

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \int \hbar\mathbf{k} \cdot d\mathbf{r} + \frac{Q}{c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}. \quad (I.36)$$

Уравнение движения частицы с зарядом  $Q$  в магнитном поле запишется в виде

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{Q}{c} \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B}. \quad (I.37)$$

Интегрирование этого уравнения по времени дает соотношение:

$$\hbar\mathbf{k} = \frac{Q}{c} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \quad (I.38)$$

(здесь опущена произвольная постоянная, которая не дает вклада в окончательный результат). Вычислим первый контурный интеграл в (I.36):

$$\oint \hbar\mathbf{k} \cdot d\mathbf{r} = \frac{Q}{c} \oint \mathbf{r} \times \mathbf{B} \cdot d\mathbf{r} = -\frac{Q}{c} \mathbf{B} \cdot \oint \mathbf{r} \times d\mathbf{r} = -\frac{2Q}{c} \Phi. \quad (I.39)$$

Здесь  $\Phi$  — магнитный поток, пересекающий орбиту в обычном пространстве. Мы использовали геометрический результат:

$$\oint \mathbf{r} \times d\mathbf{r} = 2 \times (\text{площадь, охватываемая орбитой}). \quad (I.40)$$

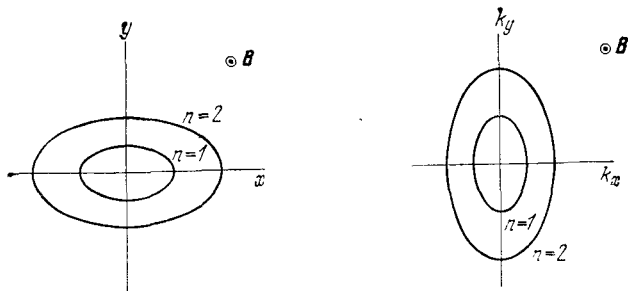


Рис. 1.1. Орбиты электрона в магнитном поле в обычном координатном пространстве (слева) и в пространстве волновых векторов (справа). В приведенном здесь случае  $\gamma = 0$ . Поток через внутреннюю орбиту (в координатном пространстве) равен  $2\pi\hbar c/e$ .

Вычислим теперь, воспользовавшись теоремой Стокса, второй контурный интеграл в (1.36):

$$\frac{Q}{c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \frac{Q}{c} \int \text{rot } \mathbf{A} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = \frac{Q}{c} \int \mathbf{B} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = \frac{Q}{c} \Phi; \quad (1.41)$$

здесь  $d\boldsymbol{\sigma}$  — элемент поверхности в обычном пространстве. Имея в виду (1.34), получим:

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = -\frac{Q}{c} \Phi = (n + \gamma) 2\pi\hbar. \quad (1.42)$$

Таким образом, орбита электрона квантуется точно так же, как и поток через площадь орбиты, т. е.

$$\boxed{\Phi_n = (n + \gamma) \frac{2\pi\hbar c}{e}}. \quad (1.43)$$

Мы вернемся к этому результату в Приложении J.

Величину кванта потока удобно выразить через постоянную тонкой структуры  $e^2/\hbar c$ :

$$\frac{2\pi\hbar c}{e} = 2\pi e \frac{\hbar c}{e^2} = 2\pi e (137,04) = 4,14 \cdot 10^{-7} \text{ Гс} \cdot \text{см}^2. \quad (1.44)$$

Для теории эффекта де Хааза — ван Альфена нам нужна площадь орбиты в пространстве волновых векторов. Мы уже получили в (1.43) поток через орбиту в обычном пространстве. Из (1.37) мы знаем, что элемент длины  $\Delta r$  в плоскости, нормальной к  $\mathbf{B}$ , связан с  $\Delta k$  соотношением

$$\Delta r = \frac{\hbar c}{eB} \Delta k, \quad (1.45)$$

и, следовательно, площадь  $S_n$  в  $\mathbf{k}$ -пространстве связана с площадью  $A_n$  орбиты в обычном  $\mathbf{r}$ -пространстве соотношением

$$A_n = \left( \frac{\hbar c}{eB} \right)^2 S_n. \quad (1.46)$$

Отсюда с учетом (I.43) для  $\Phi_n$  имеем:

$$\Phi_n = \left( \frac{\hbar c}{e} \right)^2 \frac{1}{B} S_n = (n + \gamma) \frac{2\pi\hbar c}{e}. \quad (\text{I. 47})$$

Наконец, получаем, что площади орбит в  $\mathbf{k}$ -пространстве удовлетворяют следующему соотношению:

$$S_n = (n + \gamma) \frac{2\pi e}{\hbar c} B. \quad (\text{I. 48})$$

Этот результат был получен Онсагером и И. М. Лифшицем. В качестве примера на рис. I.1 показаны две орбиты.

## I. КВАНТОВАНИЕ ПОТОКА В СВЕРХПРОВОДЯЩЕМ КОЛЬЦЕ

Мы приведем здесь доказательство того, что полный магнитный поток, проходящий через сверхпроводящее кольцо, может принимать лишь дискретные значения, кратные кванту потока, равному  $2\pi\hbar c/q$ , где согласно экспериментальным данным заряд  $|q| = 2e$ . Этот результат подтверждает, что сверхпроводящее состояние возникает благодаря спариванию электронов. Квантование потока — красивый пример макроскопического проявления квантового эффекта. В этом случае, так сказать, когерентность сверхпроводящего состояния охватывает все кольцо или всю обмотку соленоида.

Электромагнитное поле служит примером бозонного поля. Напряженность электрического поля  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  можно качественно трактовать как амплитуду поля. Плотность энергии в квазиклассическом приближении можно записать в виде

$$\frac{1}{4\pi} \mathbf{E}^*(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) \approx n(\mathbf{r}) \hbar\omega,$$

где  $n(\mathbf{r})$  — число фотонов частоты  $\omega$  на единицу объема. Предположим, что полное число фотонов в объеме велико по сравнению с единицей. Тогда для амплитуды можно записать выражение:

$$E(\mathbf{r}) \approx (4\pi\hbar\omega)^{1/2} [n(\mathbf{r})]^{1/2} e^{i\theta(\mathbf{r})}, \quad E^*(\mathbf{r}) \approx (4\pi\hbar\omega)^{1/2} [n(\mathbf{r})]^{1/2} e^{-i\theta(\mathbf{r})},$$

где  $\theta(\mathbf{r})$  — фаза поля. Введем теперь для описания бозонов, как частиц, амплитуды вероятностей, однако частицами будем считать электронные пары. (Здесь полной аналогии с фотонами уже нет, но эта аналогия еще полезна.)

Основное состояние сверхпроводника построено из слабо связанных электронных пар, называемых куперовскими парами. Электронная пара будет вести себя как бозон<sup>1)</sup>, хотя отдельный электрон является фермионом. Приведенные соображения применимы к бозонному газу при очень большом числе

<sup>1)</sup> Температура конденсации бозонов, вычисленная для концентраций электронов, типичных для металлов, порядка температуры Ферми, т. е.  $10^4$ — $10^5$  °К. Температура перехода из сверхпроводящего состояния в нормальное во много раз меньше; при температуре перехода каждая электронная пара распадается на два фермиона. Модель сверхпроводника в виде системы из невзаимодействующих бозонов не следует понимать слишком буквально, поскольку объем, приходящийся на одну куперовскую пару, содержит около  $10^6$  электронов.