Физика низких температур, 1996, т. 22, № 4, с. 402–419 УДК 538.945

О самосогласованном описании коллективных состояний электронов проводимости в кристаллах

Ю. М. Полуэктов

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт», Украина, 310108, г. Харьков, ул. Академическая, 1
E-mail:kfti@kfti.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 8 сентября 1995 г., после переработки 1 ноября 1995 г.

На основе метода Хартри—Фока—Боголюбова развит единый подход к описанию сверхпроводимости и магнитных явлений в металлах с учетом симметрии их кристаллической решетки. Получена система самосогласованных уравнений, учитывающая сверхпроводящие корреляции электронов синглетного и триплетного типов и магнитные свойства электронной жидкости. Дана классификация возможных типов решений полученных уравнений. Показано, что уравнения предлагаемой теории могут быть сформулированы в виде соотношений теории ферми-жидкости, обобщенной с учетом сверхпроводящих корреляций, а фермижидкостные параметры выражены через решения самосогласованных уравнений, а также потенциалы электронионного и межэлектронного взаимодействий. Исследованы свойства симметрии системы самосогласованных уравнений относительно преобразований пространственных групп и инверсии времени. Рассмотрены частные решения, описывающие сверхпроводящее состояние с синглетным спариванием и ферромагнетизм коллективизированных электронов.

На основі методу Хартрі—Фока—Боголюбова запропоновано єдиний підхід до опису надпровідності і магнітних явищ в металах з урахуванням симетрії їх кристалічної гратки. Знайдено систему самоузгоджених рівнянь, що ураховує надпровідні кореляції електронів синглетного та триплетного типів і магнітні властивості електронної рідини. Здійснено класифікацію можливих типів розв'язків знайдених рівнянь. Показано, що рівняння запропонованої теорії можуть бути сформульовані у вигляді співвідношень теорії фермі-рідини, узагальненої з урахуванням надпровідних кореляцій, а фермірідинні параметри розраховано через рішення самоузгоджених рівнянь, а також потенціали електрон-іонної та міжелектронної взаємодій. Досліджено властивості симетрії системи самоузгоджених рівнянь відносно перетворень просторових груп та інверсії часу. Розглянуто часткові розв'язки, що описують надпровідний стан з синглетними парами і феромагнетизм колективізованих електронів.

1. Введение

Коллективные явления в системе электронов проводимости в кристаллах, наиболее яркие из которых магнетизм и сверхпроводимость, обусловлены межэлектронным взаимодействием. В силу этого одноэлектронное приближение, хорошо работающее при описании многих свойств нормальных слабомагнитных металлов, для теоретического исследования кооперативных эффектов принципиально не пригодно и изначально необходим хотя бы частичный учет электрон-электронного взаимодействия. Достаточно эффективным способом учета взаимодействия между электронами является подход, развитый Хартри [1] и Фоком [2,3] и распространенный на системы со сверхпроводящими корреляциями Боголюбовым [4,5]. Применению метода Хартри—Фока и его модификаций к расчету физических, в том числе и магнитных, свойств атомов, молекул и кристаллов посвящена монография Слэтера [6]. Основы метода самосогласованного поля в применении к сверхпроводникам с синглетным спариванием изложены в [7,8]. Как показано в [9], хартри-фоковский подход может быть применен для теоретического исследования свойств нормальных металлов с учетом их кристаллической симметрии при отличных от нуля температурах.

В данной работе на основе приближения Хартри—Фока—Боголюбова (ХФБ) развит единый подход к описанию магнитных и сверхпроводящих состояний электронов проводимости, учитывающий кристаллическую структуру материала. Во втором разделе статьи выведена система самосогласованных уравнений, позволяющая исследовать электронную жидкость как в намагниченном состоянии, так и в сверхпроводящем состоянии с синглетными и (или) триплетными куперовскими парами. Приведены различные формы записи полученной системы. Показано, что уравнения могут быть представлены в виде соотношений теории ферми-жидкости, обобщенной с учетом сверхпроводящих корреляций [10,11], а фермижидкостные параметры выражены через решения самосогласованных уравнений. В третьем разделе исследовано влияние симметрии кристаллической решетки относительно поворотов и трансляций на состояния

© Ю. М. Полуэктов, 1996

взаимодействующих электронов, а в четвертом — роль симметрии относительно обращения времени. В разд. 5 приведена классификация возможных типов решений самосогласованных уравнений: магнитных, сверхпроводящих и описывающих сосуществование сверхпроводимости и магнетизма. В шестом разделе рассмотрено частное решение, описывающее сверхпроводимость с синглетным спариванием. Показано, что из этого решения может быть получен как однозонный вариант теории Бардина—Купера—Шриффера (БКШ) [12], так и ее обобщение на многозонную ситуацию [13,14]. В разделе семь рассмотрено еще одно частное решение, отвечающее ферромагнитному состоянию коллективизированных электронов. Это решение приводит к уравнениям, предложенным Стонером [15] для описания ферромагнетизма электронов проводимости, или к уравнениям, описывающим ферромагнитное состояние ферми-жидкости в рамках теории Ландау [16,17] (см. также [18]).

2. Вывод системы самосогласованных уравнений

2.1. Приближение среднего поля

Исходный гамильтониан системы электронов в твердом теле возьмем в виде

$$H = H_0 + H_I \ , \tag{1а}$$

$$H_0 = \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}' \Psi^+_\sigma(\mathbf{x}) H_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x}\mathbf{x}') \Psi_{\sigma'}(\mathbf{x}') \ , \tag{1б}$$

$$H_I = \frac{1}{2} \times$$

$$\times \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}' \Psi^+_\sigma(\mathbf{x}) \Psi^+_{\sigma'}(\mathbf{x}') U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi_{\sigma'}(\mathbf{x}') \Psi_\sigma(\mathbf{x}) \ . \tag{1в}$$

Здесь $\Psi^+_\sigma(\mathbf{x})$, $\Psi_\sigma(\mathbf{x})$ — операторы рождения и уничтожения электрона с проекцией спина $\sigma = 1, 2$ в точке $\mathbf{x}$; $U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = U(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ — потенциал межэлектронного взаимодействия. Одночастичный гамильтониан (1а) в отсутствие магнитного поля и спин-орбитального взаимодействия имеет вид

$$H_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') H(\mathbf{x}') \ ,$$

$$H(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U_0(\mathbf{x}) - \mu \ , \tag{2}$$

где m — масса свободного электрона; $U_0(\mathbf{x})$ — потенциал взаимодействия электрона с ионами; μ — химический потенциал. Влияние магнитного поля $\mathbf{B} = \mathrm{rot}\, \mathbf{A}$, как известно, учитывается посредством замены в (2) оператора ∇ на $\nabla - (ie/\hbar c)\mathbf{A}$ и добавлением слагаемого

$$H^B_{\sigma\sigma'} = -\frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'} \mathbf{B} \ , \tag{3}$$

определяющего энергию спина в магнитном поле, причем здесь c — скорость света; e — заряд электрона; $\vec{\hat{\sigma}} = (\hat{\sigma}^{(x)}, \hat{\sigma}^{(y)}, \hat{\sigma}^{(z)})$ — матрицы Паули. В дальнейшем условимся обозначать произвольную матрицу в спиновом пространстве $M_{\sigma\sigma'}(\sigma, \sigma' = 1, 2)$ символом $\hat{M}$. В одночастичный гамильтониан (2) может быть также включено спин-орбитальное взаимодействие, однако в данной работе эффекты, связанные с этим взаимодействием, учитываться не будут.

Для описания коллективных эффектов в приближении среднего поля перейдем от исходного гамильтониана H к редуцированному гамильтониану

$$H' = H_0 + H'_I \ , \tag{4а}$$

$$H'_I = E_0 + \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}' \Big[\Psi^+_\sigma(\mathbf{x}) W_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi_{\sigma'}(\mathbf{x}') +$$

$$+ \frac{1}{2} \Psi^+_\sigma(\mathbf{x}) \Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi^+_{\sigma'}(\mathbf{x}') +$$

$$+ \frac{1}{2} \Psi_{\sigma'}(\mathbf{x}') \Delta^*_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi_\sigma(\mathbf{x}) \Big] \ . \tag{4б}$$

В (4б) введены «нормальный» $\hat{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ и «сверхпроводящий» $\hat{\Delta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ самосогласованные потенциалы, удовлетворяющие условиям

$$W_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = W^*_{\sigma'\sigma}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \ , \tag{5а}$$

$$\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\Delta_{\sigma'\sigma}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \ . \tag{5б}$$

Окончательно гамильтониан (4а) может быть представлен в виде

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}' \Big[\Psi^+_\sigma(\mathbf{x}) (\Omega_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi_{\sigma'}(\mathbf{x}')) +$$

$$+ (\Omega^*_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi^+_{\sigma'}(\mathbf{x}')) \Psi_\sigma(\mathbf{x}) + \Psi^+_\sigma(\mathbf{x}) \Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \times$$

$$\times \Psi^+_{\sigma'}(\mathbf{x}') + \Psi_{\sigma'}(\mathbf{x}') \Delta^*_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi_\sigma(\mathbf{x}) \Big] + E_0 \ , \tag{6}$$

где

$$\hat{\Omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{H}(\mathbf{x}') + \hat{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \ . \tag{7}$$

Квадратичный по полевым операторам гамильтониан (6) с помощью канонических преобразований Боголюбова

$$\Psi_\sigma(\mathbf{x}) = \sum_{\nu\sigma'} \Big[u_{\sigma\sigma'}(\nu, \mathbf{x}) \gamma_{\nu\sigma'} + v^*_{\sigma\sigma'}(\nu, \mathbf{x}) \gamma^+_{\nu\sigma'} \Big] \ ,$$

$$\Psi_\sigma^+(\mathrm{x}) = \sum_{\nu\sigma'} \left[v_{\sigma\sigma'}(\nu, \mathrm{x})\gamma_{\nu\sigma'} + u^*_{\sigma\sigma'}(\nu, \mathrm{x})\gamma^+_{\nu\sigma'} \right] \quad (8)$$

приводится к диагональному виду

$$H' = E'_0 + \sum_{\nu\sigma} \varepsilon_{\nu\sigma}\gamma^+_{\nu\sigma}\gamma_{\nu\sigma} \,. \quad (9)$$

В (8), (9) индекс ν обозначает набор квантовых чисел (исключая проекцию спина), характеризующих состояние электрона в кристалле. Отметим, что проекция спина является хорошим квантовым числом только в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием, что в данной работе и предполагается. Вычисляя коммутаторы

$$[H', \Psi_\sigma(\mathrm{x})] = -\sum_{\sigma'} \int d\mathrm{x}' \left[\Omega_{\sigma\sigma'}(\mathrm{x}, \mathrm{x}')\Psi_{\sigma'}(\mathrm{x}') + \right.$$

$$\left. + \Delta_{\sigma\sigma'}(\mathrm{x}, \mathrm{x}')\Psi^+_{\sigma'}(\mathrm{x}') \right] , \quad (10а)$$

$$[H', \Psi^+_\sigma(\mathrm{x})] = \sum_{\sigma'} \int d\mathrm{x}' \left[\Omega^*_{\sigma\sigma'}(\mathrm{x}, \mathrm{x}')\Psi^+_{\sigma'}(\mathrm{x}') + \right.$$

$$\left. + \Delta^*_{\sigma\sigma'}(\mathrm{x}, \mathrm{x}')\Psi_{\sigma'}(\mathrm{x}') \right] , \quad (10б)$$

используя преобразования (8), а также учитывая, что, согласно (9),

$$[H', \gamma^+_{\nu\sigma}] = \varepsilon_{\nu\sigma}\gamma^+_{\nu\sigma} \,, \quad [H', \gamma_{\nu\sigma}] = -\varepsilon_{\nu\sigma}\gamma_{\nu\sigma} \,, \quad (11)$$

находим систему уравнений, которым подчинены функции $\hat{u}_\nu(\mathrm{x}) \equiv \hat{u}(\nu,\mathrm{x})$, $\hat{v}_\nu(\mathrm{x}) \equiv \hat{v}(\nu,\mathrm{x})$, диагонализующие гамильтониан (7):

$$\Omega\, u_\nu(\mathrm{x}) + \Delta v_\nu(\mathrm{x}) = \hat{u}_\nu(\mathrm{x})\hat{\varepsilon}_\nu \,, \quad (12а)$$

$$\Omega^* v_\nu(\mathrm{x}) + \Delta^* u_\nu(\mathrm{x}) = -\hat{v}_\nu(\mathrm{x})\hat{\varepsilon}_\nu \,, \quad (12б)$$

где элементы матрицы энергии $\hat{\varepsilon}$ имеют вид $(\hat{\varepsilon})_{\sigma\sigma'} = \varepsilon_\sigma \delta_{\sigma\sigma'}$. В (12) введены обозначения

$$\Omega\, u_\nu(\mathrm{x}) = \int d\mathrm{x}'\, \hat{\Omega}(\mathrm{x}, \mathrm{x}')\hat{u}_\nu(\mathrm{x}') \,,$$
$$\Omega^* v_\nu(\mathrm{x}) = \int d\mathrm{x}'\, \hat{\Omega}^*(\mathrm{x}, \mathrm{x}')\hat{v}_\nu(\mathrm{x}') \quad (13)$$

и аналогично для $\Delta v_\nu(\mathrm{x})$ и $\Delta^* u_\nu(\mathrm{x})$. Система уравнений (12) может быть представлена в более компактной форме

$$\int d\mathrm{x}'\, \hat{\hat{\Omega}}(\mathrm{x}, \mathrm{x}')\hat{\hat{\psi}}_\nu(\mathrm{x}') = \hat{\hat{\psi}}^T_\nu(\mathrm{x})\, \hat{\hat{\varepsilon}}_\nu \,, \quad (14)$$

где матричный гамильтониан имеет вид

$$\hat{\hat{\Omega}}(\mathrm{x}, \mathrm{x}') = \begin{bmatrix} \hat{\Omega}(\mathrm{x}, \mathrm{x}') & -\hat{\Delta}(\mathrm{x}, \mathrm{x}') \\ \hat{\Delta}^*(\mathrm{x}, \mathrm{x}') & -\hat{\Omega}^*(\mathrm{x}, \mathrm{x}') \end{bmatrix} , \quad (15)$$

а матрица энергии есть

$$\hat{\hat{\varepsilon}}_\nu = \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}_\nu & 0 \\ 0 & \hat{\varepsilon}_\nu \end{pmatrix} . \quad (16)$$

Состояние электрона описывается матричной волновой функцией

$$\hat{\hat{\psi}}_\nu(\mathrm{x}) = \begin{pmatrix} \hat{u}_\nu(\mathrm{x}) \\ -\hat{v}_\nu(\mathrm{x}) \end{pmatrix} \text{ или } \hat{\hat{\psi}}^T_\nu(\mathrm{x}) = [\hat{u}_\nu(\mathrm{x}), -\hat{v}_\nu(\mathrm{x})] \,. \quad (17)$$

Наличие в выражении (17) двух компонент $\hat{u}$ и $-\hat{v}$ отражает возможность для электрона находиться в нормальном и сверхпроводящем (конденсированном) состояниях.

Преобразование, обратное каноническому преобразованию (8), имеет вид

$$\gamma_{\nu\sigma} = \sum_{\sigma'} \int d\mathrm{x} \left[u^*_{\sigma'\sigma}(\nu, \mathrm{x})\Psi_{\sigma'}(\mathrm{x}) + v^*_{\sigma'\sigma}(\nu, \mathrm{x})\Psi^+_{\sigma'}(\mathrm{x}) \right] , \quad (18)$$

$$\gamma^+_{\nu\sigma} = \sum_{\sigma'} \int d\mathrm{x} \left[v_{\sigma'\sigma}(\nu, \mathrm{x})\Psi_{\sigma'}(\mathrm{x}) + u_{\sigma'\sigma}(\nu, \mathrm{x})\Psi^+_{\sigma'}(\mathrm{x}) \right] .$$

Из требований каноничности преобразований (8), (18) следуют условия, которым должны удовлетворять функции $\hat{u}_\nu(\mathrm{x})$, $\hat{v}_\nu(\mathrm{x})$:

$$\sum_\nu \left[\hat{u}^*_\nu(\mathrm{x})\tilde{\hat{u}}_\nu(\mathrm{x}') + \hat{v}_\nu(\mathrm{x})\hat{v}^+_\nu(\mathrm{x}') \right] = \hat{1}\delta(\mathrm{x} - \mathrm{x}') \,, \quad (19а)$$

$$\sum_\nu \left[\hat{u}_\nu(\mathrm{x})\hat{u}^+_\nu(\mathrm{x}') + \hat{v}^*_\nu(\mathrm{x})\tilde{\hat{u}}_\nu(\mathrm{x}') \right] = 0 \,, \quad (19б)$$

а также

$$\int d\mathrm{x} \left[\hat{u}^+_\nu(\mathrm{x})\hat{u}_{\nu'}(\mathrm{x}) + \hat{v}^+_\nu(\mathrm{x})\hat{v}_{\nu'}(\mathrm{x}) \right] = \delta_{\nu\nu'}\hat{1} \,, \quad (20а)$$

$$\int d\mathrm{x} \left[\tilde{\hat{u}}_\nu(\mathrm{x})\hat{v}_{\nu'}(\mathrm{x}) + \tilde{\hat{v}}_\nu(\mathrm{x})\hat{u}_{\nu'}(\mathrm{x}) \right] = 0 \,. \quad (20б)$$

Здесь символы «+» и «~» означают эрмитово сопряжение и транспонирование, а $(\hat{1})_{\sigma\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'}$.

Заметим, что матричный гамильтониан (15) обладает свойством

$$\hat{\hat{\sigma}}^{(x)}\hat{\hat{\Omega}}(\mathrm{x}, \mathrm{x}')\, \hat{\hat{\sigma}}^{(x)} = -\hat{\hat{\Omega}}^*(\mathrm{x}, \mathrm{x}') \,, \quad (21)$$

где $\hat{\hat{\sigma}}^{(x)} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{1} \\ \hat{1} & 0 \end{pmatrix}$. Принимая во внимание (21), легко показать, что помимо решений (17) системы (14) имеются решения вида

$$C\hat{\hat{\psi}}(\mathrm{x}) = \hat{\hat{\sigma}}^{(x)}\hat{\hat{\psi}}^{*}(\mathrm{x}) = \begin{bmatrix} -\hat{v}^{*}(\mathrm{x}) \\ \hat{u}^{*}(\mathrm{x}) \end{bmatrix}, \qquad (22)$$

удовлетворяющие уравнениям (14) с заменой в них $\hat{\hat{\varepsilon}} \to -\hat{\hat{\varepsilon}}$. Последнее, однако, не означает, что только решения (17) являются физичными, поскольку соответствуют положительной энергии, а решения (22) — нефизичные из-за соответствия отрицательной энергии. Действительно, канонические преобразования (8) можно представить в виде

$$\begin{bmatrix} \Psi_{\sigma}(\mathrm{x}) \\ -\Psi^{+}_{\sigma}(\mathrm{x}) \end{bmatrix} = \sum_{\nu\sigma'} \begin{bmatrix} u_{\sigma\sigma'}(\nu, \mathrm{x}) & -v^{*}_{\sigma\sigma'}(\nu, \mathrm{x}) \\ -v_{\sigma\sigma'}(\nu, \mathrm{x}) & u^{*}_{\sigma\sigma'}(\nu, \mathrm{x}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma_{\nu\sigma'} \\ -\gamma^{+}_{\nu\sigma'} \end{bmatrix}, \qquad (23)$$

откуда видно, что первый столбец матрицы коэффициентов преобразований в (23) есть решение $\hat{\hat{\psi}}_{\nu}$ уравнений (12) с $\hat{\hat{\varepsilon}}_{\nu}$, а второй столбец — решение $C\hat{\hat{\psi}}_{\nu}$ тех же уравнений с $-\hat{\hat{\varepsilon}}_{\nu}$. Таким образом, оба решения $\hat{\hat{\psi}}_{\nu}$ и $C\hat{\hat{\psi}}_{\nu}$ образуют матрицу, осуществляющую каноническое преобразование от операторов $\Psi_{\sigma}(\mathrm{x})$, $-\Psi^{+}_{\sigma}(\mathrm{x})$ к операторам $\gamma_{\nu\sigma'}$, $-\gamma^{+}_{\nu\sigma'}$, в результате чего гамильтониан (6) приводится к гамильтониану диагонального вида (9) с энергией квазичастицы $\varepsilon_{\nu\sigma}$. Это показывает, что оба решения $\hat{\hat{\psi}}_{\nu}$ и $C\hat{\hat{\psi}}_{\nu}$ следует рассматривать на совершенно равноправных основаниях. Заметим, что функции $\hat{\hat{\psi}}_{\nu}$ и $C\hat{\hat{\psi}}_{\nu}$, как это следует из (20б), являются ортогональными, а потому и линейно независимыми. Система функций (17), (22), являющихся решениями уравнений (14) с $\hat{\hat{\varepsilon}}_{\nu}$ и $-\hat{\hat{\varepsilon}}_{\nu}$, полна, вследствие чего любая функция вида $\begin{bmatrix} \hat{a}(\mathrm{x}) \\ \hat{b}(\mathrm{x}) \end{bmatrix}$ может быть разложена по этой системе функций, так что

$$\begin{bmatrix} \hat{a}(\mathrm{x}) \\ \hat{b}(\mathrm{x}) \end{bmatrix} = \sum_{\nu} \left\{ \begin{bmatrix} \hat{u}_{\nu}(\mathrm{x}) \\ -\hat{v}_{\nu}(\mathrm{x}) \end{bmatrix} \hat{C}_{\nu} + \begin{bmatrix} -\hat{v}^{*}_{\nu}(\mathrm{x}) \\ \hat{u}^{*}_{\nu}(\mathrm{x}) \end{bmatrix} \hat{D}_{\nu} \right\}, \qquad (24)$$

причем коэффициенты разложения определяются выражениями

$$\hat{C}_{\nu} = \int d\mathrm{x} \left[\hat{u}^{+}_{\nu}(\mathrm{x})\hat{a}(\mathrm{x}) - \hat{v}^{+}_{\nu}(\mathrm{x})\hat{b}(\mathrm{x}) \right],$$
$$\hat{D}_{\nu} = \int d\mathrm{x} \left[-\tilde{\hat{v}}_{\nu}(\mathrm{x})\hat{a}(\mathrm{x}) + \tilde{\hat{u}}_{\nu}(\mathrm{x})\hat{b}(\mathrm{x}) \right]. \qquad (25)$$

В дальнейшем решения $\hat{\hat{\psi}}$ (17) будем называть квазичастичными, а $C\hat{\hat{\psi}}$ (22) — антиквазичастичными (дырочными). Оператор C, определенный выражением (22), имеет смысл оператора сопряжения квазичастица — антиквазичастица, причем $C^2 = 1$.

Записанная покомпонентно система (14) имеет вид

$$\int d\mathrm{x}' \begin{bmatrix} \Omega_{11} & \Omega_{12} & -\Delta_{11} & -\Delta_{12} \\ \Omega_{21} & \Omega_{22} & -\Delta_{21} & -\Delta_{22} \\ \Delta^{*}_{11} & \Delta^{*}_{12} & -\Omega^{*}_{11} & -\Omega^{*}_{12} \\ \Delta^{*}_{21} & \Delta^{*}_{22} & -\Omega^{*}_{21} & -\Omega^{*}_{22} \end{bmatrix}_{(\mathrm{x},\mathrm{x}')} \begin{bmatrix} u_{1\sigma} \\ u_{2\sigma} \\ -v_{1\sigma} \\ -v_{2\sigma} \end{bmatrix}_{(\nu,\mathrm{x}')} =$$
$$= \varepsilon_{\nu\sigma} \begin{bmatrix} u_{1\sigma} \\ u_{2\sigma} \\ -v_{1\sigma} \\ -v_{2\sigma} \end{bmatrix}_{(\nu,\mathrm{x})}, \qquad (26)$$

где $\sigma = 1, 2$. Отсюда видим, что первый столбец матричной волновой функции (17)

$$\hat{\hat{\psi}} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \\ -v_{11} & -v_{12} \\ -v_{21} & -v_{22} \end{bmatrix} \qquad (27)$$

является решением, описывающим квазичастицу с проекцией спина $\sigma = 1$ на ось z, а второй — решением для квазичастицы с противоположной проекцией $\sigma = 2$. То же самое с учетом замены в (26) $\varepsilon_{\nu\sigma} \to -\varepsilon_{\nu\sigma}$ справедливо для волновой функции антиквазичастицы. Поскольку волновые функции квазичастицы и антиквазичастицы рассматриваются совершенно равноправно, оба эти решения естественно объединить в одну блочную волновую функцию, удовлетворяющую уравнению

$$\int d\mathrm{x}' \begin{bmatrix} \hat{\hat{\Omega}}(\mathrm{x}, \mathrm{x}') & 0 \\ 0 & -\hat{\hat{\Omega}}(\mathrm{x}, \mathrm{x}') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\hat{\psi}}_{\nu}(\mathrm{x}') & 0 \\ 0 & C\hat{\hat{\psi}}_{\nu}(\mathrm{x}') \end{bmatrix} =$$
$$= \begin{bmatrix} \hat{\hat{\psi}}^{T}_{\nu}(\mathrm{x}) & 0 \\ 0 & C\hat{\hat{\psi}}^{T}_{\nu}(\mathrm{x}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\hat{\varepsilon}}_{\nu} & 0 \\ 0 & \hat{\hat{\varepsilon}}_{\nu} \end{bmatrix}. \qquad (28)$$

Форма (28) иногда может быть удобна при исследовании свойств самосогласованных уравнений.

2.2. Нормальный и сверхпроводящий потенциалы

До сих пор нормальный и сверхпроводящий потенциалы, введенные в (4), (5), оставались неопределенными. Их можно найти, потребовав, чтобы вариация величины среднего от разности точного и редуцированного гамильтонианов взаимодействия

$$I = \langle (H_I - H'_I) \rangle \qquad (29)$$

обращалась в нуль. Усреднение в (29) и в последующих случаях производится с матрицей плотности

$$\rho = \exp\left[(\Omega - H')/T\right] \tag{30}$$

при температуре T. Среднее от произвольного оператора O имеет вид

$$\langle O\rangle = \mathrm{tr}\,(\rho O) = \sum_{\alpha}\langle\alpha|\rho O|\alpha\rangle\ , \tag{31}$$

где tr обозначает след в пространстве собственных векторов $|\alpha\rangle$ оператора H' (9). Параметр Ω в (30) определяется условием нормировки $\mathrm{tr}\,\rho = 1$:

$$\Omega = -T\ln\left[\mathrm{tr}\exp\left(-H'/T\right)\right]\ . \tag{32}$$

С учетом определения энтропии

$$S = -\mathrm{tr}\,(\rho\ln\rho) \tag{33}$$

находим

$$\Omega = \langle H'\rangle - ST\ , \tag{34}$$

так что Ω является термодинамическим потенциалом системы в приближении среднего поля. При таком определении среднего справедлива теорема Вика, согласно которой

$$\langle\Psi_1^+\Psi_2^+\Psi_3\Psi_4\rangle = \langle\Psi_1^+\Psi_2^+\rangle\langle\Psi_3\Psi_4\rangle + \langle\Psi_1^+\Psi_4\rangle\langle\Psi_2^+\Psi_3\rangle - \langle\Psi_1^+\Psi_3\rangle\langle\Psi_2^+\Psi_4\rangle\ . \tag{35}$$

С учетом (35) имеем

$$I = \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\int dx\,dx'\left\{U(x,x')\left[\langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_{\sigma'}^+(x')\rangle\langle\Psi_{\sigma'}(x')\Psi_\sigma(x)\rangle + \langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_\sigma(x)\rangle\langle\Psi_{\sigma'}^+(x')\Psi_{\sigma'}(x')\rangle - \langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_{\sigma'}(x')\rangle\langle\Psi_{\sigma'}^+(x')\Psi_\sigma(x)\rangle\right] - 2W_{\sigma\sigma'}(x,x')\langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_{\sigma'}(x')\rangle - \Delta_{\sigma\sigma'}(x,x')\langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_{\sigma'}^+(x')\rangle - \Delta_{\sigma\sigma'}^*(x,x')\langle\Psi_{\sigma'}(x')\Psi_\sigma(x)\rangle\right\}. \tag{36}$$

В (36) содержатся квазисредние двух типов: нормальные $\langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_{\sigma'}(x')\rangle$ и аномальные $\langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_{\sigma'}^+(x')\rangle$, $\langle\Psi_{\sigma'}(x')\Psi_\sigma(x)\rangle$. Варьируя (36) по u и v или, что в данном случае эквивалентно, по $\langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_{\sigma'}(x')\rangle$ и $\langle\Psi_\sigma^+(x)\Psi_{\sigma'}^+(x')\rangle$ и полагая $\delta I = 0$, находим

$$W_{\sigma\sigma'}(x,x') = -U(x,x')\langle\Psi_{\sigma'}^+(x')\Psi_\sigma(x)\rangle + \delta(x-x')\,\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\sigma''}\int dx''\,U(x,x'')\langle\Psi_{\sigma''}^+(x'')\Psi_{\sigma''}(x'')\rangle\ , \tag{37}$$

$$\Delta_{\sigma\sigma'}(x,x') = U(x,x')\langle\Psi_{\sigma'}(x')\Psi_\sigma(x)\rangle\ . \tag{38}$$

Подставляя (8) в (37), (38), выражаем нормальный и сверхпроводящий потенциалы через решения уравнений (12):

$$\hat{W}(x,x') = -U(x,x')\sum_\nu\left[\hat{u}_\nu(x)\hat{f}_\nu\hat{u}_\nu^+(x') + \hat{v}_\nu^*(x)(1-\hat{f}_\nu)\tilde{\hat{v}}_\nu(x')\right] + \delta(x-x')\,\mathrm{Sp}\sum_\nu\int dx''U(x,x'')\left[\hat{u}_\nu(x'')\hat{f}_\nu\hat{u}_\nu^+(x'') + \hat{v}_\nu^*(x'')(1-\hat{f}_\nu)\tilde{\hat{v}}_\nu(x'')\right]\ , \tag{39}$$

$$\hat{\Delta}(x,x') = \frac{1}{2}U(x,x')\sum_\nu\left[\hat{v}_\nu^*(x)(1-2\hat{f}_\nu)\tilde{\hat{u}}_\nu(x') - \hat{u}_\nu(x)(1-2\hat{f}_\nu)\hat{v}_\nu^+(x')\right], \tag{40}$$

где Sp обозначает след по спиновым переменным. В (39) и (40) учтено, что $\langle\gamma_{\nu'\sigma'}^+\gamma_{\nu\sigma}\rangle = f_{\nu\sigma}\delta_{\nu\nu'}\delta_{\sigma\sigma'}$, где $f_{\nu\sigma}\equiv f(\varepsilon_{\nu\sigma})$ — функция распределения квазичастиц, а элементы матрицы $\hat{f}_\nu$ определены соотношением $(\hat{f}_\nu)_{\sigma\sigma'} = f_{\nu\sigma}\delta_{\sigma\sigma'}$. Энтропия системы электронов, описываемой гамильтонианом (9), с учетом определения (33) записывается через функцию распределения обычным образом:

$$S = -\,\mathrm{Sp}\sum_\nu\left[\hat{f}_\nu\ln\hat{f}_\nu + (1-\hat{f}_\nu)\ln(1-\hat{f}_\nu)\right]. \tag{41}$$

Варьируя термодинамический потенциал (34) по f_ν и полагая $\delta\Omega = 0$, получаем фермиевское распределение

$$f(\varepsilon_{\nu\sigma}) = \left[\exp\left(\varepsilon_{\nu\sigma}/T\right) + 1\right]^{-1}\ . \tag{42}$$

Поскольку квазичастичная энергия является функционалом функции распределения, соотношение (42) представляет собой сложное уравнение для определения $f_{\nu\sigma}$.

Подстановка (39), (40) в (12) позволяет получить замкнутую систему нелинейных уравнений, определяющую состояния электронов в кристалле с учетом их взаимодействия:

$$\hat{H}(\mathrm{x})\hat{u}_\nu(\mathrm{x}) + \sum_{\nu'}\int d\mathrm{x}'\, U(\mathrm{x},\mathrm{x}')\left[-\left(\hat{u}_{\nu'}(\mathrm{x})\hat{f}_{\nu'}\hat{u}^+_{\nu'}(\mathrm{x}') + \hat{v}^*_{\nu'}(\mathrm{x})(1-\hat{f}_{\nu'})\tilde{\hat{v}}_{\nu'}(\mathrm{x}')\right)\hat{u}_\nu(\mathrm{x}') + \right.$$

$$+ \hat{u}_\nu(\mathrm{x})\,\mathrm{Sp}\left(\hat{u}_{\nu'}(\mathrm{x}')\hat{f}_{\nu'}\hat{u}^+_{\nu'}(\mathrm{x}') + \hat{v}^*_{\nu'}(\mathrm{x}')(1-\hat{f}_{\nu'})\tilde{\hat{v}}_{\nu'}(\mathrm{x}')\right) +$$

$$\left. + \frac{1}{2}\left(\hat{v}^*_{\nu'}(\mathrm{x})(1-2\hat{f}_{\nu'})\tilde{\hat{u}}_{\nu'}(\mathrm{x}') - \hat{u}_{\nu'}(\mathrm{x})(1-2\hat{f}_{\nu'})\hat{v}^+_{\nu'}(\mathrm{x}')\right)\hat{v}_\nu(\mathrm{x}')\right] = \hat{u}_\nu(\mathrm{x})\hat{\varepsilon}_\nu\,, \qquad (43\text{а})$$

$$\hat{H}(\mathrm{x})\hat{v}_\nu(\mathrm{x}) + \sum_{\nu'}\int d\mathrm{x}'\, U(\mathrm{x},\mathrm{x}')\left[-\left(\hat{u}^*_{\nu'}(\mathrm{x})\hat{f}_{\nu'}\tilde{\hat{u}}_{\nu'}(\mathrm{x}') + \hat{v}_{\nu'}(\mathrm{x})(1-\hat{f}_{\nu'})\hat{v}^+_{\nu'}(\mathrm{x}')\right)\hat{v}_\nu(\mathrm{x}') + \right.$$

$$+ \hat{v}_\nu(\mathrm{x})\,\mathrm{Sp}\left(\hat{u}^*_{\nu'}(\mathrm{x}')\hat{f}_{\nu'}\tilde{\hat{u}}_{\nu'}(\mathrm{x}') + \hat{v}_{\nu'}(\mathrm{x}')(1-\hat{f}_{\nu'})\hat{v}^+_{\nu'}(\mathrm{x}')\right) +$$

$$\left. + \frac{1}{2}\left(\hat{v}_{\nu'}(\mathrm{x})(1-2\hat{f}_{\nu'})\hat{u}^+_{\nu'}(\mathrm{x}') - \hat{u}^*_{\nu'}(\mathrm{x})(1-2\hat{f}_{\nu'})\tilde{\hat{v}}_{\nu'}(\mathrm{x}')\right)\hat{u}_\nu(\mathrm{x}')\right] = -\hat{v}_\nu(\mathrm{x})\hat{\varepsilon}_\nu\,. \qquad (43\text{б})$$

Химический потенциал μ связан со средним числом электронов соотношением

$$N = \mathrm{Sp}\sum_\nu\int d\mathrm{x}\left[\hat{u}^+_\nu(\mathrm{x})\hat{f}_\nu\hat{u}_\nu(\mathrm{x}) + \hat{v}^+_\nu(\mathrm{x})(1-\hat{f}_\nu)\hat{v}_\nu(\mathrm{x})\right]. \qquad (44)$$

Система уравнений (43) совместно с (42), (44) в приближении самосогласованного поля описывает электроны проводимости в металле с учетом их магнитных свойств и возможности перехода в сверхпроводящее состояние. Будем называть эти уравнения обобщенными уравнениями Хартри—Фока—Боголюбова.

2.3. *Фермижидкостная формулировка теории*

Энергия электрона-квазичастицы в кристалле и полная энергия системы могут быть записаны как функционалы от функции распределения:

$$\hat{\varepsilon}_\nu = \hat{\varepsilon}^{(0)}_\nu + \sum_{\nu'}\hat{\Theta}_{\nu\nu'}\hat{f}_{\nu'}\,, \qquad (45)$$

$$E = \langle H'\rangle = E'_0 + \mathrm{Sp}\sum_\nu\hat{\varepsilon}^{(0)}_\nu\hat{f}_\nu + \mathrm{Sp}\,\mathrm{Sp}'\sum_{\nu\nu'}\hat{f}_\nu\hat{\Theta}_{\nu\nu'}\hat{f}_{\nu'}\,. \qquad (46)$$

Постоянная E_0, перенормированная энергия невзаимодействующих квазичастиц $\hat{\varepsilon}^{(0)}$ и функция взаимодействия $\hat{\Theta}$ выражаются через матричные элементы потенциала взаимодействия $U(\mathrm{x},\mathrm{x}')$, взятые с функциями $\hat{u}(\mathrm{x})$, $\hat{v}(\mathrm{x})$. Явный вид этих выражений нетрудно получить, но он не приведен в силу некоторой громоздкости. Формулы (45), (46) аналогичны соответствующим соотношениям теории нормальной ферми-жидкости [10]. В работе [9] было показано, что фермижидкостные параметры в нормальной немагнитной фазе могут быть рассчитаны по известным решениям уравнений Хартри—Фока. Как видим, в магнитном и (или) сверхпроводящем состояниях фермижидкостные параметры выражаются через решения обобщенных уравнений ХФБ.

Приведем выражение для спинового магнитного момента единицы объема кристалла, определяемого электронами. Усредняя оператор магнитного момента

$$\mathrm{M} = \mu_B\sum_{\sigma\sigma'}\int d\mathrm{x}\Psi^+_\sigma(\mathrm{x})\hat{\vec{\sigma}}_{\sigma\sigma'}\Psi_{\sigma'}(\mathrm{x})\,, \qquad (47)$$

где $-\mu_B = |e|\hbar/2mc$ — магнетон Бора, с учетом (8) находим среднее значение плотности магнитного момента

$$\langle\mathrm{M}\rangle = \int d\mathrm{x}\,\langle\mathrm{M}(\mathrm{x})\rangle =$$

$$= \mu_B\,\mathrm{Sp}\sum_\nu\int d\mathrm{x}\,\hat{\vec{\sigma}}\left[\hat{u}_\nu(\mathrm{x})\hat{f}_\nu\hat{u}^+_\nu(\mathrm{x}) - \right.$$

$$\left. - (\hat{\sigma}^{(y)}\hat{v}_\nu(\mathrm{x}))(1-\hat{f}_\nu)(\hat{\sigma}^{(y)}\hat{v}_\nu(\mathrm{x}))^+\right]. \qquad (48)$$

Как видно, полный магнитный момент является суммой моментов квазичастиц, находящихся в квантовых состояниях ν, с учетом степени запол-

нения этих состояний. Кроме того, каждое такое слагаемое разбивается на «нормальную» часть, определяемую u-функциями, и «сверхпроводящую», в которую входят только v-функции.

Оператор плотности тока с учетом вклада магнитного момента электрона имеет вид

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) =$$

$$= -\frac{ie}{2m}\sum_{\sigma}\left[\Psi_{\sigma}^{+}(\mathbf{x})(\nabla\Psi_{\sigma}(\mathbf{x})) - (\nabla\Psi_{\sigma}^{+}(\mathbf{x}))\Psi_{\sigma}(\mathbf{x})\right] +$$

$$+ c\,\mu_B \sum_{\sigma\sigma'} \mathrm{rot}\left[\Psi_{\sigma}^{+}(\mathbf{x})\vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}\Psi_{\sigma'}(\mathbf{x})\right] . \qquad (49)$$

Усредняя (49), согласно (31), находим выражение для плотности тока квазичастиц

$$\langle \mathbf{j}(\mathbf{x})\rangle = -\frac{ie}{2m}\times$$

$$\times \sum_{\nu} \mathrm{Sp}\left\{[(\nabla\hat{v}_{\nu}^{+}(\mathbf{x}))\hat{v}_{\nu}(\mathbf{x}) - \hat{v}_{\nu}^{+}(\mathbf{x})(\nabla\hat{v}_{\nu}(\mathbf{x}))](1-\hat{f}_{\nu}) -\right.$$

$$\left. -[(\nabla\,\hat{u}_{\nu}^{+}(\mathbf{x}))\hat{u}_{\nu}(\mathbf{x}) - \hat{u}_{\nu}^{+}(\mathbf{x})(\nabla\,\hat{u}_{\nu}(\mathbf{x}))]\hat{f}_{\nu}\right\} + c\,\mathrm{rot}\,\langle \mathbf{M}(\mathbf{x})\rangle . \qquad (50)$$

В силу нелокальности самосогласованных потенциалов $\hat{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ и $\hat{\Delta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ закон сохранения заряда выполняется в интегральной форме:

$$\int d\mathbf{x}\ \mathrm{div}\,\langle \mathbf{j}(\mathbf{x})\rangle = 0 . \qquad (51)$$

Выражение для плотности тока (50) также разбивается на «нормальный» (от u-функций) и «сверхпроводящий» (от v-функций) вклады.

3. Калибровочная и пространственная симметрии

Многочастичный гамильтониан (1) инвариантен относительно локальных калибровочных преобразований

$$\Psi_{\sigma}^{+}(\mathbf{x}) \to \Phi_{\chi}\Psi_{\sigma}^{+}(\mathbf{x}) = e^{i\chi(\mathbf{x})}\Psi_{\sigma}^{+}(\mathbf{x}) ,$$
$$\Psi_{\sigma}(\mathbf{x}) \to \Phi_{\chi}\Psi_{\sigma}(\mathbf{x}) = e^{-i\chi(\mathbf{x})}\Psi_{\sigma}(\mathbf{x}) , \qquad (52)$$

если при наличии магнитного поля одновременно производится замена векторного потенциала

$$\mathbf{A} \to \Phi_{\chi}\,\mathbf{A} = \mathbf{A} - \frac{\hbar c}{e}\nabla\chi . \qquad (53)$$

Редуцированный гамильтониан (6) остается калибровочно-инвариантным, если самосогласованные потенциалы преобразуются по правилам

$$\hat{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \to \Phi_{\chi}\hat{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = e^{-i\chi(\mathbf{x})+i\chi(\mathbf{x}')}\hat{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') ,$$

$$\hat{\Delta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \to \Phi_{\chi}\hat{\Delta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = e^{-i\chi(\mathbf{x})-i\chi(\mathbf{x}')}\hat{\Delta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') . \qquad (54)$$

Решения самосогласованных уравнений (43) при калибровочных преобразованиях изменяются согласно

$$\hat{u}(\mathbf{x}) \to \Phi_{\chi}\hat{u}(\mathbf{x}) = e^{-i\chi(\mathbf{x})}\hat{u}(\mathbf{x}) ,$$
$$\hat{v}(\mathbf{x}) \to \Phi_{\chi}\hat{v}(\mathbf{x}) = e^{i\chi(\mathbf{x})}\hat{v}(\mathbf{x}) . \qquad (55)$$

Отметим, что из (55) и (39), (40) следуют соотношения (54). В частном случае, когда $\chi(\mathbf{x}) = \mathrm{const}$, нормальный потенциал $\hat{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ калибровочно-инвариантен, а сверхпроводящий $\hat{\Delta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ — нет.

Диагонализованный гамильтониан (9), в котором операторы γ^{+}, γ по определению не зависят от пространственных координат, инвариантен относительно глобальных калибровочных преобразований

$$\gamma_{\nu\sigma}^{+} \to \Phi_{\alpha}\gamma_{\nu\sigma}^{+} = e^{i\alpha}\gamma_{\nu\sigma}^{+} ,$$
$$\gamma_{\nu\sigma} \to \Phi_{\alpha}\gamma_{\nu\sigma} = e^{-i\alpha}\gamma_{\nu\sigma} , \qquad (56)$$

где вещественный параметр α не зависит от $\mathbf{x}$. При этом вид канонических преобразований (8), (18) не изменяется, если одновременно с (56) осуществить преобразования

$$\hat{u} \to \Phi_{\alpha}\hat{u} = e^{i\alpha}\hat{u} , \quad \hat{v} \to \Phi_{\alpha}\hat{v} = e^{i\alpha}\hat{v} . \qquad (57)$$

При заменах (57) вид самосогласованных потенциалов остается неизменным

$$\Phi_{\alpha}\hat{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \hat{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') ,$$
$$\Phi_{\alpha}\hat{\Delta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \hat{\Delta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') , \qquad (58)$$

а функции $\Phi_{\alpha}\hat{u}$, $\Phi_{\alpha}\hat{v}$, как и $\hat{u}$, $\hat{v}$, являются решениями самосогласованных уравнений. Таким образом, самосогласованные уравнения инварианты относительно калибровочных преобразований двух типов: (53)–(55) и (57), (58).

До сих пор нигде явно не учитывалась симметрия кристалла относительно трансляций и вращений. Рассмотрим следствия, к которым приводит эта симметрия в теории самосогласованного поля. Пусть g — элемент пространственной группы G симметрии кристалла, который может быть представлен в виде

$$g = \{h|\vec{\tau} + \mathbf{t}\} , \qquad (59)$$

где h — собственное или несобственное вращение; $\mathbf{t}$ — вектор трансляции решетки; $\vec{\tau}$ — сопровождающая поворот h трансляция (для несимморфных групп), равная $1/4$, $1/3$ или $1/2$ части периода решетки Браве. Под действием определенного в про-

странстве функций оператора $T(g)$, соответствующего элементу g, полевой оператор Ψ_σ преобразуется как контравариантный, а Ψ^+_σ — как ковариантный спиноры:

$$T(g)\Psi_\sigma(\mathbf{x}) = \sum_{\sigma'} D_{\sigma\sigma'}(h)\Psi_{\sigma'}(g^{-1}\mathbf{x}) \ , \qquad (60а)$$

$$T(g)\Psi^+_\sigma(\mathbf{x}) = \sum_{\sigma'} D^+_{\sigma'\sigma}(h)\Psi^+_{\sigma'}(g^{-1}\mathbf{x}) \ , \qquad (60б)$$

где $(g^{-1}\mathbf{x})_i = R_{ji}(h)(\mathbf{x} - \mathbf{t} - \vec{\tau})_j$, $R_{ji}(h)$ — ортогональная 3x3-матрица пространственного поворота, соответствующая преобразованию h. В (60) $\hat{D}(h)$ — унитарная матрица с равным единице детерминантом вида

$$\hat{D}(h) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} , \quad |a|^2 + |b|^2 = 1 , \qquad (61а)$$

элементы которой могут быть заданы тройкой углов Эйлера $\{\psi, \theta, \varphi\}$, определенных, например, как в [19]:

$$a = \cos\frac{\theta}{2}\exp\left[-\frac{i}{2}(\varphi + \psi)\right] ,$$
$$b = -i\sin\frac{\theta}{2}\exp\left[\frac{i}{2}(\varphi - \psi)\right] . \qquad (61б)$$

Операторы $\gamma^+_{\nu\sigma}$, $\gamma_{\nu\sigma}$ не зависят от пространственных координат и преобразуются при спиновых вращениях аналогично (60). Если для $g \in G$ выполнены соотношения

$$\hat{D}^+(h)\hat{H}(g\mathbf{x}, g\mathbf{x}')\hat{D}(h) = \hat{H}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') ,$$
$$\hat{U}(g\mathbf{x}, g\mathbf{x}') = \hat{U}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') , \qquad (62)$$

то G является пространственной группой симметрии кристалла, а гамильтониан (1) инвариантен относительно преобразований этой группы. Редуцированный гамильтониан (6) инвариантен относительно преобразований группы G', для элементов которой дополнительно к (62) должны быть выполнены условия

$$\hat{D}^+(h)\hat{W}(g\mathbf{x}, g\mathbf{x}')\hat{D}(h) = \hat{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') ,$$
$$\hat{D}^+(h)\hat{\Delta}(g\mathbf{x}, g\mathbf{x}')\hat{D}^*(h) = \hat{\Delta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') . \qquad (63)$$

Подчеркнем, что группа G' не обязательно совпадает с группой G, поскольку в результате магнитного или сверхпроводящего фазового перехода симметрия в распределении заряда электронной жидкости может понизиться, в результате чего G', вообще говоря, окажется подгруппой группы G.

Отметим, что для частиц со спином 1/2 при повороте вокруг некоторой оси на 2π изменяется знак волновой функции, а тождественным элементом является поворот на 4π. Следствием этой особенности оказывается то, что симметрийные свойства электрона при учете его спина следует, вообще говоря, рассматривать в терминах «двойных» групп, представляющих собой прямое произведение простой группы и группы, состоящей из тождественного элемента и некоторого дополнительного элемента, поставленного в соответствие повороту на 2π [20]. Физические приложения находят нечетные представления двойных групп, для которых новому элементу соответствует единичная матрица со знаком минус. Таблицы таких неприводимых представлений имеются в справочнике [19].

Условия (62), (63) могут быть записаны как условие симметрии блочного гамильтониана (15):

$$\hat{\hat{D}}^+(h)\hat{\hat{\Omega}}(g\mathbf{x}, g\mathbf{x}')\hat{\hat{D}}(h) = \hat{\hat{\Omega}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') , \qquad (64)$$

где

$$\hat{\hat{D}}(h) = \begin{pmatrix} \hat{D}(h) & 0 \\ 0 & \hat{D}^*(h) \end{pmatrix} . \qquad (65)$$

Из соотношений (64), (65) и (14) следует, что если $\hat{\hat{\psi}}_\nu(\mathbf{x})$ является решением уравнений (14), то и

$$T(g)\,\hat{\hat{\psi}}_\nu(\mathbf{x}) = \hat{\hat{D}}(h)\,\hat{\hat{\psi}}_\nu\,(g^{-1}\mathbf{x}) \qquad (66)$$

также является решением этого уравнения с той же матрицей $\hat{\hat{\varepsilon}}_\nu$ или более детально: если $\hat{u}_\nu(\mathbf{x})$, $\hat{v}_\nu(\mathbf{x})$ — решения самосогласованных уравнений, то и

$$T(g)\hat{u}_\nu(\mathbf{x}) = \hat{D}(h)\hat{u}_\nu(g^{-1}\mathbf{x}) ,$$
$$T(g)\hat{v}_\nu(\mathbf{x}) = \hat{D}^*(h)\hat{v}_\nu(g^{-1}\mathbf{x}) \qquad (67)$$

также являются решениями этих уравнений. Последнее легко доказать, если заметить, учитывая (64), что оператор

$$\hat{\hat{\Omega}}(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x}'\,\hat{\hat{\Omega}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \qquad (68)$$

коммутирует с операторами $T(g)$:

$$\left[T(g), \hat{\hat{\Omega}}(\mathbf{x})\right] = 0 . \qquad (69)$$

Пусть $\hat{\hat{\psi}}_j(\mathbf{x})$ $(j = 1, 2, \ldots P)$ — совокупность линейно независимых решений уравнения (14) с данным $\hat{\hat{\varepsilon}}$. Тогда любую функцию $T(g)\hat{\hat{\psi}}_j(\mathbf{x})$ можно представить в виде линейной комбинации базисных функций

$$T(g)\hat{\hat{\psi}}_j(\mathbf{x}) = \sum_{j'}^{P} T_{j'j}(g)\,\hat{\hat{\psi}}_{j'}(\mathbf{x}) , \qquad (70)$$

где матрицы

$$T_{j'j}(g) = \frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}\int d\mathbf{x}\,\hat{\hat{\psi}}^{+}_{j'}(\mathbf{x})\hat{\hat{D}}(h)\hat{\hat{\psi}}_{j}(g^{-1}\mathbf{x}) \qquad (71)$$

образуют неприводимое представление группы G'. Таким образом, классификацию состояний электрона в кристалле в рамках теории самосогласованного поля можно осуществить, как и в случае независимых электронов в периодическом потенциале, по неприводимым представлениям пространственной группы симметрии. Поэтому индекс j в (70), (71) является условным обозначением следующей совокупности индексов: $j = (A, l, m) = (p\tau, Lf, m)$ [9], где $A = p, \tau$; $l = L, f$, причем p — номер звезды неприводимого представления; τ — индекс неприводимого представления группы волнового вектора; L — номер луча p-звезды, а индекс f нумерует базисные функции малого τ-представления; $m = 0, 1, 2, \ldots$ нумерует совокупности базисных функций данного неприводимого представления, относящиеся к разным значениям энергии. Если звезда представления имеет n_p лучей ($L = 1, 2, \ldots, n_p$) и неприводимое представление группы волнового вектора имеет размерность n_τ ($f = 1, 2, \ldots, n_\tau$), то размерность полного неприводимого представления пространственной группы и кратность вырождения уровня энергии (без учета возможного случайного вырождения) равна $P = n_\tau n_p$. Часто пользуются менее подробной классификацией состояний электрона, указывая квазимпульс электрона k и номер зоны n.

Антиквазичастичные решения (22) преобразуются по комплексно-сопряженному представлению

$$T(g)C\,\hat{\hat{\psi}}_{j}(\mathbf{x}) = \sum_{j'}^{P} T^{*}_{j'j}(g)C\,\hat{\hat{\psi}}_{j'}(\mathbf{x})\ . \qquad (72)$$

Итак, установлено, что если для потенциалов $\hat{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, $\hat{\Delta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ выполнены условия (63), то решения обобщенных уравнений ХФБ могут быть классифицированы по неприводимым представлениям группы G' пространственной симметрии редуцированного гамильтониана (6).

Покажем теперь, что если выполнены условия (62) и решения самосогласованных уравнений образуют базис неприводимых представлений группы G', то условия (63) выполняются. С этой целью запишем потенциалы (39), (40) через волновые функции, характеризуемые квантовыми числами $A = (p, \tau)$, $l = (L, f)$, m:

$$\hat{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -U(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\sum_{Alm}\left[\hat{u}_{Alm}(\mathbf{x})\hat{f}(\hat{\varepsilon}_{Am})\hat{u}^{+}_{Alm}(\mathbf{x}') + \hat{v}^{*}_{Alm}(\mathbf{x})(1 - \hat{f}(\hat{\varepsilon}_{Am}))\hat{\tilde{v}}_{Alm}(\mathbf{x}')\right] +$$

$$+ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\,\mathrm{Sp}\sum_{Alm}\int d\mathbf{x}''U(\mathbf{x}, \mathbf{x}'')\left[\hat{u}_{Alm}(\mathbf{x}'')\hat{f}(\hat{\varepsilon}_{Am})\hat{u}^{+}_{Alm}(\mathbf{x}'') + \hat{v}^{*}_{Alm}(\mathbf{x}'')(1 - \hat{f}(\hat{\varepsilon}_{Am}))\hat{\tilde{v}}_{Alm}(\mathbf{x}'')\right], \qquad (73)$$

$$\hat{\Delta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{2}U(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\sum_{Alm}\left[\hat{v}^{*}_{Alm}(\mathbf{x})(1 - 2\hat{f}(\hat{\varepsilon}_{Am}))\hat{\tilde{u}}_{Alm}(\mathbf{x}') - \hat{u}_{Alm}(\mathbf{x})(1 - 2\hat{f}(\hat{\varepsilon}_{Am}))\hat{v}^{+}_{Alm}(\mathbf{x}')\right]. \qquad (74)$$

Учитывая, что, согласно (66),

$$T(g)\hat{u}_{Alm}(\mathbf{x}) = \hat{D}(h)\hat{u}_{Alm}(g^{-1}\mathbf{x}) = \sum_{l'} T^{(A)}_{l'l}(g)\hat{u}_{Al'm}(\mathbf{x}), \qquad (75а)$$

$$T(g)\hat{v}_{Alm}(\mathbf{x}) = \hat{D}^{*}(h)\hat{v}_{Alm}(g^{-1}\mathbf{x}) = \sum_{l'} T^{(A)}_{l'l}(g)\hat{v}_{Al'm}(\mathbf{x}), \qquad (75б)$$

и принимая во внимание условие унитарности представления

$$\sum_{l} T^{(A)*}_{l'l}T^{(A)}_{l''l} = \delta_{l'l''} \qquad (76)$$

(а такой выбор всегда возможен), убеждаемся в справедливости соотношений (63). Таким образом, показано, что выполнимость условий (63) для преобразований группы G' позволяет классифицировать электронные состояния по неприводимым представлениям этой пространственной группы, и, наоборот, указанная классификация приводит к выполнимости условий (63). Иначе говоря, выбранная классификация электронных состояний и условия (63) для потенциалов взаимно согласованны. Отметим, что утверждение, заключающееся в том, что решения самосогласованных уравнений, отвечающие данной энергии, образуют базис неприводимого представления пространственной группы симметрии G', являющейся подгруппой группы симметрии одночастичного гамильтониана (2), отнюдь не является тривиальным вследствие нелинейности исследуемых уравнений.

Симметрия обобщенных уравнений ХФБ не исчерпывается рассмотренными преобразованиями. Действительно, проанализируем свойства симметрии диагонализованного гамильтониана (9). Оче-

видно, он инвариантен относительно вращений $f \in F$ в спиновом пространстве, для которых выполнено условие

$$\hat{D}^{+}(f)\hat{\varepsilon}\hat{D}(f) = \hat{\varepsilon} \ . \qquad (77)$$

Если матрица $\hat{\varepsilon}$ кратна единичной $(\hat{\varepsilon})_{\sigma\sigma'} = \varepsilon\delta_{\sigma\sigma'}$, то F является группой пространственных вращений, если же это условие не выполняется, то F — группа аксиальных вращений вокруг оси z. В силу инвариантности гамильтониана (9) относительно указанных преобразований имеем, что в первом случае спин квазичастицы является хорошим квантовым числом, а во втором — сохраняется проекция спина квазичастицы на ось z. Помимо решений $\hat{u}$, $\hat{v}$ система самосогласованных уравнений имеет решения

$$P(f)\hat{u}(\mathrm{x}) = \hat{u}(\mathrm{x})\hat{D}(f) \ , \quad P(f)\hat{v}(\mathrm{x}) = \hat{v}(\mathrm{x})\hat{D}(f) \ , \qquad (78)$$

если для f выполнено условие (77). Полной группой симметрии обобщенных уравнений ХФБ является прямое произведение групп симметрии редуцированного гамильтониана (6) и диагонализованного гамильтониана (9).

4. Инверсия времени

Рассмотрим симметрию обобщенных уравнений ХФБ относительно операции обращения времени, предполагая наличие магнитного поля и явно учитывая зависимость операторов и функций от векторного потенциала, которая изменяет знак при инверсии времени. Уравнения движения для полевых операторов имеют вид

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_\sigma(\mathrm{A};\mathrm{x},t)}{\partial t} = [\Psi_\sigma(\mathrm{A};\mathrm{x},t), H'] \qquad (79)$$

и аналогично для $\Psi^{+}_{\sigma}(\mathrm{A};\mathrm{x},t)$. Коммутаторы в (79) определены формулами (10). Применяя к (79) операцию инверсии времени

$$t \to -t \ , \quad \mathrm{A} \to -\mathrm{A} \ , \qquad (80)$$

убеждаемся, что обращенный во времени полевой оператор [21]

$$K\Psi_\sigma(\mathrm{A};\mathrm{x},t) = \sum_{\sigma'}\sigma^{(y)}_{\sigma\sigma'}\Psi^{*}_{\sigma'}(-\mathrm{A};\mathrm{x},-t) \qquad (81)$$

подчиняется такому же уравнению движения (79), как и $\Psi_\sigma(\mathrm{A};\mathrm{x},t)$, если

$$\hat{\sigma}^{(y)}\hat{H}^{*}(-\mathrm{A};\mathrm{x},\mathrm{x}')\hat{\sigma}^{(y)} = \hat{H}(\mathrm{A};\mathrm{x},\mathrm{x}') \ , \qquad (82)$$

а для самосогласованных потенциалов выполнены условия

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}^{(y)}\hat{W}^{*}(-\mathrm{A};\mathrm{x},\mathrm{x}')\hat{\sigma}^{(y)} &= \hat{W}(\mathrm{A};\mathrm{x},\mathrm{x}') \ ,\\ \hat{\sigma}^{(y)}\hat{\Delta}^{*}(-\mathrm{A};\mathrm{x},\mathrm{x}')\hat{\sigma}^{(y)} &= -\hat{\Delta}(\mathrm{A};\mathrm{x},\mathrm{x}') \ .\end{aligned} \qquad (83)$$

Гамильтониан (2) удовлетворяет условию (82) также при учете спин-орбитального и магнитного (3) взаимодействий. Отметим, что операции комплексного сопряжения и транспонирования полевых операторов зависят от выбора базиса $|\alpha\rangle$ в гильбертовом пространстве и определяются формулами

$$\langle\alpha|\Psi^{*}_{\sigma}|\alpha'\rangle = \langle\alpha|\Psi_\sigma|\alpha'\rangle^{*} \ , \ \langle\alpha|\tilde{\Psi}_\sigma|\alpha'\rangle = \langle\alpha'|\Psi_\sigma|\alpha\rangle \ . \qquad (84)$$

Следует иметь в виду, что при выполнении (83) многочастичный гамильтониан (6) обладает свойством

$$H'^{*}(\mathrm{A},\Psi_\sigma) = H'(-\mathrm{A},K\Psi_\sigma) \ . \qquad (85)$$

Уравнение движения квазичастичного оператора есть

$$i\hbar\frac{\partial\gamma_{\nu\sigma}(\mathrm{A},t)}{\partial t} = \varepsilon_{\nu\sigma}(\mathrm{A})\gamma_{\nu\sigma}(\mathrm{A},t) \ . \qquad (86)$$

Такому же уравнению, но с заменой $\varepsilon_{\nu\sigma}(\mathrm{A})$ на $\varepsilon_{\nu\sigma}(-\mathrm{A})$, удовлетворяет оператор

$$K\gamma_{\sigma\nu}(\mathrm{A},t) = \gamma^{*}_{\sigma\nu}(-\mathrm{A},-t) \ , \qquad (87)$$

который следует рассматривать как обращенный во времени квазичастичный оператор. В магнитном поле взаимно обращенные во времени состояния, вообще говоря, имеют различные энергии $\varepsilon_{\nu\sigma}(\mathrm{A})$ и $\varepsilon_{\nu\sigma}(-\mathrm{A})$, а в отсутствие магнитного поля эти энергии совпадают. Диагонализованный многочастичный гамильтониан (9) обладает свойством, аналогичным (85):

$$H'^{*}(\mathrm{A},\gamma_{\nu\sigma}) = H'(-\mathrm{A},K\gamma_{\nu\sigma}) \ . \qquad (88)$$

Если условия (82), (83) выполнены, то наряду с решением самосогласованных уравнений $\hat{\tilde{\psi}}_\nu(\mathrm{A};\mathrm{x})$ (17), отвечающим энергиям $\varepsilon_{\nu\sigma}(\mathrm{A})$, имеется обращенное во времени решение

$$K\hat{\tilde{\psi}}_\nu(\mathrm{A};\mathrm{x}) = \begin{vmatrix}\hat{\sigma}^{(y)}\hat{u}^{*}_{\nu}(-\mathrm{A};\mathrm{x})\\ \hat{\sigma}^{(y)}\hat{v}^{*}_{\nu}(-\mathrm{A};\mathrm{x})\end{vmatrix} \ , \qquad (89)$$

отвечающее энергиям $\varepsilon_{\nu\sigma}(-\mathrm{A})$. Обратим внимание, что канонические преобразования (8), (18), как и должно быть, справедливы также для обращенных во времени операторов (81), (87) и функций (89). Антиквазичастичному решению $C\hat{\tilde{\psi}}_\nu(\mathrm{A};\mathrm{x})$ (22) отвечает обращенное во времени решение

$$KC\hat{\hat{\psi}}_\nu(\mathrm{A};\mathrm{x}) = \begin{vmatrix} -\hat{\sigma}^{(y)}\hat{v}_\nu(-\mathrm{A};\mathrm{x}) \\ -\hat{\sigma}^{(y)}\hat{u}_\nu(-\mathrm{A};\mathrm{x}) \end{vmatrix} . \qquad (90)$$

По аналогии с релятивисткой теорией [22] операция K, определенная соотношением (89), может быть названа операцией слабого (или вигнеровского) отражения времени, а операция KC, совместно с инверсией времени меняющая квазичастицу на антиквазичастицу и определяемая соотношением (90), может быть названа операцией сильного отражения времени.

Таким образом, из четырех решений обобщенных уравнений ХФБ с данным набором квантовых чисел ν:

$$\hat{\hat{\psi}}_\nu(\mathrm{A};\mathrm{x}) , \quad C\hat{\hat{\psi}}_\nu(\mathrm{A};\mathrm{x}) , \quad K\hat{\hat{\psi}}_\nu(\mathrm{A};\mathrm{x}) , \quad KC\hat{\hat{\psi}}_\nu(\mathrm{A};\mathrm{x}) \qquad (91)$$

первые два соответствуют энергиям $\varepsilon_{\nu\sigma}(\mathrm{A})$, а третье и четвертое — энергиям $\varepsilon_{\nu\sigma}(-\mathrm{A})$. В отсутствие магнитного поля энергии всех четырех состояний одинаковы. Как известно, симметрия уравнений относительно операции обращения времени может привести к дополнительному удвоению кратности вырождения энергетических уровней. Применительно к кристаллам данный вопрос исследован Вигнером [23]. Рассмотрим эту же проблему для электронов, описываемых нелинейными самосогласованными уравнениями. Пусть уровни энергии $\varepsilon_{\nu\sigma}(\mathrm{A})$, $\varepsilon_{\nu\sigma}(-\mathrm{A})$ вырождены P-кратно вследствие кристаллической симметрии, а волновые функции, относящиеся к этим уровням, обозначим индексом $j = 1, 2, ..., P$. Первое и второе, а также третье и четвертое решения (91) ортогональны между собой в силу (20б), а следовательно, линейно независимы. Кроме того, если энергии $\varepsilon_{\nu\sigma}(\mathrm{A})$ и $\varepsilon_{\nu\sigma}(-\mathrm{A})$ различны, то соответствующие им решения также линейно независимы. В этом случае дополнительного вырождения нет. Если же эти энергии совпадают (например, в отсутствие магнитного поля), то здесь может быть две возможности. Во-первых, решения $K\hat{\hat{\psi}}_j$, $KC\hat{\hat{\psi}}_j$ оказываются линейно независимы от $\hat{\hat{\psi}}_j$ и $C\hat{\hat{\psi}}_j$ соответственно. В этом случае кратность вырождения уровня удваивается вследствие симметрии относительно инверсии времени. Во-вторых, существуют линейные зависимости

$$K\hat{\hat{\psi}}_j = \sum_{j'} M_{jj'}\hat{\hat{\psi}}_{j'} , \quad CK\hat{\hat{\psi}}_j = \sum_{j'} M^*_{jj'} C\hat{\hat{\psi}}_{j'} \qquad (92)$$

и в таком случае удвоение кратности вырождения отсутствует. Та или иная ситуации реал. зуется в зависимости от типа неприводимого представления T, по которому преобразуются функции $\hat{\hat{\psi}}_j$. Здесь, как известно [23], имеются три возможности: а) T и T^* эквивалентны одному и тому же вещественному неприводимому представлению; б) T и T^* не эквивалентны; в) T и T^* эквивалентны друг другу, но не эквивалентны вещественному представлению.

Приходится различать два случая: 1) «бесспиновый»; 2) учитывающий спин 1/2. В одночастичной теории при отсутствии спиновой зависимости в гамильтониане (2) координатная и спиновая части волновой функции разделяются и уравнение Шредингера записывается для скалярных функций, которые образуют базис неприводимого представления простой группы симметрии потенциала решетки. Это соответствует «бесспиновому» случаю. Если одночастичный гамильтониан содержит зависимость от спина (например, вследствие спин-орбитального взаимодействия), то переменные не разделяются, а волновые функции удовлетворяют уравнению Шредингера—Паули и образуют базис неприводимого представления двойной группы, что соответствует случаю «со спином». Особенностью системы взаимодействующих электронов является то, что случай «со спином» может реализовываться, даже если одночастичный гамильтониан (2) не содержит спиновой зависимости. Это возможно либо для намагниченного нормального состояния, либо для сверхпроводящего состояния с триплетным спариванием. Если же система находится в нормальном немагнитном (слабо диамагнитном или парамагнитном) состоянии или в сверхпроводящем состоянии с синглетным спариванием (без учета спин-орбитального взаимодействия и взаимодействия магнитного момента электрона с магнитным полем), то спиновая и координатная части решений обобщенных уравнений ХФБ разделяются, так что

$$\hat{u}(\mathrm{x}) = u(\mathrm{x})\hat{u} , \quad \hat{v}(\mathrm{x}) = v(\mathrm{x})\hat{v} , \qquad (93)$$

где матрицы $\hat{u}$ и $\hat{v}$ удовлетворяют условиям

$$\widehat{uu}^+ = \hat{u}^+\hat{u} = \hat{1}, \quad \widehat{vv}^+ = \hat{v}^+\hat{v} = \hat{1} , \quad \hat{v}^*\hat{\bar{u}} = e^{i\xi}\hat{\sigma}^{(y)} . \qquad (94)$$

Последнее условие в (94) обеспечивает инвариантность сверхпроводящего потенциала $\hat{\Delta}$ относительно вращений в спиновом пространстве. В частности, выбрав фазу $\xi = -\pi/2$, можно положить

$$\hat{u} = \hat{1} , \quad \hat{v} = -i\hat{\sigma}^{(y)} . \qquad (95)$$

Согласно (89), (94), спиновые волновые функции при инверсии времени преобразуются по правилам

$$K\hat{u} = \hat{\sigma}^{(y)}\hat{u}^* , \quad K\hat{v} = -\hat{\sigma}^{(y)}\hat{v}^* . \qquad (96)$$

Тогда для выполнимости соотношений (89) для координатных волновых функций должно быть

$$Ku(\mathrm{x}) = u^*(\mathrm{x}) , \quad Kv(\mathrm{x}) = v^*(\mathrm{x}) . \qquad (97)$$

В последнем случае $K^2 = 1$, тогда как для случая со спином (89), (96) $K^2 = -1$. В бесспиновом случае кристаллическая симметрия «чувствуется» только координатными волновыми функциями и, как указывалось, для классификации электронных состояний необходимо использовать не двойные, а простые пространственные группы.

Таким образом, и в случае взаимодействующих электронов, если выполнено условие $\varepsilon_{\nu\sigma}(\mathrm{A}) = \varepsilon_{\nu\sigma}(-\mathrm{A})$, справедливы обычные правила [23], определяющие роль симметрии относительно обращения времени. При условии а) (T эквивалентно T^* и вещественно) для случая со спином вырождение удваивается, а для бесспинового случая нет. При условии в) (T и T^* эквивалентны, но не вещественны) — наоборот. При условии б) (T и T^* не эквивалентны) вырождение удваивается в обоих случаях. Критерий, по которому можно установить, к какому из трех типов а), б), в) относится данное представление T, установлен Фробениусом и Шуром:

$$\frac{1}{N_G}\sum_g \chi(g^2) = \begin{cases} 1, & \text{а)} \\ 0, & \text{б)} \\ -1, & \text{в)} \end{cases}, \qquad (98)$$

где N_G — число элементов группы G, а $\chi(g)$ — характеры представления. Для пространственных групп этот критерий представлен Херрингом в виде [20]

$$\frac{1}{N_{G_k}}\sum_g \chi_k(g^2)\delta_{\mathrm{k},-g\mathrm{k}} = \begin{cases} 1, & \text{а)} \\ 0, & \text{б)} \\ -1, & \text{в)} \end{cases}, \qquad (99)$$

Здесь суммирование ведется по элементам группы волнового вектора, не содержащим примитивных трансляций, а N_{G_k} — число таких элементов.

Проведенное рассмотрение роли инверсии времени для взаимодействующей системы электронов в приближении среднего поля справедливо при выполнении условий (83). Нетрудно показать, что эти условия в самом деле выполнены. Действительно, в определения потенциалов (39), (40) входят суммы по всем различным электронным состояниям. Если $\varepsilon_{\nu\sigma}(\mathrm{A}) \neq \varepsilon_{\nu\sigma}(-\mathrm{A})$, то в них присутствуют взаимно обращенные во времени состояния. Для каждой пары таких слагаемых условия (83) выполнены. Если же $\varepsilon_{\nu\sigma}(\mathrm{A}) = \varepsilon_{\nu\sigma}(-\mathrm{A})$, то здесь имеются три указанных выше случая: а), б), в). Для тех представлений, где кратность вырождения вследствие инверсии времени удваивается в суммы, определяющие самосогласованные потенциалы, также входят взаимно обращенные во времени состояния и для таких слагаемых условия (83) выполнены. Для представлений, где нет дополнительного вырождения, условия (83) выполнены вследствие линейных зависимостей (92).

5. Классификация типов решений самосогласованных уравнений

В общем случае, когда зависимость от спиновых переменных существенна, представление (93) не справедливо, но можно разложить волновые функции по матрицам Паули $\hat{\vec{\sigma}}$, выделив скалярную и векторную части относительно вращений в спиновом пространстве:

$$\begin{aligned} \hat{u}(\mathrm{x}) &= u(\mathrm{x})\hat{1} + \mathrm{u}(\mathrm{x})\hat{\vec{\sigma}}, \\ \hat{v}(\mathrm{x}) &= -i\,[v(\mathrm{x})\hat{\sigma}^{(y)} + \mathrm{v}(\mathrm{x})(\hat{\sigma}^{(y)}\hat{\vec{\sigma}})], \end{aligned} \qquad (100)$$

где

$$u = \frac{1}{2}\mathrm{Sp}\,\hat{u}, \quad \mathrm{u} = \frac{1}{2}\mathrm{Sp}\,\hat{\vec{\sigma}}\hat{u},$$

$$v = \frac{i}{2}\mathrm{Sp}\,\hat{\sigma}^{(y)}\hat{v}, \quad \mathrm{v} = \frac{i}{2}\mathrm{Sp}\,(\hat{\vec{\sigma}}\hat{\sigma}^{(y)}\hat{v}).$$

Аналогично разлагаются самосогласованные потенциалы

$$\hat{W} = W\hat{1} + \mathrm{W}\hat{\vec{\sigma}}, \quad \hat{\Delta} = -i\,[\Delta\hat{\sigma}^{(y)} + \vec{\Delta}(\hat{\vec{\sigma}}\hat{\sigma}^{(y)})] \qquad (101)$$

Система самосогласованных уравнений может быть записана для двух скалярных u, v и двух векторных u, v неизвестных функций. Удобно ввести новые переменные:

$$u_\rho = u_x \pm iu_y, \quad u_\rho^{(0)} = u \pm u_z, \quad (\rho = \pm) \qquad (102)$$

и точно также для v_ρ, $v_\rho^{(0)}$, Ω_ρ, $\Omega_\rho^{(0)}$, Δ_ρ, $\Delta_\rho^{(0)}$. В этом случае имеем систему

$$\int d\mathrm{x}'\left[\hat{\hat{\Omega}}_\rho(\mathrm{x},\mathrm{x}') - \varepsilon_{\nu\rho}\,\delta(\mathrm{x}-\mathrm{x}')\right]\hat{\hat{\varphi}}_{\nu\rho}(\mathrm{x}') = 0, \qquad (103)$$

где $\varepsilon_{\nu+} = \varepsilon_{\nu 1}$, $\varepsilon_{\nu-} = \varepsilon_{\nu 2}$,

$$\hat{\hat{\Omega}}_\rho = \begin{vmatrix} \Omega_\rho^{(0)} & \Omega_{\bar\rho} & \Delta_\rho^{(0)} & \Delta_{\bar\rho} \\ \Omega_\rho & \Omega_{\bar\rho}^{(0)} & \Delta_\rho & \Delta_{\bar\rho}^{(0)} \\ \Delta_{\bar\rho}^{(0)*} & -\Delta_\rho^* & -\Omega_{\bar\rho}^{(0)*} & \Omega_\rho^* \\ -\Delta_{\bar\rho}^* & \Delta_\rho^{(0)*} & \Omega_{\bar\rho}^* & -\Omega_\rho^{(0)*} \end{vmatrix},$$

$$\hat{\hat{\varphi}}_{\nu\rho} = \begin{bmatrix} u_{\nu\rho}^{(0)} \\ u_{\nu\rho} \\ -v_{\nu\rho}^{(0)} \\ -v_{\nu\rho} \end{bmatrix}, \quad \bar\rho = -\rho. \qquad (104)$$

То, что система обобщенных уравнений ХФБ распалась на две подсистемы для функций $\hat{\hat{\varphi}}_{\nu+}$, $\hat{\hat{\varphi}}_{\nu-}$,

не означает, что эти подсистемы независимы, поскольку потенциалы W и $\hat{\Delta}$ определяются обеими этими совокупностями функций. Выражения для самосогласованных потенциалов через переменные (102) легко получить из соотношений (39), (40).

Приведенная в данном разделе формулировка системы самосогласованных уравнений удобна для классификации ее возможных типов решений. Найдем все возможные частные типы решений самосогласованных уравнений, для которых какие-либо из скалярных функций u, v или компонент векторных функций $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$ равны нулю. Результаты анализа приведены в табл. 1 и 2. Решения для нормальной и сверхпроводящей фаз обозначены соответственно N и S. В каждом из этих случаев решения разбиваются на такие, для которых энергия квазичастиц с одинаковыми квантовыми числами, но разными проекциями спина на ось z, различна ($\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$) (они обозначены N_{I} и S_{I}), и такие, для которых эти энергии равны ($\varepsilon_1 = \varepsilon_2$) (обозначены N_{II} и S_{II}). Решения, различающиеся знаком штриха (например $N_{\mathrm{I}A}$ и $N'_{\mathrm{I}A}$ и др.) эквивалентны. Так, $N_{\mathrm{I}A}$ и $N'_{\mathrm{I}A}$ отличаются только тем, что для $N_{\mathrm{I}A}$ энергия ε_1 отвечает состоянию со спином вверх, ε_2 — со спином вниз, а для $N'_{\mathrm{I}A}$ — наоборот. В нормальной фазе имеются два существенно различных типа решений с $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$: наиболее общее решение N_{I} и решение $N_{\mathrm{I}A}$, описывающее стонеровский магнетизм электронов проводимости.

Имеются три типа решений с $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, обозначенные $N_{\mathrm{II}A}$, $N_{\mathrm{II}B}$, $N_{\mathrm{II}C}$. Решения $N_{\mathrm{II}C}$ соответствуют немагнитной нормальной фазе, самосогласованные уравнения для которой в предлагаемом подходе рассматривались в [9].

В сверхпроводящей фазе имеются три существенно различных типа решений с $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$: S_{I}, $S_{\mathrm{I}A}$, $S_{\mathrm{I}B}$, первое из которых наиболее общее. Кроме того, существуют восемь типов решений с $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$: $S_{\mathrm{II}A}$, $S_{\mathrm{II}A_1}$, $S_{\mathrm{II}B}$, $S_{\mathrm{II}B_1}$, $S_{\mathrm{II}C}$, $S_{\mathrm{II}C_1}$, $S_{\mathrm{II}C_2}$, $S_{\mathrm{II}C_3}$. Решение $S_{\mathrm{II}C}$ описывает сверхпроводимость с синглетным спариванием, а решения $S_{\mathrm{I}B}$, $S_{\mathrm{II}A_1}$, $S_{\mathrm{II}B_1}$, $S_{\mathrm{II}C_1}$ — сверхпроводимость с триплетным спариванием. Решения S_{I}, $S_{\mathrm{I}A}$, $S_{\mathrm{II}A}$, $S_{\mathrm{II}B}$ соответствуют сверхпроводящим фазам, в которых реализуется суперпозиция синглетного и триплетного спариваний. Поскольку спиновая намагниченность $\mathbf{M} \propto \mathbf{W}$, то из таблиц видно, что решения N_{I}, $N_{\mathrm{I}A}$, $N_{\mathrm{II}A}$, $N_{\mathrm{II}B}$ и S_{I}, $S_{\mathrm{I}A}$, $S_{\mathrm{I}B}$, $S_{\mathrm{II}A}$, $S_{\mathrm{II}A_1}$, $S_{\mathrm{II}B}$, $S_{\mathrm{II}B_1}$ описывают фазы с отличной от нуля намагниченностью. В случае сверхпроводящих решений это означает сосуществование сверхпроводимости и магнетизма. Естественно, для того чтобы реализовалась возможность существования таких фаз требуется выполнение условий их стабильности.

Таблица 1

Возможные типы решений системы самосогласованных уравнений, описывающей нормальные состояния

Тип решения	u	$\mathbf{u}$	W	$\mathbf{W}$
N_{I}	$\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$			
I	u	$\mathbf{u}$	W	$\mathbf{W}$
IA	u	u_z	W	W_z
IA'	–	u_x, u_y	W	W_z
N_{II}	$\varepsilon_1 = \varepsilon_2$			
IIA	u	u_y	W	W_y
IIA'	–	u_x, u_z	W	W_y
IIB	u	u_x	W	W_x
IIB'	–	u_y, u_z	W	W_x
IIC	u	–	W	–
IIC'	–	u_z	W	–
IIC''	–	u_x	W	–
IIC'''	–	u_y	W	–

Не имея возможности привести в данной работе анализ всех типов решений, кратко рассмотрим сверхпроводимость с синглетными парами (решение $S_{\mathrm{II}C}$) и решение $N_{\mathrm{I}A}$, описывающее ферромагнетизм коллективизированных электронов.

6. Сверхпроводимость с синглетным спариванием

Система самосогласованных уравнений для сверхпроводящего состояния с синглетным спариванием (решение $S_{\mathrm{II}C}$ в табл. 2) может быть получена из общих соотношений, приведенных выше, и имеет вид

$$\begin{aligned}
\left[H(\mathrm{x}) - \varepsilon_\nu\right] u_\nu(\mathrm{x}) + \int d\mathrm{x}' \left[W(\mathrm{x}, \mathrm{x}') u_\nu(\mathrm{x}') - \Delta(\mathrm{x}, \mathrm{x}') v_\nu(\mathrm{x}')\right] = 0\,, \\
\left[H^*(\mathrm{x}) + \varepsilon_\nu\right] v_\nu(\mathrm{x}) + \int d\mathrm{x}' \left[W^*(\mathrm{x}, \mathrm{x}') v_\nu(\mathrm{x}') + \Delta^*(\mathrm{x}, \mathrm{x}') u_\nu(\mathrm{x}')\right] = 0\,,
\end{aligned} \tag{105}$$

Таблица 2

Возможные типы решений системы самосогласованных уравнений, описывающей сверхпроводящее состояние

Тип решения	u	$\mathbf{u}$	v	$\mathbf{v}$	W	$\mathbf{W}$	Δ	$\vec{\Delta}$
S_{I}	$\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$							
I	u	$\mathbf{u}$	v	$\mathbf{v}$	W	$\mathbf{W}$	Δ	$\vec{\Delta}$
IA	u	u_z	v	v_z	W	W_z	Δ	Δ_z
IA′	–	u_x, u_y	–	v_x, v_y	W	W_z	Δ	Δ_z
IB	u	u_z	–	v_x, v_y	W	W_z	–	Δ_x, Δ_y
IB′	–	u_x, u_y	v	v_z	W	W_z	–	Δ_x, Δ_y
S_{II}	$\varepsilon_1 = \varepsilon_2$							
IIA	u	u_y	v	v_y	W	W_y	Δ	Δ_y
IIA′	–	u_x, u_z	–	v_x, v_z	W	W_y	Δ	Δ_y
IIA_1	u	u_y	–	v_x, v_z	W	W_y	–	Δ_x, Δ_z
IIA_1'	–	u_x, u_z	v	v_y	W	W_y	–	Δ_x, Δ_z
IIB	u	u_x	v	v_x	W	W_x	Δ	Δ_x
IIB′	–	u_y, u_z	–	v_y, v_z	W	W_x	Δ	Δ_x
IIB_1	u	u_x	–	v_y, v_z	W	W_x	–	Δ_y, Δ_z
IIB_1'	–	u_y, u_z	v	v_x	W	W_x	–	Δ_y, Δ_z
IIC	u	–	v	–	W	–	Δ	–
IIC′	–	u_z	–	v_z	W	–	Δ	–
IIC″	–	u_x	–	v_x	W	–	Δ	–
IIC‴	–	u_y	–	v_y	W	–	Δ	–
IIC_1	u	–	–	v_z	W	–	–	Δ_z
IIC_1'	–	u_z	v	–	W	–	–	Δ_z
IIC_1''	–	u_x	–	v_y	W	–	–	Δ_z
IIC_1'''	–	u_y	–	v_x	W	–	–	Δ_z
IIC_2	u	–	–	v_x	W	–	–	Δ_x
IIC_2'	–	u_z	–	v_y	W	–	–	Δ_x
IIC_2''	–	u_x	v	–	W	–	–	Δ_x
IIC_2'''	–	u_y	–	v_z	W	–	–	Δ_x
IIC_3	u	–	–	v_y	W	–	–	Δ_y
IIC_3'	–	u_z	–	v_x	W	–	–	Δ_y
IIC_3''	–	u_x	–	v_z	W	–	–	Δ_y
IIC_3'''	–	u_y	v	–	W	–	–	Δ_y

а потенциалы определяются выражениями

$$W(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \sum_{\nu} \left[u_{\nu}^{*}(\mathbf{x}') u_{\nu}(\mathbf{x}) f_{\nu} + v_{\nu}(\mathbf{x}') v_{\nu}^{*}(\mathbf{x}) \left(1 - f_{\nu}\right) \right] +$$

$$+ 2\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \sum_{\nu} \int d\mathbf{x}'' U(\mathbf{x}, \mathbf{x}'') \left[u_{\nu}^{*}(\mathbf{x}'') u_{\nu}(\mathbf{x}'') f_{\nu} + v_{\nu}^{*}(\mathbf{x}'') v_{\nu}(\mathbf{x}'') \left(1 - f_{\nu}\right) \right], \tag{106}$$

$$\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{2} U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \sum_{\nu} \left[u_{\nu}(\mathbf{x}) v_{\nu}^{*}(\mathbf{x}') + u_{\nu}(\mathbf{x}') v_{\nu}^{*}(\mathbf{x}) \right] \left(1 - 2 f_{\nu}\right). \tag{107}$$

Искомые решения подчиняются условиям

$$\sum_{\nu} \left[u_{\nu}^{*}(\mathbf{x}) u_{\nu}(\mathbf{x}') + v_{\nu}(\mathbf{x}) v_{\nu}^{*}(\mathbf{x}') \right] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \sum_{\nu} \left[u_{\nu}(\mathbf{x}) v_{\nu}^{*}(\mathbf{x}') - v_{\nu}^{*}(\mathbf{x}) u_{\nu}(\mathbf{x}') \right] = 0,$$

$$\int d\mathbf{x} \left[u_{\nu}(\mathbf{x}) u_{\nu'}^{*}(\mathbf{x}) + v_{\nu}(\mathbf{x}) v_{\nu'}^{*}(\mathbf{x}) \right] = \delta_{\nu\nu'}, \quad \int d\mathbf{x} \left[u_{\nu}(\mathbf{x}) v_{\nu'}(\mathbf{x}) - v_{\nu}(\mathbf{x}) u_{\nu'}(\mathbf{x}) \right] = 0. \tag{108}$$

Предположим, что выше точки сверхпроводящего перехода T_c система электронов описывается решением $N_{\text{ПС}}$, хотя, в принципе, возможно рассматривать переход из произвольной фазы. Таким образом, нормальное состояние характеризуется системой уравнений

$$\left[H(\mathbf{x}) - E_{\nu} \right] \varphi_{\nu}(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{x}' \, \underline{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\nu}(\mathbf{x}') = 0, \tag{109}$$

где

$$\underline{W}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \sum_{\nu} \varphi_{\nu}^{*}(\mathbf{x}') \varphi_{\nu}(\mathbf{x}) f(E_{\nu}) + 2\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \sum_{\nu} \int d\mathbf{x}'' U(\mathbf{x}, \mathbf{x}'') \varphi_{\nu}^{*}(\mathbf{x}'') \varphi_{\nu}(\mathbf{x}'') f(E_{\nu}), \tag{110}$$

а ее решения удовлетворяют условиям нормировки и полноты. В принципе, в результате фазового перехода в сверхпроводящее состояние может нарушаться не только калибровочная симметрия, но и понижаться пространственная симметрия распределения электронов в кристалле. Будем, однако, полагать, что этого не происходит и пространственные симметрии распределения электронов нормального и сверхпроводящего состояний одинаковы. Электрон в решетке будем характеризовать квазиимпульсом и номером зоны, так что $\nu \equiv (\mathbf{k}, n)$. Чтобы выделить эффекты, обусловленные сверхпроводимостью, предположим, что нам известны решения самосогласованных уравнений (105), (110) в нормальном состоянии. Тогда волновые функции в (105)–(108) могут быть разложены по полной системе функций $\{\varphi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{x})\}$:

$$u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{x}) = \sum_{n'} A_{nn'} \varphi_{\mathbf{k}n'}(\mathbf{x}), \quad v_{\mathbf{k}n}(\mathbf{x}) = \sum_{n'} B_{nn'} \varphi_{\mathbf{k}n'}^{*}(\mathbf{x}). \tag{111}$$

Подстановка разложений (111) в (105)–(108) дает систему алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} \left(E_{\mathbf{k}n'} - \varepsilon_{\mathbf{k}n}\right) A_{nn'} + \sum_{n''} \left(W_{\mathbf{k}n'n''} - \underline{W}_{\mathbf{k}n'n''} \right) A_{nn''} - \sum_{n''} \Delta_{\mathbf{k}n'n''} B_{nn''} = 0, \\ \left(E_{\mathbf{k}n'} + \varepsilon_{\mathbf{k}n}\right) B_{nn'} + \sum_{n''} \left(W_{\mathbf{k}n'n''}^{*} - \underline{W}_{\mathbf{k}n'n''}^{*} \right) B_{nn''} + \sum_{n''} \Delta_{\mathbf{k}n'n''}^{*} A_{nn''} = 0, \end{aligned} \tag{112}$$

причем

$$W_{\mathbf{k}n'n''} = \sum_{\mathbf{k}';nn_1n_2} U_{n'n'';n_1n_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left[A_{nn_1}^{*} A_{nn_2} f(\varepsilon_{\mathbf{k}'n}) + B_{nn_1} B_{nn_2}^{*} \left(1 - f(\varepsilon_{\mathbf{k}'n})\right) \right], \tag{113}$$

$$\underline{W}_{\mathbf{k}n'n''} = \sum_{\mathbf{k}';n} U_{n'n'';nn}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(E_{\mathbf{k}'n}), \tag{114}$$

$$\Delta_{\mathbf{k}n'n''} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}';nn_1n_2} V_{n'n'';n_1n_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left[A_{nn_1} B^*_{nn_2} + A_{nn_2} B^*_{nn_1} \right] \left(1 - 2f(\varepsilon_{\mathbf{k}'n})\right) . \tag{115}$$

В (113)–(115) матричные элементы межэлектронного взаимодействия определены соотношениями

$$U = 2U' - U'' ,$$

$$U'_{n'n'';n_1n_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \int dx dx' U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi^*_{\mathbf{k}n'}(\mathbf{x}) \varphi^*_{\mathbf{k}'n_1}(\mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}'n_2}(\mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}n''}(\mathbf{x}) ,$$

$$U''_{n'n'';n_1n_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \int dx dx' U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi^*_{\mathbf{k}n'}(\mathbf{x}) \varphi^*_{\mathbf{k}'n_1}(\mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}n''}(\mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}'n_2}(\mathbf{x}) , \tag{116}$$

$$V_{n'n'';n_1n_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \int dx dx' U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi^*_{\mathbf{k}n'}(\mathbf{x}) \varphi^*_{\mathbf{k}n''}(\mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}'n_2}(\mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}'n_1}(\mathbf{x}) .$$

Из (108) следуют условия для коэффициентов $A_{nn'}$, $B_{nn'}$:

$$\sum_n \left(A^*_{nn'} A_{nn''} + B^*_{nn'} B_{nn''} \right) = \sum_n \left(A^*_{n'n} A_{n''n} + B^*_{n'n} B_{n''n} \right) = \delta_{n'n''} ,$$

$$\sum_n \left(A_{nn'} B^*_{nn''} - B^*_{nn'} A_{nn''} \right) = \sum_n \left(A_{n'n} B_{n''n} - B_{n'n} A_{n''n} \right) = 0 . \tag{117}$$

Системы уравнений (105)–(108) или (109)–(117) описывают электроны в металле в сверхпроводящем состоянии и могут быть решены, если известны: 1) потенциал взаимодействия электронов с ионами, 2) межэлектронное взаимодействие, 3) симметрия кристаллической решетки. Каких-либо дополнительных предположений не требуется. Если дополнительно принять во внимание, что в сверхпроводимость дают вклад только электроны частично заполненных зон и предположить, что имеется только одна такая зона, то формулы значительно упрощаются. Учитывая в суммах по зонному индексу в (112)–(117) только одну зону, находим закон дисперсии квазичастицы в сверхпроводящем состоянии

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \sqrt{\left(E_{\mathbf{k}} + \delta W_{\mathbf{k}}\right)^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} , \tag{118}$$

где $\delta W_{\mathbf{k}} = W_{\mathbf{k}} - \underline{W}_{\mathbf{k}}$ описывает изменение нормального самосогласованного потенциала при переходе в сверхпроводящее состояние. Для $\Delta_{\mathbf{k}}$ и $\delta W_{\mathbf{k}}$ получаем систему уравнений

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \left[1 - 2f(\varepsilon_{\mathbf{k}'})\right] , \tag{119}$$

$$\delta W_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} U(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left[1 - \frac{E_{\mathbf{k}'} + \delta W_{\mathbf{k}'}}{\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \left(1 - 2f(\varepsilon_{\mathbf{k}'})\right) - 2f(E_{\mathbf{k}'}) \right] . \tag{120}$$

Обычно величиной $\delta W_{\mathbf{k}}$ пренебрегают и тогда соотношение (119) совпадает с известным соотношением теории сверхпроводимости [12]. Критическая температура T_c определяется из линеаризованного уравнения (119), поскольку величина $\delta W_{\mathbf{k}}$ вблизи T_c квадратична по $\Delta_{\mathbf{k}}$. Аналогично при учете двух или большего числа зон могут быть получены соотношения теории [13,14], феноменологически обобщившей теорию БКШ на многозонный случай.

7. Ферромагнетизм коллективизированных электронов

Рассмотрим решение, отмеченное в табл. 1 как N_{1A}. Из общих соотношений, полученных в данной работе, следуют уравнения

$$\left[H(\mathrm{x}) - \varepsilon_{\nu\rho}\right] u^{(0)}_{\nu\rho}(\mathrm{x}) + \int d\mathrm{x}' W^{(0)}_{\rho}(\mathrm{x}, \mathrm{x}') u^{(0)}_{\nu\rho}(\mathrm{x}') = 0 , \quad \rho = \pm , \tag{121}$$

где потенциалы определены выражениями

$$W^{(0)}_{\rho}(\mathrm{x}, \mathrm{x}') = -U(\mathrm{x}, \mathrm{x}') \sum_{\nu} u^{(0)*}_{\nu\rho}(\mathrm{x}') u^{(0)}_{\nu\rho}(\mathrm{x}) f_{\nu\rho} + \delta(\mathrm{x} - \mathrm{x}') \sum_{\nu\rho'} \int d\mathrm{x}'' U(\mathrm{x}, \mathrm{x}'') u^{(0)*}_{\nu\rho'}(\mathrm{x}'') u^{(0)}_{\nu\rho'}(\mathrm{x}'') f_{\nu\rho'} . \tag{122}$$

Искомые решения подчинены условиям

$$\sum_{\nu} u^{(0)*}_{\nu\rho}(\mathrm{x}) u^{(0)}_{\nu\rho}(\mathrm{x}') = \delta(\mathrm{x} - \mathrm{x}') , \quad \int d\mathrm{x} u^{(0)}_{\nu\rho}(\mathrm{x}) u^{(0)*}_{\nu'\rho}(\mathrm{x}) = \delta_{\nu\nu'} . \tag{123}$$

Среднее значение спинового магнитного момента определяется выражением

$$M_z = \mu_B \sum_{\nu} \left(f_{\nu+} - f_{\nu-}\right) , \tag{124}$$

а среднее число электронов равно

$$N = \sum_{\nu} \left(f_{\nu+} + f_{\nu-}\right) . \tag{125}$$

Предположим, что решения уравнений (109), (110), описывающих систему электронов в немагнитном состоянии, известны. Полагаем, что состояние электронов характеризуется квантовыми числами $\nu \equiv (\mathrm{k}, n)$. Решения уравнений (121), (122) могут быть разложены по полной системе функций, являющихся решением системы (109), (110):

$$u^{(0)}_{\mathrm{k}n\rho}(\mathrm{x}) = \sum_{n'} C^{\rho}_{nn'} \varphi_{\mathrm{k}n'}(\mathrm{x}) , \tag{126}$$

причем

$$\sum_{n} C^{\rho*}_{nn'} C^{\rho}_{nn''} = \sum_{n} C^{\rho*}_{n'n} C^{\rho}_{n''n} = \delta_{n'n''} . \tag{127}$$

Подстановка (126) в уравнения (121), (122) дает систему алгебраических уравнений

$$C^{\rho}_{nn'}\left(E_{\mathrm{k}n'} - \varepsilon_{\mathrm{k}n\rho}\right) + \sum_{n''} C^{\rho}_{nn''}\left(W^{(0)}_{\rho\mathrm{k}n'n''} - \underline{W}_{\mathrm{k}n'n''}\right) = 0 , \tag{128}$$

где

$$W^{(0)}_{\rho\mathrm{k}n'n''} = \sum_{\mathrm{k}';nn_1n_2} \left[-U''_{n'n'';n_1n_2}(\mathrm{k}, \mathrm{k}') C^{\rho*}_{nn_1} C^{\rho}_{nn_2} f(\varepsilon_{\mathrm{k}'n\rho}) + U'_{n'n'';n_1n_2}(\mathrm{k}, \mathrm{k}') \sum_{\rho'} C^{\rho'*}_{nn_1} C^{\rho'}_{nn_2} f(\varepsilon_{\mathrm{k}'n\rho'})\right] . \tag{129}$$

Системы уравнений (121)–(123) или (127)–(129) при известных симметрии решетки, электрон-ионном и электрон-электронном потенциалах описывают ферромагнетизм электронов в металле.

Если дополнительно предположить, что вклад в намагниченность дают электроны одной незаполненной зоны, то законы дисперсии квазичастиц приобретают вид

$$\varepsilon_{\mathrm{k}\rho} = E_{\mathrm{k}} + I_{\rho\mathrm{k}} , \tag{130}$$

где $I_{\rho\mathrm{k}} = W^{(0)}_{\rho\mathrm{k}} - \underline{W}_{\mathrm{k}}$. Из (129), (130) получаем уравнения самосогласования для нахождения $I_{\rho\mathrm{k}}$:

$$I_{+\mathrm{k}} = \sum_{\mathrm{k}'} \left[U'''(\mathrm{k}, \mathrm{k}')\left(f(\varepsilon_{\mathrm{k}'+}) - f(E_{\mathrm{k}'})\right) + U'(\mathrm{k}, \mathrm{k}')\left(f(\varepsilon_{\mathrm{k}'-}) - f(E_{\mathrm{k}'})\right)\right] , \tag{131а}$$

$$I_{-\mathrm{k}} = \sum_{\mathrm{k}'} \left[U'(\mathrm{k}, \mathrm{k}')\left(f(\varepsilon_{\mathrm{k}'+}) - f(E_{\mathrm{k}'})\right) + U'''(\mathrm{k}, \mathrm{k}')\left(f(\varepsilon_{\mathrm{k}'-}) - f(E_{\mathrm{k}'})\right)\right] , \tag{131б}$$

причем $U''' = U' - U''$. Пренебрегая зависимостью матричных элементов взаимодействия от k, k', с учетом (124), (125) получаем, что потенциалы $I_{\rho\mathrm{k}}$ не зависят от квазиимпульса и выражаются через намагниченность

$$I_+ = -I_- = -\frac{U''}{2\mu_B} M_z . \qquad (132)$$

Таким образом, получены соотношения теории Стонера [15], в которой (132) введено феноменологически. Уравнения могут быть представлены и в более общей фермижидкостной формулировке [16–18]. Учет двух или большего числа зон в (128), (129) дает возможность обобщить феноменологическую теорию Стонера на случай нескольких типов носителей и таким образом, например, учесть для $3d$-металлов вклад в магнитные свойства не только d-, но и s-электронов, без которых не удается объяснить целый ряд эффектов [24].

8. Заключение

Как видно из результатов данной статьи, в приближении самосогласованного поля имеется возможность последовательно учесть структуру и симметрию исследуемого вещества и тем самым обобщить теорию зонной структуры, основанную на одноэлектронном приближении, на случай системы взаимодействующих электронов. Полученная здесь обобщенная система уравнений ХФБ, в принципе, описывает любые возможные в рамках выбранного приближения состояния электронной жидкости в кристалле. В качестве иллюстрации кратко рассмотрены два решения, приводящие к известным теориям: 1) сверхпроводимость с синглетным спариванием и 2) магнетизм электронов проводимости. Анализ остальных решений, классификация которых приведена в данной статье, будет дан в отдельной работе. Кроме того, совершенно не были затронуты вычислительные аспекты проблемы, а главное внимание сосредоточено на получении и анализе свойств симметрии самосогласованных уравнений.

Автор благодарит С. В. Пелетминского за благожелательное отношение и обсуждение работы.

1. Д. Хартри, *Расчеты атомных структур*, Изд-во иностр. лит., Москва (1960).
2. V. Fock, *Z. Phys.* **61**, 126 (1930).
3. В. А. Фок, *Начала квантовой механики*, Наука, Москва (1976).
4. Н. Н. Боголюбов, *ДАН СССР* **119**, 224 (1958).
5. Н. Н. Боголюбов, *УФН* **67**, 549 (1959).
6. Дж. Слэтер, *Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел*, Мир, Москва (1978).
7. П. Де Жен, *Сверхпроводимость металлов и сплавов*, Мир, Москва (1968).
8. А. В. Свидзинский, *Пространственно-неоднородные задачи теории сверхпроводимости*, Наука, Москва (1982).
9. Ю. М. Полуэктов, *ФНТ* **21**, 300 (1995).
10. Л. Д. Ландау, *ЖЭТФ* **30**, 1058 (1956).
11. В. В. Красильников, С. В. Пелетминский, А. А. Рожков, А. А. Яценко, *Физика элемент. частиц и атомн. ядра* **19**, 1440 (1988).
12. J. Bardeen, L. Cooper, and J. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
13. В. А. Москаленко, *ФММ* **8**, 503 (1959).
14. H. Suhl, R. T. Matthias, and L. R. Walker, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 552 (1959).
15. E. C. Stoner, *Proc. Roy. Soc.* **A165**, 372 (1938).
16. А. А. Абрикосов, И. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **35**, 771 (1958).
17. И. А. Ахиезер, В. Г. Сыщенко, Е. М. Чудновский, *ФТТ* **16**, 3684 (1974).
18. И. А. Ахиезер, Спиновые волны в зонных магнетиках, в сб.: *Проблемы теории твердого тела*, Наукова думка, Киев (1991).
19. О. В. Ковалев, *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп*, Наука, Москва (1986).
20. Г. Я. Любарский, *Теория групп и ее применение в физике*, ГИТТЛ, Москва (1957).
21. А. И. Ахиезер, С. В. Пелетминский, *Методы статистической физики*, Наука, Москва (1977).
22. П. Мэтьюс, *Релятивистская квантовая теория взаимодействий элементарных частиц*, Изд-во иностр. лит., Москва (1961).
23. Е. Вигнер, *Теория групп*, Изд-во иностр. лит., Москва (1961).
24. И. А. Ахиезер, Магнитные проводники, в сб.: *Проблемы современной физики*, Наукова думка, Киев (1982).

On the self-consistent description of collective states of the conduction electrons in crystals

Yu. M. Poluektov

On the basis of the Hartree-Fock-Bogolubov method, the general approach is formulated permitting description of superconductivity and magnetic phenomena in metals with due account of the symmetry of their crystal lattice. A system of self-consistent equations has been obtained accounting of electron superconducting correlations of singlet and triplet types and magnetic properties of electronic liquid. A classification of the possible types of the solutions to the equations obtained is given. It is shown that the equations obtained by the theories proposed can be expressed as the Fermi-liquid theory correlations generalised with account of the superconducting correlations and the Fermi-liquid parameters are expressed through the solutions of the self-consistent equations as well as the potentials of electron-ion and interelectronic interactions. The symmetry properties of the set of the self-consistent equations are studied with respect to the space groups transformations and time-reversal transformation. The particular solutions describing the superconducting state with singlet pairs and ferromagnetism of collective electrons are also considered.