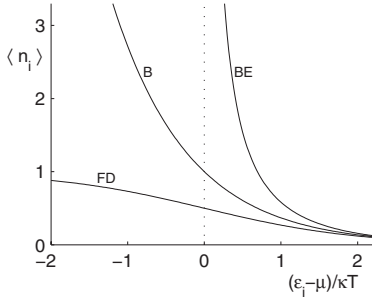


Střední hodnotu počtu fermionů v i -tém kvantovém stavu dává Fermiho-Diracova statistika

$$\langle n_i \rangle_{\text{FD}} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/\kappa T} + 1}. \quad (2.20)$$

Protože $0 \leq \langle n_i \rangle_{\text{FD}} \leq 1$, lze veličinu $\langle n_i \rangle_{\text{FD}}$ též interpretovat jako pravděpodobnost obsazení hladiny s energií ε_i .



Obr. 2.1:
Střední hodnota počtu částic $\langle n_i \rangle$ v i -tém stavu jako funkce $(\varepsilon_i - \mu)/\kappa T$ pro všechny statistiky.

Ve vzorcích značí μ chemický potenciál [8, 16, 119], o němž se ještě dále zmíníme. Připomeňme si ještě, že klasická *Boltzmannova statistika* dává

$$\langle n_i \rangle_{\text{B}} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/\kappa T}} = A e^{-\varepsilon_i/\kappa T}. \quad (2.21)$$

Funkce (2.19)–(2.21) jsou vyneseny v obr. 2.1.

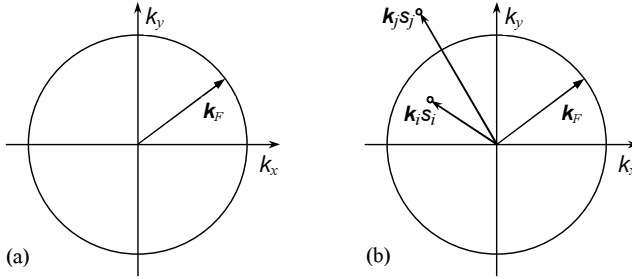
2.3 Volné elektrony v kovu

Než pokročíme dále, aplikujeme získané poznatky na známý jednoduchý model vodivostních elektronů v kovu. Protože jde o problém podrobně řešený ve většině základních učebnic (např. [18–20, 120]), soustředíme se pouze na výsledky užitečné pro další výklad.

Mějme N vzájemně neinteragujících elektronů v objemu Ω . Bez újmy na obecnosti lze předpokládat, že jde o kvádr s hranami L_x, L_y, L_z ve směru kartézských souřadných os ($\Omega = L_x \times L_y \times L_z$). V oblasti Ω je potenciální energie elektronů V konstantní, takže na ně nepůsobí žádná síla ($F = -\text{grad } V$) a elektrony jsou volné. Nic nebrání tomu, abychom položili $V = 0$.

Hamiltonián (2.10) má pro popsany model tvar

$$H(\xi_1, \dots, \xi_n) = \sum_{i=1}^n \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla_{\mathbf{r}_i}^2, \quad (2.22)$$



Obr. 2.4: (a) Základní stav $|z\rangle$ s energií E_0 ; všechny stavy s $k < k_F$ jsou obsazeny a stavy s $k > k_F$ jsou prázdné. (b) Excitovaný stav $c_{\mathbf{k}_j s_j}^+ c_{\mathbf{k}_i s_i} |z\rangle$.

těchto procesů bývá výhodnější přejít od operátorů c^+ a c k novým operátorům definovaným takto:

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k},s}^+ &= c_{\mathbf{k},s}^+, & \alpha_{\mathbf{k},s} &= c_{\mathbf{k},s} & \text{pro } E(\mathbf{k}) > E_F(0), \\ \beta_{\mathbf{k},s}^+ &= c_{-\mathbf{k},-s}, & \beta_{\mathbf{k},s} &= c_{-\mathbf{k},-s}^+ & \text{pro } E(\mathbf{k}) \leq E_F(0). \end{aligned} \quad (2.64)$$

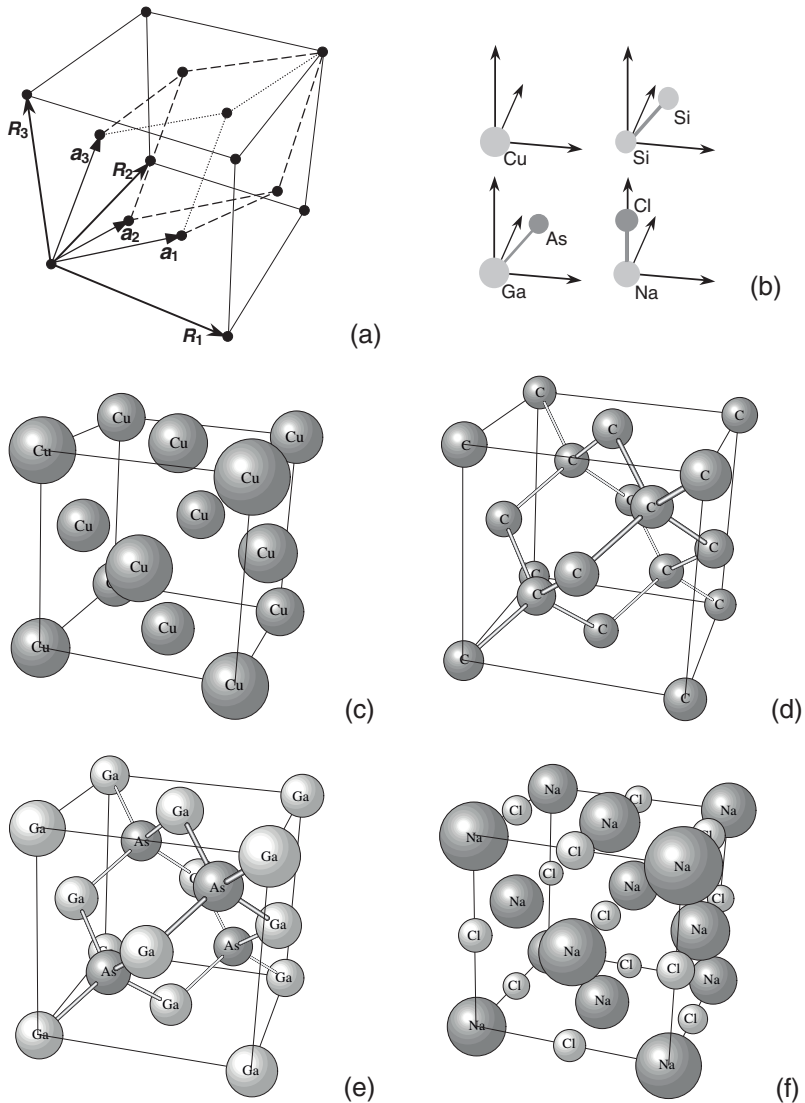
Operátory β^+ (β) provádějí kreaci (anihilaci) díry. Splňují opět antikomutační relace (2.49). Všechny antikomutátory obsahující současně α i β operátory jsou rovny nule. Změna znaménka u (\mathbf{k}, s) v definici děrových operátorů je výhodná z hlediska vyjádření výsledného impulsu souboru. V základním stavu $|z\rangle$ je výsledný impuls

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k},s} \hbar \mathbf{k} n_{\mathbf{k},s} \quad (2.65)$$

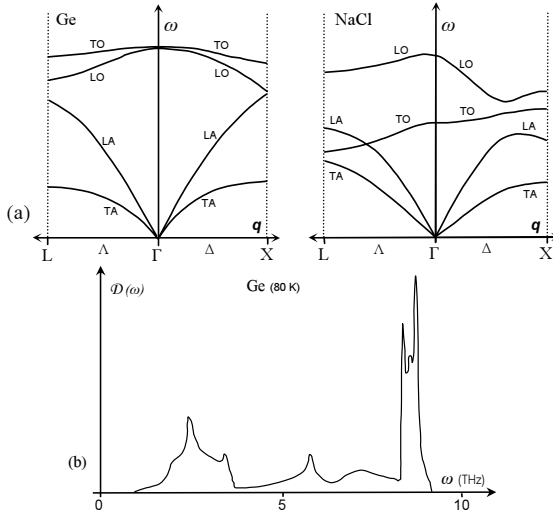
roven nule. Anihilací elektronu ve stavu $(-\mathbf{k}_i)$ ($k_i < k_F$) se impuls souboru zvětší o $(-\hbar \mathbf{k})$. Přihlédneme-li ještě k definici energie díry (2.63a), nepochybíme, když s pojmem díra ve Fermiho vakuu $|z\rangle$ spojíme představu kvazičástice s energií $E^{(d)}(\mathbf{k})$ a impulzem $\hbar \mathbf{k}$.

Rozhodneme-li se ještě odečítat energii od celkové energie základního stavu, tj. položíme v (2.63b) $E_0 = 0$, dostaneme nový obraz souboru n neinteragujících elektronů. Fermiho vakuum $|z\rangle$, v němž převážná většina elektronů nemůže ve shodě s Pauliho principem změnit svoji energii (a projevit se tak v experimentech), hraje nyní druhořadou úlohu; funguje pouze jako pozadí, na němž „žije“ velice zředěný ideální plyn (přijatá interpretace je rozumná jen pro málo excitované stavy) *kvazičástic – elektronů a děr*. Jeho hamiltonián má prostý tvar

$$\mathbf{H} = \sum_{\mathbf{k} > k_F} \sum_s E(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k},s}^+ \alpha_{\mathbf{k},s} - \sum_{\mathbf{k} \leq k_F} \sum_s E(\mathbf{k}) \beta_{\mathbf{k},s}^+ \beta_{\mathbf{k},s}. \quad (2.66)$$



Obr. 3.1: Bravaisova kubická plošně centrovaná mříž a krystalové mříže z ní odvozené. (a) Bravaisova elementární buňka je určena vektory R_1 , R_2 , R_3 , primitivní buňku určují základní translační vektory a_1 , a_2 , a_3 . (b) Hmotné báze pro následující čtyři krystalové mříže: (c) Cu (nebo např. Al, Pb), (d) diamant (Si, Ge, α -Sn), (e) GaAs (GaP, InSb, ZnS), (f) NaCl.



Obr. 5.2: (a) Disperzní fononové závislosti pro Ge a NaCl (podle [78, 79]), (b) hustota fononových stavů (vlastních frekvencí) pro Ge (podle [80]).

Ke každé této tzv. *vlastní frekvenci mříže* dostaneme z (5.18) nenulové řešení: k $\omega_j^2(\mathbf{q})$ ($j = 1, \dots, 3s$) složky $U_\beta(v; \mathbf{q}j)$ ($v = 1, \dots, s; \beta = x, y, z$).

Zbývá nám nyní odpovědět na otázku, jakých hodnot může nabývat vektor \mathbf{q} . Stačí však porovnat (5.15) s Blochovým teorémem (3.8) a uvědomit si analogie:

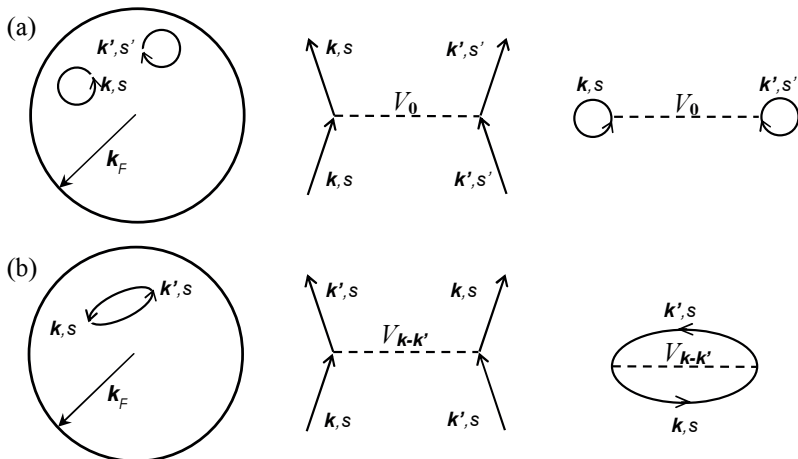
$$\begin{array}{ll}
 \mathbf{r} \text{ (mění se spojitě)} & : \quad \mathbf{T}_m + \boldsymbol{\rho}_\mu \equiv (\mathbf{m}\mu) \text{ (mění se skokem)} \\
 \psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar} & : \quad u_\alpha(\mathbf{m}\mu; t) = u_\alpha(\mathbf{m}\mu) e^{-i\omega t} \\
 \psi(\mathbf{r} + \mathbf{T}_n) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}_n} \psi(\mathbf{r}) & : \quad u_\alpha((\mathbf{m} + \mathbf{n})\mu) = e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{T}_n} u_\alpha(\mathbf{m}\mu) \\
 \psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} & : \quad u_\alpha(\mathbf{m}\mu) = U_\alpha(\mu) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{T}_m} \\
 u(\mathbf{r} + \mathbf{T}_n) = u(\mathbf{r}) & : \quad U_\alpha(\boldsymbol{\rho}_\mu + \mathbf{T}_n) = U_\alpha(\boldsymbol{\rho}_\mu) \equiv U_\alpha(\mu)
 \end{array} \quad (5.21)$$

a bude nám ihned jasné, že pro vektory \mathbf{q} musí platit vše, co platilo pro vektory \mathbf{k} ; speciálně pak: všechna různá řešení dostaneme pro \mathbf{q} z jedné (zpravidla opět první) Brillouinovy zóny.

Pro Bornovu-Kármánovu základní oblast podle obr. 5.1 mají *cyklické okrajové podmínky* tvar

$$u_\alpha(\mathbf{m} + N_i \mathbf{a}_i, \mu) = u_\alpha(\mathbf{m}\mu) \quad (i = 1, 2, 3), \quad (5.22)$$

takže 1.BZ obsahuje $N = N_1 N_2 N_3$ různých vektorů \mathbf{q} , pro něž dostaneme z (5.19) $3Ns$ vlastních frekvencí mříže (5.20). Protože \mathbf{q} se v BZ mění (kvazi)spojitě, jsou



Obr. 6.1: Různá znázornění procesů, které mohou přispívat do $\Delta E^{(1)}$: (a) procesy přímé, (b) procesy výměnné. Čárkovanou čarou je znázorněna interakce vedoucí k rozptylu, při němž si elektrony předávají impuls $\hbar\mathbf{K}$: (a) $\mathbf{K} = 0$, (b) $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$.

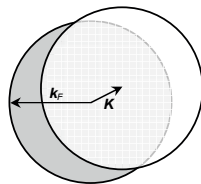
získané v Hartreeho aproximaci (druhý člen na pravé straně (2.74), za ψ_i jsou dosazeny funkce (2.24) [32]). Potenciál kladného náboje $V^{(+)}$ byl zvolen tak, aby se s tímto členem rušil [viz (6.8)]. Přímé procesy se tedy v modelu s hamiltoniánem (6.8) nerealizují, takže Hartreeho aproximace pro něj splývá se Sommerfeldovým modelem volných elektronů probraným v čl. 2.5.

(b) Procesy výměnné, pro něž $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ a $s' = s$, jsou zobrazeny na obr. 6.1b. Při těchto rozptylech se předává impuls $\hbar\mathbf{K}$; protože elektrostatická interakce nemůže ovlivnit spinový stav částice, musí být u obou elektronů stejný ($s' = s$). V elektronovém plynu s hamiltoniánem (6.8) je celá korekce $\Delta E^{(1)}$ určována pouze těmito procesy. Použitím antikomutačních relací přestavíme operátory v (6.22) tak, abychom získali operátory počtu částic; potom

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{vým}}^{(1)} &= \sum_{k, k', s} \langle z | \frac{V_{k'-k}}{2} c_{k',s}^+ c_{k,s}^+ c_{k,s} c_{k',s} | z \rangle = \sum_{k, k', s} \frac{V_{k'-k}}{2} \langle z | -n_{k,s} n_{k',s} | z \rangle = \\ &= \sum_{k, k', s} \frac{V_{k'-k}}{2} \langle z | -n_{k,s} n_{k',s} | z \rangle = -\frac{e^2}{2\epsilon_0\Omega} \sum_{k < k_F} \sum_{k' < k_F} \frac{1}{|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|^2}. \quad (6.24) \end{aligned}$$

Dvojitá sumace se podle vztahu (2.29) převede na dvojný integrál, který se po přechodu ke sférickým souřadnicím vypočte [23]. Je možné ukázat, že týž výsledek získáme dodáním výměnné energie (2.72) u problému s volnými elektrony [32].

Obr. 6.3:
K výpočtu korekce (6.33).

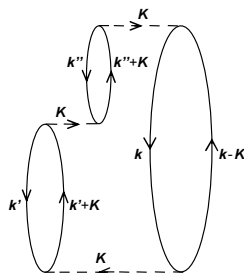


že pro $K \rightarrow 0$ bude (vzhledem k integraci přes \mathbf{K})

$$\Delta E_p^{(2)} = C_{21} \int \frac{dK}{K} \sim \ln K, \quad (6.35)$$

takže $\Delta E_p^{(2)}$ *logaritmicky diverguje*. Znovu vidíme, že příčinou divergence je daleký dosah coulombovských sil. Pro stíněný potenciál (6.5) je V_K^s při $K \rightarrow 0$ konečné a divergence se neobjeví. Podobnou úvahou lze ukázat, že *příspěvek výměnných procesů* (obr. 6.2b) je pro $K \rightarrow 0$ konečný; důvod je v tom, že impulz $\hbar\mathbf{K}$ se při těchto rozptylech přenáší pouze jednou.

Obr. 6.4:
Typ grafu, který přináší do $\Delta E^{(3)}$ při $K \rightarrow 0$ nejsilnější divergující příspěvek.



Ještě silnější divergence než ve výrazu (6.35) se objeví v *korekčních členech vyšších řádů*. Tak např. k $\Delta E^{(3)}$ přispívají procesy, jejichž grafy obsahují tři, dvě nebo jednu interakční linii s přenosem impulzu $\hbar\mathbf{K}$ [30–33, 110–112]. Pro $K \rightarrow 0$ potom dostáváme (C_{ij} jsou konstanty)

$$\Delta E^{(3)} = r_s^2 \left(C_{31} \int \frac{dK}{K^3} + C_{32} \int \frac{dK}{K} + C_{33} \right). \quad (6.36a)$$

Podobně

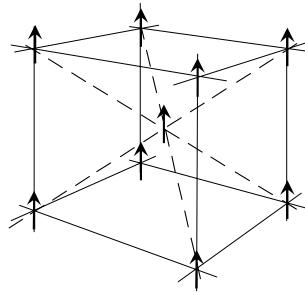
$$\Delta E^{(4)} = r_s^2 \left(C_{41} \int \frac{dK}{K^5} + C_{42} \int \frac{dK}{K^3} + C_{43} \int \frac{dK}{K} + C_{44} \right) \quad (6.36b)$$

a analogicky dále (poznamenejme, že $\Delta E^{(2)} \sim r_s^0$, $\Delta E^{(5)} \sim r_s^3, \dots$). Nejsilnější divergují první členy, při nichž se přenášejí pouze impulzy $\hbar\mathbf{K}$ (obr. 6.4).

7 Magnony

7.1 Výměnná interakce a Heisenbergův hamiltonián

V této kapitole si jen stručně naznačíme, jak vznikají elementární excitace v translacně invariantní soustavě magnetických momentů; příkladem takové soustavy je feromagnetická doména při $T = 0\text{ K}$ [18–20]. K objasnění základních idejí nám postačí jednoduchý model: kubická Bravaisova mříž obsazená atomy jednoho druhu, kde výsledný magnetický moment každého z nich odpovídá spinovému momentu jednoho elektronu a je lokalizován v odpovídajícím mřížovém bodě (obr. 7.1).

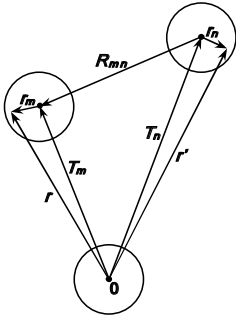


Obr. 7.1:
Magnetické momenty lokalizované v mřížových bodech kubické prostorově centrované mříže.

V základním stavu ($T = 0\text{ K}$) jsou všechny momenty orientovány v téže směru. V excitovaných stavech je jeden či více spinů orientovaných opačně.¹⁾ V ideální mříži ovšem každá lokální excitace odpovídá nestacionárnímu stavu, neboť i v nabuzeném, rovnovážném stavu musí být mříž invariantní k translacím o vektory \mathbf{T}_m . Z tohoto hlediska byla zatím našemu nynějšímu problému nejbližší úloha o kmitech krystalové mříže. Abychom mohli postupovat obdobně i zde, potřebujeme především vyjádřit interakční energii mezi magnetickými momenty.

HEISENBERG a FRENKEL v r. 1928 nezávisle na sobě poukázali na možnost objasnit podstatu Weissova molekulárního pole (viz [18–20]) pomocí tzv. *výměnné interakce* (srov. čl. 2.6). O rok později ukázal DIRAC, že tuto interakční energii je možné aproximativně vyjádřit pomocí spinových operátorů. V tomto místě je vhodné zdůraznit, že přitom *nejde o klasickou dipól-dipólovou interakci magnetických momentů atomů*, která je příliš slabá na to, aby mohla udržet uspořádání momentů v doméně.

¹⁾Obecně je výsledný spin atomu $S \geq \frac{1}{2}$ a počet možných průmětů na zvolenou osu je $2S + 1$. Pouze pro $S = \frac{1}{2}$ je excitace spojena s „převrácením“ spinu (viz dále čl. 7.4).



Obr. 8.3:
Označení polohových vektorů jader (T_m, T_n) a elektronů (r_m, r_n jsou relativní souřadnice) v hamiltoniánu (8.2).

Vlnová funkce základního stavu mříže má v nultém přiblížení tvar¹⁾ [srov. (7.16)]

$$|\Psi_0\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 0_N\rangle = \prod_m |m, 0\rangle. \quad (8.5)$$

V první aproximaci poruchového počtu (dod. A) je energie základního stavu krystalu s hamiltoniánem (8.2) rovna

$$E_0 = N\varepsilon_f + \frac{1}{2} \sum_{\substack{m,n \\ m \neq n}} \langle 0, 0 | V_{mn} | 0, 0 \rangle, \quad (8.6a)$$

kde zápis maticového prvku je speciálním případem výrazu (viz obr. 8.3)


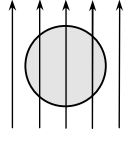

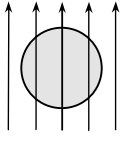
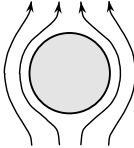
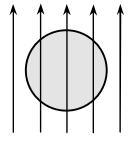
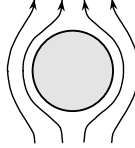
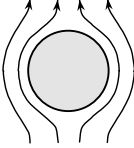

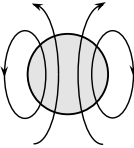

$$\begin{aligned} \langle f', g' | V_{mn} | f, g \rangle &= \langle m, f' | \langle n, g' | V_{mn} | m, f \rangle | n, g \rangle = \\ &= \int \int \varphi_{f'}^*(\mathbf{r} - \mathbf{T}_m) \varphi_{g'}^*(\mathbf{r}' - \mathbf{T}_n) V_{mn} \varphi_f(\mathbf{r} - \mathbf{T}_m) \varphi_g(\mathbf{r}' - \mathbf{T}_n) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (8.6b)$$

Stavu s jedním, např. p -tým atomem excitovaným do stavu $f > 0$ přiřadíme funkci [srov. (7.18)]

$$|\Psi_p^{(1)}\rangle = |0, \dots, 0, f_p, 0, \dots, 0\rangle = |p, f\rangle \prod_{m \neq p} |m, 0\rangle. \quad (8.7)$$

Kdyby mezi atomy neexistovala interakce, byla by to stacionární vlnová funkce souboru atomů. Jinými slovy, excitace by byla lokalizována na jednom z atomů (zde p -tém) libovolně dlouho. Z důvodů, které jsme již uvedli v předcházející kapitole, to však není možné ve stacionárním stavu translačně invariantní soustavy s interakcí.

¹⁾Skutečnost, že se vlnové funkce v našem modelu nepřekrývají, nás do jisté míry opravňuje zanedbat výměnné členy a vzít vlnovou funkci v Hartreeho tvaru (není antisymetrická; viz čl. 2.6).

Ideální vodič		Supravodič		
$T > T_c$				
$B = 0$	$B \neq 0$	$B = 0$	$B \neq 0$	
				
OCHLAZENÍ NA $T < T_c$				
B se zapne	B zůstává	$0 < B < B_c(T)$	B zůstává	
				
		$B \rightarrow 0$		
		$B \rightarrow 0$		

Obr. 10.3: Chování ideálního vodiče a supravodiče v magnetickém poli při ochlazování pod kritickou teplotu T_c .

10.1.5 Hloubka proniku magnetického pole

Nachází-li se supravodič ve vnějším magnetickém poli $B < B_c$,³⁾ potom proudy kompenzující magnetický tok v jeho objemu musí protékat v povrchové vrstvě konečné tloušťky, nemá-li být jejich hustota nekonečná. Následkem toho se nemění magnetická indukce na hranici vzorku skokem, ale postupně klesá v oblasti, v níž cirkulují stínicí proudy. Typická *hloubka proniku* $\lambda \approx 10^{-6} - 10^{-5}$ cm. Experiment ukazuje, že závislost λ na teplotě je možné dobře vystihnout vztahem

$$\lambda(T) = \lambda(0) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^4 \right]^{-1/2}. \quad (10.2)$$

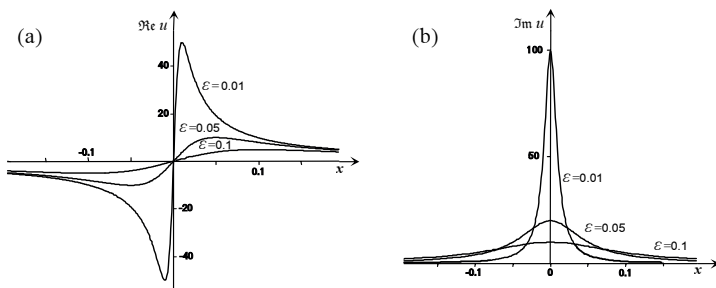
Tato skutečnost vyhovuje Gorterově-Casimirově fenomenologické teorii z r. 1934, která předpokládá, že elektronová kapalina v supravodiči je tvořena *směsí dvou složek – normální a supravodivé*. Poměrné zastoupení těchto složek závisí na teplotě;

³⁾Máme stále na mysli supravodiče 1. typu, které při dosažení magnetické indukce $B = B_c$ skokem přecházejí do normálního stavu.

C Užitečný integrální vzorec

Nechť (obr. C.1)

$$u(x; \varepsilon) = \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} \mp i \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \quad (\varepsilon > 0, \text{ reálné}). \quad (\text{C.1})$$



Obr. C.1: Reálná a imaginární část funkce $u(x; \varepsilon)$ pro různá ε .

Počítejme¹⁾

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \int_{-R}^R u(x; \varepsilon) dx, \quad \text{kde } R \rightarrow \infty.$$

Integrál $\int_{-R}^R \Re u(x; 0) dx$ v běžném slova smyslu není definován, neboť integrály \int_{-R}^0 , \int_0^R divergují. Konverguje však, počítá-li se jako

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \left[\int_{-R}^{-\varepsilon} \frac{dx}{x} + \int_{+\varepsilon}^R \frac{dx}{x} \right]. \quad (\text{C.2})$$

Takto vypočtená limita se nazývá *hlavní hodnota integrálu* a značí se [11, 14]

$$\mathcal{P} \int_{-R}^R \frac{1}{x} dx.$$

¹⁾Integrem se zabýváme proto, že je částí integrace po křivkách C_1 , C_2 v obr. 6.8.