

ПРИМЕНЕНИЕ ДВОЙНОГО КВАНТОВАНИЯ В ДИАМАГНЕТИЗМЕ ЛАНДАУ

И.Н. Алиев
М.Ю. Докукин
З.А. Самедова

alievprof@yandex.ru
DMU252@yandex.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

Аннотация

Для вычисления диамагнитной проницаемости рассмотрена совокупность невзаимодействующих электронов, находящихся в конечном, достаточно большом объеме магнетика. Гамильтониан такой структуры с помощью одноэлектронных функций, включающих в себя операторы рождения и уничтожения, сведен к совокупности операторов, первый из которых представляет собой кинетическую энергию электронов, а два других — малые возмущения. С использованием процедуры теории возмущений вычислена энергия магнитного поля в первом и втором порядке. Показано, что поправка первого порядка равна нулю, поправка второго порядка рассчитана с помощью введения импульса Ферми в случае температуры, близкой к нулю. Результат для энергии представлен в виде ряда с квадратичными по вектор-потенциалу слагаемыми. Объединением воедино полученного результата с представлением энергии через плотность тока электронов найдена связь компонентов плотности тока и соответствующих компонентов вектор-потенциала. Аналогичная связь получена и с помощью фурье-преобразования уравнений Максвелла. При сравнении определенных соотношений выведено выражение для диамагнитной проницаемости, которое с точностью до размерностных множителей, связанных с выбором системы единиц, совпадает с классическим результатом, полученным другим способом

Ключевые слова

Векторный потенциал, оператор Гамильтона, эрмитово сопряженные операторы, символы Кронекера, уравнение Шредингера, теория возмущений, операторы рождения и уничтожения, ферми-импульс, диамагнитная восприимчивость

Поступила в редакцию 18.02.2016

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2016

Работа выполнена при поддержке гранта Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № 3.1526.2014/К)

Введение. Различные аспекты диамагнетизма постоянно находятся в поле зрения исследователей, несмотря на то, что основополагающие работы в этой области были проделаны достаточно давно [1–3]. Так, в исследовании, проведенном в работе [4], при рассмотрении поведения заряженной частицы во внешнем магнитном поле для восприимчивости, заданной в тензорном виде, с использовани-

ем формализма ансамбля Гиббса и уравнений Ланжевена были получены результаты, близкие к результатам, определенным в настоящей работе. Поскольку общие вопросы о природе магнетизма являются до сих пор предметом обсуждения [5], интересно рассмотреть известные результаты, полученные несколько иным образом, что и является предметом настоящего исследования.

Гамильтониан свободных электронов. Гамильтониан H свободных электронов в постоянном магнитном поле с векторным потенциалом $\vec{A}(\vec{r})$ имеет вид

$$H = \sum_{\sigma} \int_V \Psi^+(\vec{r}, \sigma) \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\vec{A} \right)^2 \Psi(\vec{r}, \sigma) dV. \quad (1)$$

Здесь операторные одноэлектронные волновые функции определяют как

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, \sigma) &= \sum_{\vec{p}, s} \Psi_{\vec{p}, s}^-(\vec{r}, \sigma) a_{\vec{p}, s}; \\ \Psi^+(\vec{r}, \sigma) &= \sum_{\vec{p}, s} \Psi_{\vec{p}, s}^*(\vec{r}, \sigma) a_{\vec{p}, s}^+. \end{aligned} \quad (2)$$

В (2) использованы следующие обозначения: $*$ — комплексное сопряжение; $+$ — эрмитовое сопряжение операторов; $a_{\vec{p}, s}$, $a_{\vec{p}, s}^+$ — операторы уничтожения и рождения электронов в одноэлектронном состоянии с импульсом \vec{p} и проекцией спина s , описываемой волновой функцией $\Psi_{\vec{p}, s}(\vec{r}, \sigma)$. Форма выбора оператора Гамильтона в виде (1) достаточно подробно изложена в работах [6, 7]. Отметим, что функции $\Psi_{\vec{p}, s}(\vec{r}, \sigma)$ образуют полный квантово-механический набор ортонормированных одноэлектронных функций

$$\sum_{\sigma} \int_V \Psi_{\vec{p}', s'}^*(\vec{r}, \sigma) \Psi_{\vec{p}, s}(\vec{r}, \sigma) dV = \delta_{\vec{p}', \vec{p}} \delta_{s', s}, \quad (3)$$

где $\delta_{\vec{p}', \vec{p}}$, $\delta_{s', s}$ — импульсный и спиновый символы Кронекера.

Для свободных электронов, находящихся в объеме $V = L^3$, одноэлектронные волновые функции запишем в виде

$$\Psi_{\vec{p}, s}(\vec{r}, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{p}, \vec{r})} \delta_{s, \sigma}. \quad (4)$$

Напомним, что каждый электрон обладает спином $s = 1/2$, проекция которого на формально выбранную ось принимает два значения $\sigma = \pm 1/2$.

С учетом стандартной калибровки векторного потенциала $\text{div} \vec{A} = 0$ соотношение (1) принимает вид

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma} \int_V \Psi^+ \Delta \Psi dV + \frac{i\hbar e}{m} \sum_{\sigma} \int_V \Psi^+ (\vec{A}, \nabla) \Psi dV + \\ &+ \frac{e^2}{2m} \sum_{\sigma} \int_V \Psi^+ A^2 \Psi dV = H_0 + H_1 + H_2, \end{aligned} \quad (5)$$

причем операторы H_1 и H_2 рассматривают как малые возмущения оператора H_0 . С учетом (2)–(4) и уравнения Шредингера для одночастичной функции оператор H_0 запишем как

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma} \int_V \Psi^+ \Delta \Psi dV = \sum_{\vec{p},s} E(\vec{p}) a_{\vec{p},s}^+ a_{\vec{p},s} \quad (6)$$

так как $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_{\vec{p},s} = \frac{p^2}{2m} \Psi_{\vec{p},s}$ и $\frac{p^2}{2m} = E(\vec{p})$ — кинетическая энергия электрона.

Для оператора H_1 получим выражение

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{i\hbar e}{m} \sum_{\sigma} \int_V \Psi^+ (\vec{A}(\vec{r}), \nabla) \Psi dV = \frac{i\hbar e}{m} \sum_{\sigma} \int_V \sum_{\vec{p}',s'} \sum_{\vec{p},s} a_{\vec{p}',s'}^+ a_{\vec{p},s} \Psi_{\vec{p}',s'}^* (\vec{A}(\vec{r}), \nabla \Psi_{\vec{p},s}) dV = \\ &= -\frac{e}{m} \frac{1}{V} \sum_{\vec{q},\vec{p},s} (\vec{p}, \vec{A}(\vec{q})) a_{\vec{p}+\vec{q},s}^+ a_{\vec{p},s}, \end{aligned} \quad (7)$$

в которое входит функция фурье-образа векторного потенциала, определяемая по формуле

$$\vec{A}(\vec{q}) = \int_V \vec{A}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{q},\vec{r})} dV. \quad (8)$$

Интегрирование можно проводить по всему трехмерному пространству, так как потенциал $\vec{A}(\vec{r})$ согласно предположению имеет локальный характер и быстро убывает на бесконечности. Вектор \vec{q} находят из соотношения $\vec{q} = \vec{p}' - \vec{p}$. Разложение Фурье для векторного потенциала используем в виде

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \vec{A}(\vec{q}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{q},\vec{r})}, \quad (9)$$

где суммирование ведется по всем возможным дискретным значениям импульса \vec{q} . Последнее легко проверить использованием следующего представления импульсного символа Кронекера:

$$\delta_{\vec{q},\vec{q}'} = \frac{1}{V} \int_V dV e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{q}-\vec{q}',\vec{r})}. \quad (10)$$

Отметим также, что из условия калибровки $\text{div} \vec{A} = 0$ следует

$$(\vec{q}, \vec{A}(\vec{q})) = 0. \quad (11)$$

Равенство (11) обеспечивает выполнение эрмитовости оператора H_1 , т. е. условия $H_1^+ = H_1$.

Для оператора H_2 получим выражение

$$\begin{aligned} H_2 &= \frac{e^2}{2m} \sum_{\sigma} \int_V \Psi^+ A^2 \Psi dV = \frac{e^2}{2m} \sum_{\sigma} \int_V \sum_{\vec{p}',s'} \sum_{\vec{p},s} a_{\vec{p}',s'}^+ a_{\vec{p},s} \Psi_{\vec{p}',s'}^* (\vec{A}^*(\vec{r}), \vec{A}(\vec{r})) \Psi_{\vec{p},s} dV = \\ &= \frac{e^2}{2m} \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p},s} \sum_{\vec{q},\vec{q}'} a_{\vec{p}+\vec{q}-\vec{q}',s}^+ a_{\vec{p},s} (\vec{A}^*(\vec{q}'), \vec{A}(\vec{q})). \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь было применено аналогичное разложение векторного потенциала и использовано соотношение $\vec{p} - \vec{p}' = \vec{q}' - \vec{q}$. Отметим, что малость операторов H_1 и H_2 , о которой упоминалось выше, подтверждается наличием в выражениях (7) и (12) множителей $1/V$ и $1/V^2$.

Магнитная энергия невзаимодействующих электронов. Вычислим магнитную энергию системы невзаимодействующих электронов. Пусть в нулевом магнитном поле система находится в состоянии Ψ_0 с энергией E_0 . В квантово-механической теории возмущений поправку к энергии системы первого порядка необходимо вычислять по формуле

$$E_1 = (\Psi_0 | H_1 | \Psi_0), \quad (13)$$

а поправку второго порядка, состоящую из двух частей, — по формуле

$$E_2 = (\Psi_0 | H_2 | \Psi_0) + \left(\Psi_0 | H_1 \frac{P}{E_0 - H_0} H_1 | \Psi_0 \right) = E_2^{(1)} + E_2^{(2)}. \quad (14)$$

Здесь P — обозначение так называемого главного значения соответствующего оператора, т. е. предписание действовать ему с таким условием, чтобы всегда отбрасывать все случаи обращения знаменателя в нуль.

Вычислим поправку первого порядка, для чего подставим (7) в (13):

$$E_1 = -\frac{e}{m} \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}, \vec{p}, s} (\vec{p}, \vec{A}(\vec{q})) (\Psi_0 | a_{\vec{p}+\vec{q}, s}^+ a_{\vec{p}, s} | \Psi_0). \quad (15)$$

Очевидно, появившееся в выражении (15) среднее от произведения двух операторов рождения и уничтожения отлично от нуля только при $\vec{q} = 0$, причем в последнем случае оно равно числу одноэлектронного заполнения $n_{\vec{p}, s}$ с характеристиками \vec{p} , s в состоянии Ψ_0 . Следует отметить, что любые два оператора уничтожения или рождения всегда антикоммутируют друг с другом, а операторы рождения с операторами уничтожения антикоммутируют не всегда. Указанные перестановочные соотношения, по существу, являются удобной математической записью свойства антисимметрии многоэлектронных волновых функций. Как непосредственное следствие перестановочных соотношений Ферми получаем, что так называемый оператор числа электронов $n_{\vec{p}, s} = a_{\vec{p}, s}^+ a_{\vec{p}, s}$ — эрмитовый оператор, поэтому его собственные значения — действительные числа (1 или 0). Изложенное подтверждает хорошо известный факт: в соответствии с принципом Паули каждое одноэлектронное состояние \vec{p} , s не может быть заполнено более чем одним электроном. Введем также оператор полного числа электронов $N_n = \sum_{\vec{p}, s} a_{\vec{p}, s}^+ a_{\vec{p}, s}$ и потребуем, чтобы любое рассматриваемое для системы свободных электронов многоэлектронное состояние было собственным для этого оператора с собственными числами, точно равными полному числу электронов $N = nV$ в системе $N_n \Psi = N \Psi$, где Ψ — волновая функция

квантового состояния рассматриваемой многоэлектронной системы свободных электронов. Тогда выражение (14) преобразуем следующим образом:

$$E_1 = -\frac{e}{m} \frac{1}{V} \sum_{\vec{p},s} (\vec{p}, \vec{A}(0)) n_{\vec{p},s} = -\frac{e}{m} \frac{1}{V} \sum_{\vec{p},s} (\vec{p} n_{\vec{p},s}, \vec{A}(0)) = -\frac{e}{m} \frac{1}{V} \left(\sum_{\vec{p},s} \vec{p} n_{\vec{p},s}, \vec{A}(0) \right).$$

В случае изотропной многочастичной системы свободных электронов ферми-распределение в \vec{p} -пространстве образует изотропную ферми-сферу с числом заполнения отдельных состояний

$$n_{\vec{p},s} = \begin{cases} 1 & |\vec{p}| < p_F; \\ 0 & |\vec{p}| > p_F, \end{cases}$$

где p_F — граничный импульс Ферми (для простоты рассматриваем случай температуры, равной нулю). Учитывая изотропность задачи, получаем очевидное соотношение $\sum_{\vec{p},s} \vec{p} n_{\vec{p},s} = 0$, откуда $E_1 = 0$.

Вычислим поправку второго порядка, которая состоит из двух частей:

$$E_2^{(1)} = (\Psi_0 | H_2 | \Psi_0) = \left(\Psi_0 \left| \frac{e^2}{2m} \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p},s} \sum_{\vec{q},\vec{q}'} a_{\vec{p}+\vec{q}-\vec{q}',s}^+ a_{\vec{p},s} (\vec{A}^*(\vec{q}'), \vec{A}(\vec{q})) \right| \Psi_0 \right).$$

Учтем, что в этом выражении среднее по величине Ψ_0 отлично от нуля только при $\vec{p} + \vec{q} - \vec{q}' = \vec{p}$, т. е. при $\vec{q} = \vec{q}'$, и равно числу заполнения одноэлектронного состояния $n_{\vec{p},s}$:

$$E_2^{(1)} = \frac{e^2}{2mV^2} \sum_{\vec{p},s} \sum_{\vec{q}} n_{\vec{p},s} (\vec{A}^*(\vec{q}), \vec{A}(\vec{q})) = \frac{e^2 n}{2mV} \sum_{\vec{q}} (\vec{A}(\vec{q}), \vec{A}(-\vec{q})). \quad (16)$$

Здесь использованы соотношения $\sum_{\vec{p},s} n_{\vec{p},s} = nV$, а также $\vec{A}^*(\vec{q}) = \vec{A}(-\vec{q})$.

Для поправки $E_2^{(2)}$ получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} E_2^{(2)} &= \frac{e^2}{m^2} \frac{1}{V^2} \left(\Psi_0 \left| \sum_{\vec{q}',\vec{p}',s'} (\vec{p}', \vec{A}(\vec{q}')) a_{\vec{p}'+\vec{q}',s'}^+ a_{\vec{p}',s'} \frac{P}{E_0 - H_0} \sum_{\vec{q},\vec{p},s} (\vec{p}, \vec{A}(\vec{q})) a_{\vec{p}+\vec{q},s}^+ a_{\vec{p},s} \right| \Psi_0 \right) = \\ &= -\frac{e^2}{m^2} \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{q}',\vec{p}',s'} \sum_{\vec{q},\vec{p},s} \frac{(\vec{p}, \vec{A}(\vec{q})) (\vec{p}', \vec{A}(\vec{q}'))}{E(|\vec{p} + \vec{q}|) - E(|\vec{p}|)} \left(\Psi_0 \left| a_{\vec{p}'+\vec{q}',s'}^+ a_{\vec{p}',s'} a_{\vec{p}+\vec{q},s}^+ a_{\vec{p},s} \right| \Psi_0 \right). \end{aligned}$$

Действие оператора $P/(E_0 - H_0)$ на стоящее справа от него многоэлектронное состояние $a_{\vec{p}+\vec{q},s}^+ a_{\vec{p},s} \Psi_0$ сводится к умножению этого состояния на множитель

$$-\frac{1}{E(|\vec{p} + \vec{q}|) - E(|\vec{p}|)}.$$

Следует учитывать условия $|\vec{p} + \vec{q}| > p_F$ и $|\vec{p}'| < p_F$, чтобы получить действительно отличное от нуля состояние, а также условие $\vec{q} \neq 0$, чтобы рассматриваемое состояние не оказалось средним Ψ_0 , что недопустимо в теории возмущений в силу предположения о главном значении P . Появившееся в последней формуле среднее по состоянию Ψ_0 от произведения четырех электронных операторов рождения и уничтожения можно представить в виде

$$\left(\Psi_0 \left| a_{\vec{p}+\vec{q},s}^+ a_{\vec{p}',s} a_{\vec{p}+\vec{q},s}^+ a_{\vec{p},s} \right| \Psi_0 \right) = \left(a_{\vec{p},s}^+ a_{\vec{p}+\vec{q},s} \Psi_0 \left| a_{\vec{p}+\vec{q},s}^+ a_{\vec{p},s} \right| \Psi_0 \right).$$

Таким образом, рассматриваемое среднее отлично от нуля и равно единице только при одновременном выполнении условий $s' = s$, $\vec{p} = \vec{p}' + \vec{q}'$, $\vec{p}' = \vec{p} + \vec{q}$ и условий $|\vec{p}| < p_F$ и $|\vec{p}'| > p_F$. Следовательно, окончательно запишем формулу для искомой поправки теории возмущений

$$E_2^{(2)} = -\frac{e^2}{m^2} \frac{1}{V^2} \sum_{\substack{\vec{p}', \vec{p}, s \\ |\vec{p}| < p_F \\ |\vec{p}'| > p_F}} \frac{(\vec{p}', \vec{A}(\vec{p} - \vec{p}')) (\vec{p}, \vec{A}(\vec{p}' - \vec{p}))}{E(|\vec{p}'|) - E(|\vec{p}|)}. \quad (17)$$

Объемная плотность тока. Зная выражение для магнитной энергии системы невзаимодействующих электронов, легко определить выражение для объемной плотности электрического тока $\vec{j}(\vec{r})$, текущего в системе. Для этого достаточно обратиться к известному в электродинамике соотношению Максвелла [8]

$$-E_2 = \frac{1}{2} \int_V dV (\vec{j}(\vec{r}), \vec{A}(\vec{r})), \quad (18)$$

которое после фурье-преобразования (9) принимает вид

$$-E_2 = \frac{1}{2} \frac{1}{V^2} \int_V dV \sum_{\vec{q}} \vec{j}(\vec{q}') e^{i(\vec{q}', \vec{r})} \sum_{\vec{q}} \vec{A}(\vec{q}) e^{i(\vec{q}, \vec{r})}.$$

Происхождение знака «-» связано с тем, что малое изменение функции Гамильтона (в рамках теории возмущений) равно взятому с обратным знаком изменению функции Лагранжа (в случае системы невзаимодействующих электронов — энергии магнитного поля). Достаточно подробно этот вопрос разобран в работах [9, 10].

Замечание. Множители $1/V$ в разложении Фурье $\vec{j}(\vec{r})$ и $\vec{A}(\vec{r})$ — величины постоянные (объем образца), поэтому в операции интегрирования по объему не задействованы.

Используя представление (10), получаем

$$\begin{aligned} -E_2 &= \frac{1}{2} \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} (\vec{j}(\vec{q}'), \vec{A}(\vec{q})) \frac{1}{V} \int_V dV e^{i(\vec{q}'+\vec{q}, \vec{r})} = \frac{1}{2} \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} (\vec{j}(\vec{q}'), \vec{A}(\vec{q})) \delta_{\vec{q}, -\vec{q}'} = \\ &= \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}} (\vec{j}(-\vec{q}), \vec{A}(\vec{q})). \end{aligned}$$

Объединим полученное соотношение с результатами (16) и (17). Первая поправка позволяет записать выражение

$$\frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}} (\vec{j}(-\vec{q}), \vec{A}(\vec{q})) = -\frac{e^2 n}{2mV} \sum_{\vec{q}} (\vec{A}(\vec{q}), \vec{A}(-\vec{q})),$$

отсюда

$$-\vec{j}(\vec{q}) = \frac{e^2 n}{m} \vec{A}(\vec{q}). \quad (19)$$

Для вычисления второй поправки преобразуем выражение (17) с учетом соотношения $\vec{p}' = \vec{p} + \vec{q}$ к виду

$$\begin{aligned} E_2^{(2)} &= -\frac{e^2}{m^2} \frac{1}{V^2} \sum_{\substack{\vec{q}, \vec{p}, s \\ |\vec{p}| < p_F \\ |\vec{p}'| > p_F}} \frac{(\vec{p} + \vec{q}, \vec{A}(-\vec{q}))(\vec{p}, \vec{A}(\vec{q}))}{E(|\vec{p} + \vec{q}|) - E(|\vec{p}|)} = \\ &= -\frac{e^2}{m^2} \frac{1}{2V^2} \sum_{\substack{\vec{q}, \vec{p}, s \\ |\vec{p}| < p_F \\ |\vec{p}'| > p_F}} \frac{(\vec{p} + \vec{q}, \vec{A}(-\vec{q}))(\vec{p}, \vec{A}(\vec{q}))}{E(|\vec{p} + \vec{q}|) - E(|\vec{p}|)} - \frac{e^2}{m^2} \frac{1}{2V^2} \sum_{\substack{\vec{q}, \vec{p}, s \\ |\vec{p}| < p_F \\ |\vec{p}'| > p_F}} \frac{(\vec{p} - \vec{q}, \vec{A}(\vec{q}))(\vec{p}, \vec{A}(-\vec{q}))}{E(|\vec{p} - \vec{q}|) - E(|\vec{p}|)} = \\ &= -\frac{e^2}{m^2} \frac{1}{2V^2} \sum_{\substack{\vec{q}, \vec{p}, s \\ |\vec{p}| < p_F \\ |\vec{p}'| > p_F}} \left\{ \frac{(\vec{p} + \vec{q}, \vec{A}(-\vec{q}))\vec{p}}{E(|\vec{p} + \vec{q}|) - E(|\vec{p}|)} + \frac{(\vec{p} - \vec{q})(\vec{p}, \vec{A}(-\vec{q}))}{E(|\vec{p} - \vec{q}|) - E(|\vec{p}|)} \right\} \vec{A}(\vec{q}). \end{aligned}$$

Во втором слагаемом суммы выполним замену $\vec{p} \Rightarrow -\vec{p}$ и с учетом (11), (18) после несложных преобразований и объединения с (19) получаем формулу

$$-\vec{j}(\vec{q}) = \frac{e^2 n}{m} \vec{A}(\vec{q}) - \frac{e^2}{m^2} \frac{1}{V} \sum_{\substack{|\vec{p}| < p_F \\ |\vec{p} + \vec{q}| > p_F}} \frac{(2\vec{p} + \vec{q})(\vec{p}, \vec{A}(\vec{q}))}{E(|\vec{p} + \vec{q}|) - E(|\vec{p}|)},$$

которая хорошо известна в литературе по теории сверхпроводимости [11].

В приведенную формулу подставим выражение

$$E(|\vec{p} + \vec{q}|) - E(|\vec{p}|) = \frac{1}{2m} [2(\vec{p}, \vec{q}) + q^2] = \frac{1}{2m} [(2\vec{p} + \vec{q}), \vec{q}]$$

и перейдем от суммы к интегралу согласно общепринятому правилу

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} \Rightarrow \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p}. \text{ Получаем}$$

$$-\vec{j}(\vec{q}) = \frac{e^2 n}{m} \vec{A}(\vec{q}) - \frac{e^2}{4m\pi^3 \hbar^3} \int_{\substack{|\vec{p}| < p_F \\ |\vec{p} + \vec{q}| > p_F}} d\vec{p} \frac{(2\vec{p} + \vec{q})(\vec{p}, \vec{A}(\vec{q}))}{((2\vec{p} + \vec{q}), \vec{q})}.$$

Заменим переменную интегрирования \vec{p} переменной $\vec{p} - \vec{q}/2$, тогда интеграл примет простой симметричный вид

$$-\vec{j}(\vec{q}) = \frac{e^2 n}{m} \vec{A}(\vec{q}) - \frac{e^2}{2m\pi^3 \hbar^3} \int_{\substack{|\vec{p} - \frac{\vec{q}}{2}| < p_F \\ |\vec{p} + \frac{\vec{q}}{2}| > p_F}} d\vec{p} \frac{\vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{q})}{(\vec{p}, \vec{q})}. \quad (20)$$

Соотношение (20) для удобства анализа представим как $-j_\alpha(\vec{q}) = K_{\alpha\beta} A_\beta(\vec{q})$, где

$$K_{\alpha\beta} = \frac{e^2 n}{m} \delta_{\alpha\beta} - \frac{e^2}{2m\pi^3 \hbar^3} \int_{\substack{|\vec{p} - \frac{\vec{q}}{2}| < p_F \\ |\vec{p} + \frac{\vec{q}}{2}| > p_F}} d\vec{p} \frac{p_\alpha p_\beta}{(\vec{p}, \vec{q})}.$$

Интегрирование проводим в сферических координатах, учитывая, что задача имеет явно выраженный осесимметричный характер. Согласно приведенной на рисунке схеме, полярный угол θ изменяется в диапазоне значений $0 \dots \pi/2$, азимутальный угол φ — в диапазоне $0 \dots 2\pi$, причем полярный угол — угол между векторами \vec{p} и \vec{q} , поэтому $(\vec{p}, \vec{q}) = pq \cos \theta$.

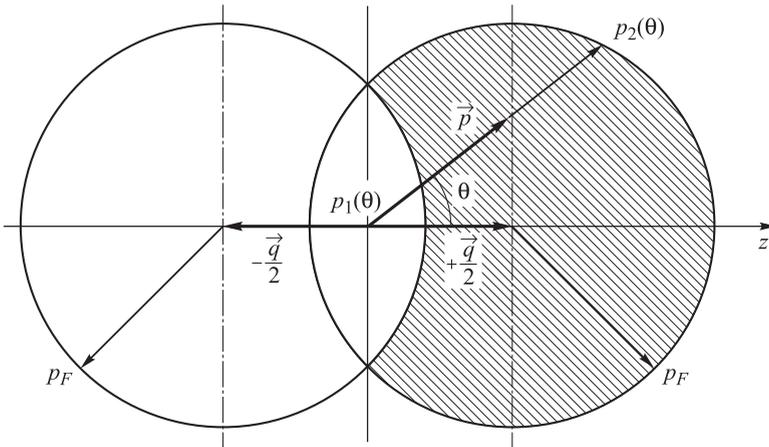


Схема области интегрирования в импульсном пространстве

Модуль вектора \vec{p} изменяется в пределах $p_1(\theta) \dots p_2(\theta)$, которые находят как

$$\begin{aligned} \left| \vec{p}_1 + \frac{\vec{q}}{2} \right| = p_F; \quad p_F^2 = p_1^2 + \frac{q^2}{4} + p_1 q \cos \theta; \quad p_1 = -\frac{1}{2} q \cos \theta + \sqrt{p_F^2 - \frac{q^2}{4} + \frac{q^2}{4} \cos^2 \theta}; \\ \left| \vec{p}_2 - \frac{\vec{q}}{2} \right| = p_F; \quad p_F^2 = p_2^2 + \frac{q^2}{4} - p_2 q \cos \theta; \quad p_2 = \frac{1}{2} q \cos \theta + \sqrt{p_F^2 - \frac{q^2}{4} + \frac{q^2}{4} \cos^2 \theta}. \end{aligned}$$

При решении квадратных уравнений знаки корней были выбраны надлежащим способом. Нетрудно показать, что среди компонент тензора $K_{\alpha\beta}$ отличными от нуля являются лишь компоненты K_{xx}, K_{yy}, K_{zz} , причем в силу симметрии $K_{xx} = K_{yy}$. Рассмотрим случай компоненты K_{xx} . С учетом стандартных формул сферических координат $p_x = p \sin \theta \cos \varphi$ и $d\vec{p} = p^2 \sin \theta d\theta d\varphi dp$ имеем

$$\begin{aligned} K_{xx} &= \frac{e^2 n}{m} - \frac{e^2}{2m\pi^3 \hbar^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_{p_1(\theta)}^{p_2(\theta)} \frac{p \sin \theta \cos \varphi p \sin \theta \cos \varphi}{pq \cos \theta} p^2 \sin \theta d\theta d\varphi dp = \\ &= \frac{e^2 n}{m} - \frac{e^2}{2m\pi^3 \hbar^3 q} \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^3 \theta}{\cos \theta} d\theta \int_{p_1(\theta)}^{p_2(\theta)} p^3 dp = \\ &= \frac{e^2 n}{m} - \frac{e^2 \pi}{8m\pi^3 \hbar^3 q} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^3 \theta}{\cos \theta} [p_2^4(\theta) - p_1^4(\theta)] d\theta = \\ &= \frac{e^2 n}{m} - \frac{e^2}{8m\pi^2 \hbar^3 q} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^3 \theta}{\cos \theta} \left(2p_F^2 - \frac{q^2}{2} + q^2 \cos^2 \theta \right) 2q \cos \theta \sqrt{p_F^2 - \frac{q^2}{4} + \frac{q^2}{4} \cos^2 \theta} d\theta = \\ &= \frac{e^2 n}{m} - \frac{e^2}{4m\pi^2 \hbar^3} 2p_F^3 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^3 \theta \left(1 - \frac{q^2}{4p_F^2} + \frac{q^2}{2p_F^2} \cos^2 \theta \right) \sqrt{1 - \frac{q^2}{4p_F^2} + \frac{q^2}{4p_F^2} \cos^2 \theta} d\theta. \end{aligned}$$

При малых значениях \bar{q} ($\bar{q} \ll p_F$) проведем разложение подкоренного выражения, затем ограничимся рассмотрением двух первых членов:

$$\begin{aligned} K_{xx} &= \frac{e^2 n}{m} - \frac{e^2 p_F^3}{2m\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^3 \theta \left(1 - \frac{q^2}{4p_F^2} + \frac{q^2}{2p_F^2} \cos^2 \theta \right) \left(1 + \frac{1}{2} \left(-\frac{q^2}{4p_F^2} + \frac{q^2}{4p_F^2} \cos^2 \theta \right) \right) d\theta = \\ &= \frac{e^2 n}{m} - \frac{e^2 p_F^3}{2m\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^3 \theta \left(1 - \frac{3q^2}{8p_F^2} + \frac{5q^2}{8p_F^2} \cos^2 \theta \right) d\theta = \\ &= \frac{e^2 n}{m} - \frac{e^2 p_F^3}{2m\pi^2 \hbar^3} \left[\left(1 - \frac{3q^2}{8p_F^2} \right) \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^3 \theta d\theta + \frac{5q^2}{8p_F^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^3 \theta \cos^2 \theta d\theta \right] = \\ &= \frac{e^2 n}{m} - \frac{e^2 p_F^3}{2m\pi^2 \hbar^3} \left[\left(1 - \frac{3q^2}{8p_F^2} \right) \frac{2}{3} + \frac{5q^2}{8p_F^2} \frac{2}{15} \right] = \frac{e^2 n}{m} - \frac{e^2 p_F^3}{2m\pi^2 \hbar^3} + \frac{2}{3} \frac{e^2 p_F^3}{2m\pi^2 \hbar^3} \frac{q^2}{p_F^2}. \end{aligned}$$

После подстановки значения ферми-импульса $p_F = \hbar(3\pi^2 n)^{1/3}$ во второе слагаемое первые два слагаемых взаимно уничтожаются и получаем следующее соотношение:

$$j_x(\vec{q}) = -\frac{e^2 p_F q^2}{12m\pi^2 \hbar^3} A_x(\vec{q}). \quad (21)$$

Точно такое же соотношение имеет место и для компоненты y .

Аналогичные вычисления для компоненты K_{zz} сводятся к тому, что разложение по параметру малости q/p_F приводит к выражению, в котором слагаемые начинаются со слагаемого $(q/p_F)^4$. Поэтому в рамках принятой точности полагаем $K_{zz} = 0$.

Расчет диамагнитной восприимчивости. Перейдем к вычислению диамагнитной восприимчивости χ_m системы невзаимодействующих свободных электронов в нормальном металле. Учтем, что под величиной \vec{j} здесь будем понимать величину, которую обычно называют $\vec{j}_{\text{мол}}$ и связывают с вектором намагничивания стандартным соотношением $\vec{j} = \text{rot } \vec{M}$. Кроме того, $\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$ и $\vec{M} = \chi_m \vec{H}$. В результате фурье-преобразования функций координат к функциям импульсов получаем формулу, к которой применяем операцию rot :

$$\begin{aligned} \vec{A}(\vec{r}) &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \vec{A}(\vec{q}) e^{i(\vec{q}, \vec{r})}; \\ (\text{rot } \vec{A}(\vec{r}))_i &= \frac{1}{V} \varepsilon_{ijk} \sum_{\vec{q}} \frac{\partial}{\partial x_j} A_k(\vec{q}) e^{i q_\alpha x_\alpha} = \frac{1}{V} \varepsilon_{ijk} \sum_{\vec{q}} A_k(\vec{q}) e^{i(\vec{q}, \vec{r})} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x_j} q_\alpha x_\alpha = \\ &= \frac{1}{V} \frac{i}{\hbar} \sum_{\vec{q}} \varepsilon_{ijk} A_k(\vec{q}) e^{i(\vec{q}, \vec{r})} q_\alpha \delta_{j\alpha} = \frac{1}{V} \frac{i}{\hbar} \sum_{\vec{q}} \varepsilon_{ijk} A_k(\vec{q}) e^{i(\vec{q}, \vec{r})} q_j = \\ &= \frac{1}{V} \frac{i}{\hbar} \sum_{\vec{q}} [\vec{q}, \vec{A}(\vec{q})]_i e^{i(\vec{q}, \vec{r})}; \\ \vec{B} = \text{rot } \vec{A} &= \frac{1}{V} \frac{i}{\hbar} \sum_{\vec{q}} [\vec{q}, \vec{A}(\vec{q})] e^{i(\vec{q}, \vec{r})} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \vec{B}(\vec{q}) e^{i(\vec{q}, \vec{r})}. \end{aligned}$$

Далее $\vec{B}(\vec{q}) = \frac{i}{\hbar} [\vec{q}, \vec{A}(\vec{q})]$. Следовательно, применив операцию rot к вектору намагниченности, получим

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{q}) &= \frac{i}{\hbar} [\vec{q}, \vec{M}(\vec{q})] = \frac{i}{\hbar} [\vec{q}, \chi_m \vec{H}(\vec{q})] = \frac{i}{\hbar \mu_0} [\vec{q}, \chi_m \vec{B}(\vec{q})] = \\ &= \frac{i}{\hbar \mu_0} \left[\vec{q}, \chi_m \frac{i}{\hbar} [\vec{q}, \vec{A}(\vec{q})] \right] = -\frac{\chi_m}{\hbar^2 \mu_0} [\vec{q} [\vec{q}, \vec{A}(\vec{q})]] = \\ &= -\frac{\chi_m}{\hbar^2 \mu_0} \vec{q}(\vec{q}, \vec{A}(\vec{q})) + \frac{\chi_m}{\hbar^2 \mu_0} \vec{A}(\vec{q}) q^2. \end{aligned}$$

Согласно принятому условию калибровки (11), окончательно запишем

$$\vec{j}(\vec{q}) = \frac{\chi_m}{\hbar^2 \mu_0} q^2 \vec{A}(\vec{q}).$$

Напомним, что использована декартова система координат, ось z которой была направлена вдоль вектора \vec{q} . В этой системе $\vec{q}(0, 0, q)$ и $A_z(\vec{q}) = 0$, так как $(\vec{q}, \vec{A}(\vec{q})) = 0$. В таком случае

$$\begin{aligned} j_z(\vec{q}) &= 0; \\ j_x(\vec{q}) &= \frac{\chi_m}{\hbar^2 \mu_0} q^2 A_x(\vec{q}); \\ j_y(\vec{q}) &= \frac{\chi_m}{\hbar^2 \mu_0} q^2 A_y(\vec{q}). \end{aligned} \quad (22)$$

Сравним выражения (21), (22) и определим диамагнитную восприимчивость

$$\chi_m = -\frac{e^2 p_F}{12m\pi^2 \hbar^3} \mu_0.$$

Этот результат совпадает с классическим результатом

$$\chi_m = -\frac{e^2 p_F}{12m\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{c^2}$$

с точностью до множителей, которые очевидным образом связаны с выбором системы единиц [12].

Заключение. Последнее замечание, на взгляд авторов этой работы, кажется существенным. Дело в следующем: в большинстве учебных пособий по курсу общей физики материал изложен в рекомендованной системе СИ, тогда как в монографиях по теоретической физике, особенно в работах, связанных с магнито- и электродинамикой, используют абсолютную систему, что вполне корректно. Поэтому при попытках изложения материала в СИ возникают проблемы с размерностными коэффициентами. Авторы столкнулись с этим при изложении теории магнитостатики в формализме магнитных зарядов [5], а также в теории поверхностных токов [8]. В связи с этим кажется уместным, наряду с традиционным изложением материала теоретической физики, получать там, где это возможно, результаты в СИ.

Отметим, что в отличие от принятой в работе [13] гипотезы о том, что эффективная масса носителя и масса электрона различаются, в рассматриваемой задаче это допущение оказалось лишним.

Интересно также, что при выводе соотношения для компоненты K_{xx} нулевые члены разложения, т. е. слагаемые, не зависящие от вектора \vec{q} , взаимно уничтожились. В работах по теории сверхпроводников [11] показано, что это связано с тем, что система невзаимодействующих электронов нормального металла не обладает эффектом Мейсснера [14].

Авторы благодарят С.О. Юрченко, который при анализе работы [15] указал на важное обстоятельство о корректности выбора знака в формуле (18), а также профессора В.В. Толмачева, при обсуждении с которым статьи [13] и родилась идея настоящего исследования, профессоров А.М. Макарова и А.Н. Морозова за постоянный интерес к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Батыев Э.Г. Парамагнетизм Паули и диамагнетизм Ландау // УФН. 2009. Т. 179. № 12. С. 1333–1334. DOI: 10.3367/UFNr.0179.200912i.1333
2. Einsenstein J.P., MacDonald A.H. Bose — Einstein condensation of excitons in bilayer electron systems // Nature. 2004. Vol. 432. P. 691–694.
3. Landau L.D. Diamagnetismus der Metalle // Z. Phys. 1930. Bd. 64. S. 629.
4. Vandyopadhyay M., Dattagupta S. Landay — Drude diamagnetism: fluctuation, dissipation and decoherence // Journal of Physics: Condensed Matter. 2006. Vol. 18. No. 44. P. 10029–10043.
5. Алиев И.Н., Копылов И.С. Использование формализма монополей Дирака в некоторых задачах магнетизма // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2015. № 6. С. 25–39. DOI: 10.18698/1812-3368-2015-6-25-39
6. Алиев И.Н., Меликянц Д.Г. О потенциалах в электродинамике Лондонов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2016. № 2. С. 42–50. DOI: 10.18698/1812-3368-2016-2-42-50
7. Алиев И.Н., Толмачев В.В. Оптико-механическая аналогия и уравнение Шредингера. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана. 1998. 79 с.
8. Алиев И.Н., Копылов И.С. Применение метода множителей Лагранжа к вычислению магнитного поля постоянного тока // Динамика сложных систем. 2015. № 4. С. 3–10.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Физматлит, 2004. 800 с.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: Физматлит, 2012. 224 с.
11. Llano M., Tolmachev V.V. Multiple phases in a new statistical boson-fermion model of superconductivity // Physica A. 2003. Vol. 317. P. 546–564.
12. Ландау Л.Д. Собрание трудов. В 2 т. Т. 1 / под ред. Е.М. Лифшица. М.: Наука, 1969. 520 с.
13. Батыев Э.Г. Свойства экситонного диэлектрика в сверхпроводящем состоянии // ЖЭТФ. 2012. Т. 141. Вып. 1. С. 151–159.
14. Meissner W., Ochsenfeld R. Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfähigkeit // Naturwissenschaften. 1933. Vol. 21. Iss. 44. P. 787–788.
15. Yurchenko S., Komarov K., Pustovoit V. Multilayer-graphene-based amplifier of surface acoustic waves // AIP advances. 2015. Vol. 5. P. 057144.

Алиев Исмаил Новруз оглы — д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5).

Докукин Михаил Юрьевич — канд. техн. наук, доцент кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5).

Самедова Зарифа Алышан кызы — магистрант кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5).

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Алиев И.Н., Докукин М.Ю., Самедова З.А. Применение двойного квантования в диамагнетизме Ландау // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2016. № 4. С. 14–27. DOI: 10.18698/1812-3368-2016-4-14-27

APPLICATION OF DOUBLE QUANTIZATION IN LANDAU DIAMAGNETISM

I.N. Aliev

M.Yu. Dokukin

Z.A. Samedova

alievprof@yandex.ru

DMU252@yandex.ru

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

Abstract

For the calculation of the diamagnetic permeability is considered a set of noninteracting electrons in a finite, sufficiently large amount of magnetic. The Hamiltonian of the considered structure with one-electron functions, involving the operators of birth and destruction is reduced to conjunction operators, the first of which is simply the kinetic energy of the electrons, and the other two are considered as small perturbations. Using the procedure of perturbation theory is calculated the energy of the magnetic field in the first and second order. It is shown that the amendment of the first order equal to zero and the second order is computed by using the introduction of the Fermi momentum in the case of temperatures close to zero. The result for the energy is represented in the form of a number from quadratic in the vector potential terms. Further tying together the result is a representation of energy using the current density of electrons able to find the connection between the components of the current density and the corresponding components of the vector potential. A similar relationship obtained by using Fourier transform of Maxwell's equations. When comparing the obtained ratios obtained an expression for diamagnetic permeability, which is accurate to dimensional multipliers, associated with the choice of system of units, coincides with the classical result obtained by a different method

Keywords

Vector potential, Hamilton operator, Hermitian conjugate operators, Kronecker symbols, Schrödinger equation, perturbation theory, operators of birth and destruction, Fermi momentum, diamagnetic susceptibility

REFERENCES

- [1] Batyev E.G. Pauli paramagnetism and Landau diamagnetism. *Phys. Usp.*, 2009, vol. 52, pp. 1245–1246. DOI: 10.3367/UFNe.0179.200912i.1333
- [2] Einsenstein J.P., MacDonald A.H. Bose — Einstein condensation of excitons in bilayer electron systems. *Nature*, 2004, vol. 432, pp. 691–694.
- [3] Landau L.D. Diamagnetismus der Metalle. *Z. Phys.* 1930, bd. 64, s. 629.
- [4] Bandyopadhyay M., Dattagupta S. Landay — Drude diamagnetism: fluctuation, dissipation and decoherence. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2006, vol. 18, no. 44, pp. 10029–10043.
- [5] Aliev I.N., Kopylov I.S. Use of Dirac monopoles formalism in some magnetism problems. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2015, no. 6, pp. 25–39 (in Russ.). DOI: 10.18698/1812-3368-2015-6-25-39
- [6] Aliev I.N., Melikyants D.G. On potentials in Londons' electrodynamics. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2016, no. 2, pp. 42–50 (in Russ.). DOI: 10.18698/1812-3368-2016-2-42-50

- [7] Aliev I.N., Tolmachev V.V. *Optiko-mekhanicheskaya analogiya i uravnenie Shredingera* [Optical-mechanical analogy and the Schrödinger equation]. Moscow, MGTU im. N.E. Bauman Publ., 1998. 80 p.
- [8] Aliev I.N., Kopylov I.S. Applying the Lagrange multipliers method to the calculation of DC magnetic field. *Dinamika slozhnykh sistem* [Dynamics of Complex Systems], 2015, no. 4, pp. 3–10 (in Russ.).
- [9] Landau L.D., Lifshitz E.M. *Quantum mechanics (Vol. 3. Course of theoretical physics)*. Pergamon Press, 1965.
- [10] Landau L.D., Lifshitz E.M. *Mechanics (Vol. 1. Course of theoretical physics)*. Pergamon Press, 1969.
- [11] Llano M., Tolmachev V.V. Multiple phases in a new statistical boson-fermion model of superconductivity. *Physica A*. 2003, vol. 317, pp. 546–564.
- [12] Landau L.D. *Sobranie trudov. V 2 t. T. 2* [Collected papers in 2 vol. Vol. 1.]. Ed. by E.M. Lifshitz. Moscow, Nauka Publ., 1969. 510 p.
- [13] Batyev E.G. Properties of an excitonic insulator in the superconducting state. *JETP*, 2012, vol. 114, iss. 1, pp. 132–140.
- [14] Meissner W., Ochsenfeld R. Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfähigkeit. *Naturwissenschaften*, 1933, vol. 21, iss. 44, pp. 787–788.
- [15] Yurchenko S., Komarov K., Pustovoi V. Multilayer-graphene-based amplifier of surface acoustic waves. *AIP advances*, 2015, vol. 5, p. 057144.

Aliev I.N. — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor of Physics Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation).

Dokukin M.Yu. — Cand. Sci. (Eng.) Assoc. Professor of Physics Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation).

Samedova Z.A. — Master of Physics Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation).

Please cite this article in English as:

Aliev I.N., Dokukin M.Yu., Samedova Z.A. Application of Double Quantization in Landau Diamagnetism. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Bauman, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2016, no. 4, pp. 14–27.

DOI: 10.18698/1812-3368-2016-4-14-27