

# ПСЕВДОЩЕЛЕВОЙ РЕЖИМ КАК ДОЛГОЖИВУЩИЕ СОСТОЯНИЯ НЕКОГОРЕНТНЫХ ПАР С БОЛЬШИМИ ИМПУЛЬСАМИ

*В. И. Белявский\**, *Ю. В. Копеев\*\**, *Ю. Н. Тогошова*, *С. В. Шевцов*

*Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук  
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 19 января 2004 г.

Зеркальный нестинг контура Ферми квазидвумерной электронной системы и наличие хотя бы одного отрицательного собственного значения фурье-образа энергии взаимодействия являются достаточными условиями, при которых оказывается возможным возникновение связанных состояний относительного движения пар с большими суммарными импульсами. В отличие от спаривания при взаимодействии притяжения, волновые функции таких пар не являются знакопостоянными, имея дважды пересекающие контур Ферми линии нулей в областях определения импульсов относительного движения. Полное число точек пересечения линии нулей с контуром Ферми определяется симметрией линейной комбинации волновых функций кристаллографически эквивалентных пар. Долгоживущие квазистационарные состояния существуют в виде некогерентных пар с различными, но близкими импульсами и приводят к существенному подавлению плотности одночастичных состояний (появлению псевдощели) в достаточно широком диапазоне энергии. Верхняя температурная граница псевдощели определяется распадом пар, а нижняя — нарушением фазовой когерентности при выходе пар из конденсата, который, благодаря зеркальному нестингу, возникает при некотором оптимальном импульсе пары.

PACS: 78.47.+p, 78.66.-w

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Притяжение частиц, возбужденных вне (или дырок внутри) поверхности Ферми (FS), приводит к истинному связанному состоянию пары с нулевым суммарным импульсом [1] (куперовской пары) и понижению энергии системы, свидетельствуя о неустойчивости основного состояния [2], рассматриваемого при нулевой температуре как полностью заполненная область импульсного пространства внутри FS. Энергия связанного состояния куперовской пары экспоненциально зависит от безразмерного параметра — произведения эффективной константы связи и плотности состояний на FS, — при этом предэкспоненциальный множитель определяется энергетической шириной прилегающего к FS слоя, в котором определено преобладающее над кулоновским отталкиванием притяжение. Выделение слоя преоблада-

ющего притяжения означает динамическое ограничение области импульсного пространства, которая вносит вклад в состояния относительного движения пары. Для пар с нулевым суммарным импульсом какие-либо кинематические ограничения отсутствуют: импульсы частиц совпадают с импульсами относительного движения и могут быть любыми. Поверхность Ферми является естественной границей, разделяющей области импульсного пространства, в которых могут возбуждаться пары частиц (внешняя по отношению к FS часть зоны Бриллюэна) и пары дырок (внутренняя часть FS). На этой границе энергия возбуждения пары обращается в нуль. Отметим, что помимо стационарного состояния с отрицательной энергией (дискретный уровень, отщепившийся от полосы сплошного спектра) задача Купера о двух притягивающихся частицах формально допускает решения, принадлежащие полосе сплошного спектра. Однако вес каждого такого состояния относительного движения куперовской пары мал (обратно пропорционален числу частиц) по сравнению с

\*E-mail: vib@spu.ac.ru

\*\*E-mail: kopaev@lebedev.sci.ru

весом стационарного состояния (который по порядку величины равен единице), поэтому перераспределением уровней в полосе сплошного спектра можно пренебречь.

Для пар с отличным от нуля суммарным импульсом области импульсного пространства, доступные для спаривания как электронов, так и дырок, существенно сокращаются [3–5]. Подобное кинематическое ограничение приводит к уменьшению статистического веса пары (числа квантовых состояний, дающих вклад в волновую функцию относительного движения пары) и соответствующему понижению энергии связи. При этом геометрическим местом точек, соответствующим нулевой энергии возбуждения пары, является не поверхность в трехмерном импульсном пространстве (как в случае пар с нулевым импульсом), а множество меньшей размерности. Это обстоятельство приводит к тому, что спаривание оказывается возможным уже не при сколь угодно малой величине константы связи, поэтому канал сверхпроводящего спаривания с нулевым импульсом выделяется как доминирующий [6].

Купратные сверхпроводящие соединения, обладающие слоистой кристаллической структурой и являющиеся квазидвумерными ( $2D$ ) электронными системами, обнаруживают ряд свойств как в сверхпроводящем, так и в нормальном состоянии, которые не вписываются [7] в рамки теории сверхпроводимости Бардина, Купера и Шриффера (BCS). Наиболее ярко различие между обычными и высокотемпературными купратными сверхпроводниками проявляется в том, что в последних при относительно малом дырочном допировании в достаточно широком интервале температур выше температуры сверхпроводящего перехода наблюдается псевдощелевой режим поведения [8], соответствующий существенному подавлению плотности одночастичных состояний. Такое поведение довольно естественным образом можно объяснить, предположив, что пары носителей, с конденсацией которых связана сверхпроводимость, разрываются не при температуре конденсации, при которой теряется фазовая когерентность пар, а при гораздо более высокой температуре, соответствующей открытию псевдощели. В обычных сверхпроводниках область флуктуаций вблизи температуры сверхпроводящего перехода оказывается чрезвычайно узкой, следствием чего является малость времени жизни пар вне конденсата. Таким образом, в схеме BCS, соответствующей притяжению между носителями, образующими пары, переход в некогерентное состояние практически сразу сопровождается разрывом пар. Это обстоятельство является одним из основа-

ний для утверждения о том, что схема BCS, основанная на приближении среднего поля, неадекватна проблеме высокотемпературной сверхпроводимости купратов.

Сверхпроводящее состояние в купратах возникает, как и в модели BCS, благодаря синглетному спариванию носителей в медно-кислородных плоскостях. Особенностью электронного  $2D$ -спектра купратных соединений по сравнению с изотропной моделью BCS является то, что линия, разделяющая заполненные и вакантные состояния в  $2D$ -импульсном пространстве, — контур Ферми (FC) — при уровнях допирования, близких к половинному, располагается, в существенной своей части, в окрестности седловой точки электронного закона дисперсии [9]. Характерная форма FC в купратах с дырочным допированием свидетельствует о сильной анизотропии фермиевской скорости и эффективных масс электронов и дырок, усиливающей логарифмическую сингулярность Ван Хофа  $2D$ -плотности состояний. Поэтому в обширной окрестности седловой точки главные значения тензора обратных эффективных масс, определяющих кинетическую энергию относительного движения пары, имеют разные знаки.

Особенности закона дисперсии в окрестности седловой точки проявляются при спаривании частиц с большим (порядка удвоенного фермиевского) суммарным импульсом пары [5]. Энергия такой пары складывается из энергии центра масс и энергии относительного движения. Связанное состояние, если оно вообще возникает, соответствует понижению энергии относительного движения. Кинематические ограничения при спаривании с отличным от нуля импульсом пары в  $2D$ -системе приводят к тому, что границей, разделяющей области заполненных и вакантных состояний относительного движения пары, являются, вообще говоря, две точки. Поэтому связанное состояние пары может возникать лишь при условии, что эффективная константа связи превышает некоторое пороговое значение, поскольку плотность состояний относительного движения обращается в нуль при нулевой энергии возбуждения пары.

Если для некоторых выделенных направлений и значений суммарного импульса пары электронный закон дисперсии допускает возможность возникновения границы между заполненными и вакантными состояниями в виде отрезков линий, являющихся частями FC, то эти отрезки представляют собой парный контур Ферми (PFC), играющий такую же роль для относительного движения пары, что и FC для движения частиц [10, 11]. Возникновение PFC оказывается возможным при выполнении условия зер-

кального нестинга, т.е. при совпадении отдельных участков ФС с изолинией кинетической энергии относительного движения частиц, составляющих пару [12]. Точное выполнение этого условия может иметь место в тех случаях, когда импульс пары ориентирован вдоль одного из симметричных направлений в  $2D$ -зоне Бриллюэна, а ФС имеет особую форму, которая и определяет величину импульса пары. Совершенный зеркальный нестинг является необходимым условием возникновения связанного состояния относительного движения пары с ненулевым суммарным импульсом при любой (сколь угодно малой) величине эффективной константы связи [13]. Связанные состояния сохраняются (с меньшей энергией связи) и при приближенном зеркальном нестинге, исчезая при некоторой характерной величине отклонения от идеального нестинга [12].

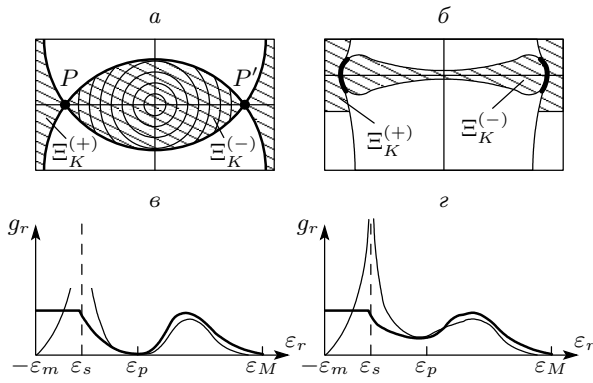
Природа спаривающего взаимодействия в купратах пока не может считаться установленной однозначно. В частности, наряду с обычным электрон-фононным спаривающим притяжением [14, 15] рассматриваются и механизмы спаривания, обусловленные отталкивательным взаимодействием [16]. Поэтому решение задачи о двух отталкивающихся частицах, составляющих пару с большим суммарным импульсом, может оказаться полезным для установления природы сверхпроводящего состояния купратов. Простейшее приближение, соответствующее точечному (как и в схеме BCS) отталкивательному взаимодействию, показывает [11], что в полосе сплошного спектра относительного движения пары с большим суммарным импульсом возникают два решения задачи Купера, характеризующиеся комплексными энергиями, мнимые части которых имеют разные знаки. Одно из этих решений, с меньшей вещественной частью энергии, имеет отрицательное затухание, возможным следствием чего может явиться тенденция к неустойчивости системы по отношению к отталкивательному взаимодействию. Второе решение, имеющее правильный знак затухания, соответствует перераспределению уровней в полосе сплошного спектра и, в частности, может приводить к возникновению квазистационарного состояния с достаточно большим временем жизни [11].

Широко распространенная точка зрения [17] предполагает, что физика купратов определяется весьма сильным отталкивательным взаимодействием электронов (или дырок), локализованных на атомах меди в проводящих медно-кислородных плоскостях. Считается, что для описания сильных отталкивательных электрон-электронных корреляций

хорошо приспособлена модель Хаббарда, учитывающая только корреляции на одном и том же узле, а также более сложные родственные модели, принимающие во внимание и достаточно хорошо экранированные межузельные взаимодействия, например, парные корреляции на соседних узлах (модель Пенсона–Колба–Хаббарда [18]). Предсказательная сила таких моделей тем выше, чем больше, по сравнению с шириной  $t$  энергетической зоны, хаббардовская энергия внутриузловой корреляции,  $U_0 \gg t$ . Реальным купратным соединениям, по-видимому, соответствуют приблизительно одинаковые значения этих величин, поэтому качественно физика купратов может изучаться и с помощью зонных моделей, наилучшим образом проявляющих себя в противоположном предельном случае  $t \gg U_0$ . Такой подход с учетом типичной для купратных соединений метрики импульсного пространства в области определения импульса относительного движения пары используется в настоящей работе для решения задачи о связанных состояниях пар одноименно заряженных частиц с большим суммарным импульсом при отталкивательном взаимодействии в квазидвумерной электронной системе.

## 2. КИНЕМАТИКА ПАР

Пусть  $\varepsilon(\mathbf{k})$  — закон дисперсии частиц в  $2D$ -электронной системе. Тогда изолиния  $\varepsilon(\mathbf{k}) = \mu$ , где  $\mu$  — химический потенциал, определяет ФС, и пара одноименно заряженных частиц с суммарным импульсом  $\mathbf{K}$  и энергией центра масс  $\varepsilon_{cm}(\mathbf{K}) = 2\varepsilon(\mathbf{K}/2)$  должна иметь импульсы  $\mathbf{k}_+$  и  $\mathbf{k}_-$  либо внутри ( $\varepsilon(\mathbf{k}_{\pm}) < \mu$ ), либо вне ( $\varepsilon(\mathbf{k}_{\pm}) > \mu$ ) ФС, как схематически показано на рис. 1. Импульсы частиц, составляющих пару, как и импульс относительного движения пары  $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_+ - \mathbf{k}_-)/2$ , принадлежат некоторой области  $\Xi_K$  импульсного пространства, состоящей, вообще говоря, из двух частей: заполненной (при  $T = 0$ ) области  $\Xi_K^{(-)}$  и вакантной области  $\Xi_K^{(+)}$ . Таким образом, импульсы возбужденных над ФС частиц принадлежат  $\Xi_K^{(+)}$ , а импульсы дырок, возбужденных внутри ФС, — области  $\Xi_K^{(-)}$ . Область  $\Xi_K$ , как и составляющие ее части  $\Xi_K^{(-)}$  и  $\Xi_K^{(+)}$ , симметрична по отношению к преобразованию инверсии импульса относительного движения пары:  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ . Отметим, что в купратных соединениях, обнаруживающих высокотемпературную сверхпроводимость, областям  $\Xi_K^{(-)}$  и  $\Xi_K^{(+)}$  отвечает соответственно дырочное и электронное заполнение.



**Рис. 1.** Кинематически разрешенная область импульсного пространства (выделена) для относительного движения пары с суммарным импульсом  $\mathbf{K}$ : *a* — граница, разделяющая заполненную ( $\Xi^{(-)}$ ) и вакантную ( $\Xi^{(+)}$ ) части области  $\Xi_K$ , вырождена в точки  $P$  и  $P'$ ; *b* — граница между  $\Xi^{(-)}$  и  $\Xi^{(+)}$  представляет собой отрезки линий (жирные линии на рис. *b*), образующие PFC. Центру области  $\Xi_K$  соответствует вектор  $\mathbf{K}/2$ . Плотность состояний относительного движения пары  $g_r$  как функция кинетической энергии относительного движения: *v* соответствует случаю, когда PFC вырождается в точки ( $P$  и  $P'$  на рис. *a*); *z* соответствует конечной длине PFC (рис. *b*)

Энергия пары складывается из энергии центра масс и энергии относительного движения:

$$\varepsilon_K^{(r)}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{K}/2 + \mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{K}/2 - \mathbf{k}) - 2\varepsilon(\mathbf{K}/2). \quad (1)$$

Можно определить метрику импульсного  $2D$ -пространства относительного движения пары (метрику импульсного пространства в окрестности точки  $\mathbf{K}/2$ ), представив (1) в виде квадратичной формы, соответствующей первым не исчезающим членам разложения (1) в ряд по степеням компонент импульса относительного движения пары,

$$\varepsilon_K^{(r)}(\mathbf{k}) \approx D_{\alpha\beta}(\mathbf{K})k_\alpha k_\beta. \quad (2)$$

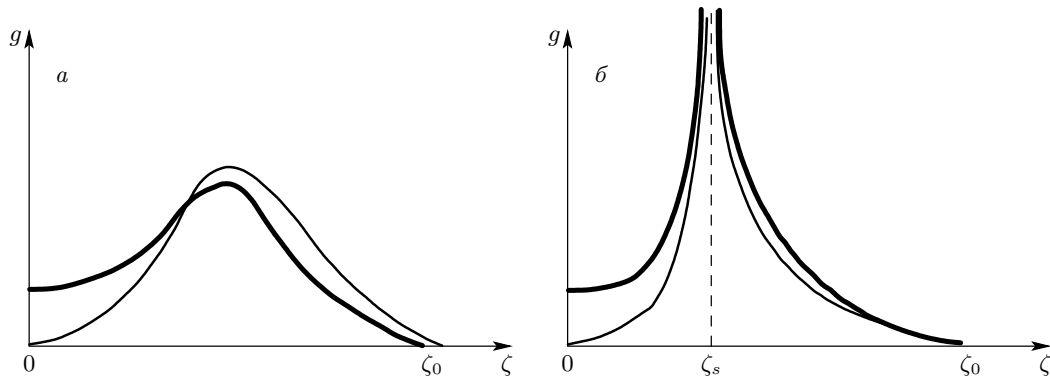
Здесь  $2D$ -тензор  $D_{\alpha\beta}(\mathbf{K})$  определяет обратные приведенные эффективные массы, а по повторяющимся греческим индексам подразумевается суммирование от 1 до 2. В случае одинаковых знаков главных значений этого тензора можно говорить об эллиптической метрике импульсного пространства относительного движения пары, поскольку при энергиях, близких к нулю, изолинии кинетической энергии относительного движения представляют собой эллипсы (рис. 1*a*). При разных знаках главных значений

тензора  $D_{\alpha\beta}(\mathbf{K})$  квадратичная форма (2) определяет гиперболическую метрику, поскольку изолинии в малой окрестности точки  $\mathbf{K}/2$  являются два семейства гипербол. Во всей области  $\Xi_K$ , принадлежащей протяженной окрестности точки  $\mathbf{K}/2$ , структура изолиний оказывается более сложной.

Плотность состояний относительного движения в случае эллиптической метрики импульсного пространства схематически показана жирной линией на рис. 1*в*. Когда границей, разделяющей  $\Xi_K^{(-)}$  и  $\Xi_K^{(+)}$ , являются точки ( $P$  и  $P'$  на рис. 1*a*), то соответствующей этим точкам энергии относительного движения пары,  $\varepsilon_p = 2[\mu - \varepsilon(\mathbf{K}/2)]$ , отвечает плотность состояний, равная нулю. Малость плотности состояний в окрестности энергии  $\varepsilon_p$  соответствует тому, что учитывается вклад только тех частей изолиний, которые принадлежат области  $\Xi_K$  (на рис. 1*a* такие изолинии показаны для области  $\Xi_K^{(-)}$ ). Если бы границей между  $\Xi_K^{(-)}$  и  $\Xi_K^{(+)}$  была линия (PFC, показанный на рис. 1*б* жирной линией), то плотность состояний относительного движения пары,  $g_r$ , при эллиптической метрике области  $\Xi_K$  (изображенная на рис. 1*z* жирной линией) имела бы конечную величину при энергии  $\varepsilon_p$ . На рис. 1 значениям  $-\varepsilon_m$  и  $\varepsilon_M$  энергии относительного движения  $\varepsilon_r$  соответствуют края полосы сплошного спектра; при эллиптической метрике, очевидно,  $\varepsilon_m = 0$ .

В случае, когда области  $\Xi_K$  соответствует гиперболическая метрика, энергия относительного движения пары может принимать как положительные, так и отрицательные значения. Нулевой энергии ( $\varepsilon_s = 0$ ) соответствует логарифмическая сингулярность Ван Хова плотности состояний (тонкая линия на рис. 1*в, z*). При энергии, равной  $\varepsilon_p$ , плотность состояний обращается в нуль (рис. 1*в*), если граница между  $\Xi_K^{(-)}$  и  $\Xi_K^{(+)}$  вырождается в точки. Возникновение PFC приводит к конечной величине плотности состояний в точке  $\varepsilon_p$ , как показано на рис. 1*z*.

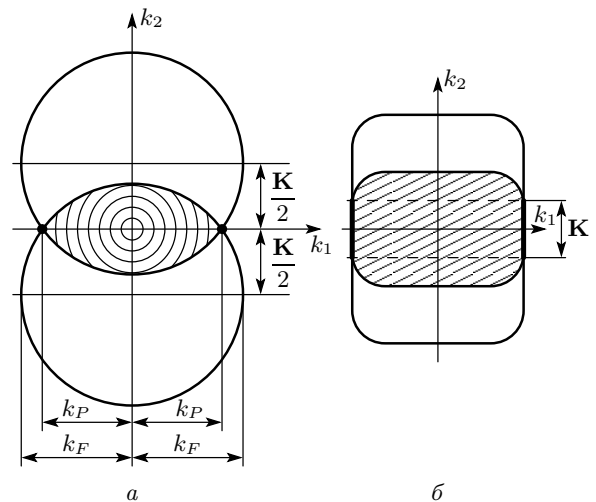
Энергия возбуждения  $\zeta$  пары частиц вне области, ограниченной FC, соответствует кинетической энергии относительного движения пары  $\varepsilon_K^{(r)}(\mathbf{k}) \geq \varepsilon_p$ , так что в этом диапазоне энергий плотность состояний таких возбуждений совпадает с плотностью состояний относительного движения пары  $g_r(\varepsilon_K^{(r)})$ , как показано на рис. 2*a*. При возбуждении пары дырок внутри области, ограниченной FC, энергия возбуждения (положительная по определению) соответствует кинетической энергии относительного движения пары частиц, такой что  $0 \leq \varepsilon_K^{(r)}(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_p$  в случае эллиптической метрики или  $-\varepsilon_m \leq \varepsilon_K^{(r)}(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_p$  при гиперболической метрике. Плотность состояний



**Рис. 2.** Плотность состояний для возбуждений пары частиц (а) и пары дырок (б). Тонкой линией изображена плотность состояний в случае, когда PFC вырождается в точки ( $P$  и  $P'$  на рис. 1а). Возникновение PFC конечной длины приводит к ненулевой плотности состояний при энергии возбуждения  $\zeta = 0$  (жирные линии). Рисунок 2б соответствует гиперболической метрике импульсного пространства в области  $\Xi^{(-)}$ ,  $2D$ -сингулярности Ван Хофа соответствует энергия возбуждения  $\zeta_s$ . В случае эллиптической метрики плотность состояний для возбуждения как пары частиц, так и пары дырок особенности внутри полосы сплошного спектра не имеет, как показано на рис. 2а

таких возбуждений, соответствующая этим интервалам кинетической энергии относительного движения пары, повторяет плотность состояний относительного движения  $g_r$ , показанную на рис. 1, с точностью до изменения начала отсчета энергии и зеркального отражения относительно точки  $\varepsilon_p$ , как показано для случая гиперболической метрики на рис. 2б.

При нулевой энергии возбуждения ( $\zeta = 0$ ) значения плотности состояний возбуждений пары частиц и пары дырок совпадают. В случае гиперболической метрики импульсного пространства поведение плотности состояний при  $\zeta > 0$  существенно различно для пар частиц ( $g(\zeta)$  является регулярной функцией, не имеющей особенностей во всем интервале  $0 \leq \zeta \leq \zeta_0$ ) и пар дырок ( $g(\zeta)$  обнаруживает логарифмическую сингулярность в точке  $\zeta_s = 2\mu - 2\varepsilon(\mathbf{K}/2)$ , которая может оказаться достаточно близкой к левому краю полосы сплошного спектра). Таким образом, при достаточно малой величине  $\zeta_s$ , что имеет место как раз в случае сильной анизотропии эффективных масс в протяженной окрестности седловой точки, электрон-дырочная асимметрия плотности состояний относительного движения проявляется достаточно отчетливо. Подобная асимметрия не имеет места в случае эллиптической метрики, когда функции, представляющие плотность состояний относительного движения пар электронов и дырок, качественно подобны друг другу, т. е. плотность состояний возбуждений пары частиц и пары дырок имеет вид, показанный на рис. 2а.



**Рис. 3.** Характер решения системы уравнений  $\varepsilon(\mathbf{K}/2 \pm \mathbf{k}) = \mu$  в случаях, когда PFC вырождается в две точки и когда PFC имеет конечную протяженность. Область  $\Xi_K^{(-)}$  выделена

Возникновение PFC, приводящее к отличной от нуля плотности состояний относительного движения при  $\zeta = 0$ , есть очевидное необходимое условие того, чтобы спаривание при  $K \neq 0$  оказалось возможным уже при сколь угодно малой величине эффективной константы связи. По определению, PFC есть геометрическое место точек импульсного  $2D$ -пространства, где имеет место совпадение участков FC и изолинии кинетической энергии относительного движения пары, соответствующей ну-

левой энергии возбуждения:  $\varepsilon_K^{(r)}(\mathbf{k}) = \varepsilon_p$ . Поскольку принадлежащие PFC одночастичные состояния с импульсами  $\mathbf{K}/2 \pm \mathbf{k}$ , соответствующие паре с суммарным импульсом  $\mathbf{K}$  и импульсом относительного движения  $\mathbf{k}$ , имеют энергии, равные энергии Ферми  $\mu$ , уравнения, определяющие PFC, могут быть записаны как  $\varepsilon(\mathbf{K}/2 \pm \mathbf{k}) = \mu$ . Эти уравнения задают две линии в импульсном  $2D$ -пространстве относительного движения пары с суммарным импульсом  $\mathbf{K}$ . Совпадающие участки этих двух линий и образуют PFC. Заключенная между этими линиями область пространства импульсов относительного движения, для которой PFC является частью внешней границы, есть определенная выше область  $\Xi_K^{(-)}$ . Внешняя по отношению к  $\Xi_K^{(-)}$  область, частью границы которой также является PFC (граница этой области включает участки границы  $2D$ -зоны Бриллюэна), представляет собой область  $\Xi_K^{(+)}$ . Характер решения системы уравнений  $\varepsilon(\mathbf{K}/2 \pm \mathbf{k}) = \mu$  в случаях, когда PFC вырождается в две точки и когда PFC имеет конечную протяженность, показан соответственно на рис. 3а и б. На рис. 3а, соответствующем изотропному закону дисперсии,  $k_F$  — импульс Ферми, а  $k_p = \sqrt{k_F^2 - K^2/4}$ ; в области  $\Xi_K^{(-)}$  показана структура изолиний энергии относительного движения. На рис. 3б, на котором FC представляет собой квадрат со скругленными углами, область  $\Xi_K^{(-)}$  выделена.

### 3. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Гамильтониан электронной подсистемы купратного соединения в узельном представлении может быть записан в виде

$$\hat{H} = \sum_{n, n', \sigma} \varepsilon_0(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \hat{c}_{n\sigma}^\dagger \hat{c}_{n'\sigma} + U(0) \sum_n \hat{n}_{n\uparrow} \hat{n}_{n\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} U(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \hat{n}_n \hat{n}_{n'}, \quad (3)$$

где трехмерный векторный индекс  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$  нумерует узлы кристаллической решетки,  $\hat{c}_{n\sigma}^\dagger$  ( $\hat{c}_{n\sigma}$ ) — оператор рождения (уничтожения) частицы (в купратных соединениях под частицей обычно понимается дырка со спином  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  на узле  $\mathbf{n}$ ),  $\hat{n}_{n\sigma} = \hat{c}_{n\sigma}^\dagger \hat{c}_{n\sigma}$  — оператор числа заполнения состояния со спином  $\sigma$  на узле  $n$ ,  $\hat{n}_n = \sum_\sigma \hat{n}_{n\sigma}$ , параметры гамильтониана  $\varepsilon_0(n - n')$ ,  $U(0)$  и  $U(\mathbf{n} - \mathbf{n}')$ , определяющие затравочный закон дисперсии, энергию внутрицентровой корреляции и энергию взаимодействия частиц соответственно на узлах  $\mathbf{n}$  и

$\mathbf{n}'$ , не зависят от нормировочного объема. Поскольку купраты являются соединениями со слоистой кристаллической структурой, характеризующейся слабой связью между соседними проводящими медно-кислородными плоскостями, то, пренебрегая этой связью, гамильтониан (3) приближенно можно представить как сумму  $2D$ -гамильтонианов электронных подсистем, относящихся к медно-кислородным плоскостям. Рассмотрим одну такую плоскость и определим операторы рождения и уничтожения частицы с  $2D$ -импульсом  $\mathbf{k}$  и спином  $\sigma$  при помощи двумерного преобразования Фурье,

$$\begin{aligned} \hat{c}_{k\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_n \hat{c}_{n\sigma}^\dagger e^{+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}}, \\ \hat{c}_{k\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_n \hat{c}_{n\sigma} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}}, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $N_0$  — число элементарных ячеек в рассматриваемой плоскости с нормировочной площадью  $S$ ,  $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$  —  $2D$ -векторный индекс, определяющий положение узла на плоскости и в экспоненциальных множителях, имеющий смысл и размерность радиуса-вектора узла. В импульсном  $2D$ -представлении гамильтониан принимает обычный вид:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(2D)} &= \sum_{k\sigma} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu] \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{kk'q\sigma\sigma'} V(\mathbf{q}) \hat{c}_{k+q,\sigma}^\dagger \hat{c}_{k'-q,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k'\sigma'} \hat{c}_{k\sigma}. \end{aligned} \quad (5)$$

Этот гамильтониан получен из оператора  $\hat{H} - \mu \hat{N}$ , где  $\hat{N}$  — оператор полного числа частиц,

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \sum_n \varepsilon_0(n) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} \quad (6)$$

может рассматриваться как затравочный закон дисперсии, а матричный элемент взаимодействия между частицами

$$\begin{aligned} V(\mathbf{k}) &= \frac{1}{N_0} \sum_n U(\mathbf{n}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{1}{S} \int U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^2r, \end{aligned} \quad (7)$$

в котором интегральное представление соответствует случаю, когда параметры  $U(\mathbf{n})$  относительно мало меняются на расстояниях порядка постоянной решетки  $a$ . Использование интегрального представления матричных элементов  $V(\mathbf{k})$  фактически исключает из рассмотрения случай предельно сильных внутрицентровых корреляций, которые, как

уже отмечалось, в купратах являются умеренными (сравнимыми с шириной энергетической зоны  $t$ ):  $U(0) \sim t$ .

Факт существования «большого» ФС, определяемого полной концентрацией частиц  $(1 - x)$ , где  $x$  — уровень допирования, следующий из экспериментов по фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [19, 20], позволяет рассматривать в качестве основного состояния  $|F\rangle$  гамильтониана (5) то состояние, которое соответствует полностью заполненным одночастичным состояниям внутри ФС и полностью вакантным состояниям вне его. Тогда возбужденное состояние, соответствующее частице с импульсом  $\mathbf{k}$  и спином  $\alpha$ , добавленной в систему  $N$  частиц, может быть определено как  $\hat{c}_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger |F\rangle$ , а возбужденное состояние, соответствующее частице с импульсом  $\mathbf{k}$  и спином  $\alpha$ , удаленной из системы  $N$  частиц, как  $\hat{c}_{\mathbf{k},\alpha} |F\rangle$ . Эти возбужденные состояния не являются собственными состояниями гамильтониана (5), поскольку коммутаторы этого гамильтониана с операторами  $\hat{c}_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger$  и  $\hat{c}_{\mathbf{k},\alpha}$  содержат произведения трех фермиевских операторов. Линеаризация этих коммутаторов в приближении хаотических фаз приводит к уравнениям движения [21]

$$\begin{aligned} [\hat{H}^{(2D)}, \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger]_- &= +(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger, \\ [\hat{H}^{(2D)}, \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha}]_- &= -(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha}, \end{aligned} \quad (8)$$

определяющим закон дисперсии

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + \sum_{pq\sigma} V(\mathbf{q}) \cdot \bar{n}_\sigma(p) [\delta_{q0} - \delta_{p,k+q} \delta_{\sigma\alpha}], \quad (9)$$

который, в принципе, и восстанавливается из экспериментов ARPES. Здесь

$$\bar{n}_\sigma(\mathbf{p}) = \langle F | \hat{c}_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p},\sigma} | F \rangle$$

— среднее число заполнения состояния с импульсом  $p$  и спином  $\sigma$ , которое в отсутствие магнитного поля не зависит от спинового индекса.

Первое из уравнений (8) определяет квазичастицу с энергией  $(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)$  и импульсом  $k > k_F$ , где  $k_F$  — фермиевский импульс в направлении импульса  $\mathbf{k}$ , второе — квазидырку с энергией  $(\mu - \varepsilon(\mathbf{k}))$  и импульсом  $k < k_F$ . Граница, разделяющая в  $2D$ -импульсном пространстве области заполненных и вакантных состояний, т. е. ФС, определяется уравнением  $\varepsilon(\mathbf{k}) = \mu$ .

Рассмотрим теперь синглетные возбуждения в виде пары частиц вне ФС или пары дырок внутри ФС. Суммарный импульс пары  $\mathbf{K} = \mathbf{k}_+ + \mathbf{k}_-$  сохраняется, и состояние пары при заданном  $\mathbf{K}$  формируется линейной комбинацией состояний относительного движения с импульсами  $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_+ - \mathbf{k}_-)/2$ :

$$\begin{aligned} |N + 2; \mathbf{K}\rangle &= \sum_{k\alpha} \psi_K^{(+)}(\mathbf{k}) \hat{c}_{\frac{\mathbf{K}}{2}+k,\alpha}^\dagger \hat{c}_{\frac{\mathbf{K}}{2}-k,\bar{\alpha}}^\dagger |F\rangle, \\ |N - 2; \mathbf{K}\rangle &= \sum_{k\alpha} \psi_K^{(-)}(\mathbf{k}) \hat{c}_{\frac{\mathbf{K}}{2}+k,\alpha} \hat{c}_{\frac{\mathbf{K}}{2}-k,\bar{\alpha}} |F\rangle, \end{aligned} \quad (10)$$

где спиновый индекс « $\bar{\alpha}$ » определяется как противоположный индексу « $\alpha$ »: если  $\alpha = \uparrow (\downarrow)$ , то  $\bar{\alpha} = \downarrow (\uparrow)$ . Вычисление коммутаторов гамильтониана (5) с операторами  $\hat{A}_K^\dagger$  и  $\hat{A}_K$ , определенными соотношениями

$$|N + 2; \mathbf{K}\rangle = \hat{A}_K^\dagger |F\rangle, \quad |N - 2; \mathbf{K}\rangle = \hat{A}_K |F\rangle, \quad (11)$$

и последующая линеаризация полученных выражений в приближении хаотических фаз приводят к интегральным уравнениям, определяющим коэффициенты  $\psi_K^{(+)}(\mathbf{k})$  и  $\psi_K^{(-)}(\mathbf{k})$  в линейных комбинациях (10). Для  $\psi_K^{(+)}(\mathbf{k})$  имеем

$$\begin{aligned} 2\xi_K(\mathbf{k}) \psi_K^{(+)}(\mathbf{k}) + \sum_{k'} V(\mathbf{k}-\mathbf{k}') [1 - \bar{n}_\alpha(\mathbf{K}/2 + \mathbf{k}') - \\ - \bar{n}_{\bar{\alpha}}(\mathbf{K}/2 - \mathbf{k}')] \psi_K^{(+)}(\mathbf{k}') = (E - 2\mu) \psi_K^{(+)}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (12)$$

где кинетическая энергия пары частиц, отсчитанная от химического потенциала,

$$2\xi_K(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{K}/2 + \mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{K}/2 - \mathbf{k}) - 2\mu, \quad (13)$$

а  $E$  — подлежащая определению энергия возбуждения пары. Энергии частиц  $\varepsilon(\mathbf{K}/2 \pm \mathbf{k})$  определяются выражением (9). При нулевой температуре числа заполнения, входящие в (12), равны единице или нулю, если их аргументы  $\mathbf{K}/2 \pm \mathbf{k}'$  находятся соответственно внутри или вне ФС. Поэтому выражение в квадратных скобках равно единице, если импульсы  $\mathbf{K}/2 \pm \mathbf{k}$  частиц, составляющих пару с суммарным импульсом  $\mathbf{K}$ , находятся вне ФС. Этим условием определяется область импульсного пространства  $\Xi_K^{(+)}$ , по которой фактически проводится суммирование по  $k'$  в (12). При отличной от нуля температуре множитель в квадратных скобках меньше единицы и суммирование (с соответствующим весом) проводится по всему импульсному пространству. Таким образом, имеет место «температурное ослабление» взаимодействия между компонентами пары.

Уравнение, определяющее  $\psi_K^{(-)}(\mathbf{k})$ , имеет вид

$$\begin{aligned} -2\xi_K(\mathbf{k}) \psi_K^{(-)}(\mathbf{k}) + \sum_{k'} V(\mathbf{k}-\mathbf{k}') [1 - \bar{p}_{\bar{\alpha}}(\mathbf{K}/2 + \mathbf{k}') - \\ - \bar{p}_\alpha(\mathbf{K}/2 - \mathbf{k}')] \psi_K^{(-)}(\mathbf{k}') = (2\mu - E) \psi_K^{(-)}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (14)$$

где  $\xi_K(\mathbf{k}) < 0$ , а средние числа заполнения дырочных состояний определяются как

$$\bar{p}_\alpha(\mathbf{k}) = 1 - \bar{n}_{\bar{\alpha}}(\mathbf{k}). \quad (15)$$

При нулевой температуре выражение в квадратных скобках в (14) равно единице в пределах области импульсного пространства  $\Xi_K^{(-)}$  внутри FC, по которой фактически проводится суммирование по импульсу относительного движения пары.

Кинетическая энергия (13) пары с суммарным импульсом  $\mathbf{K}$  складывается из двух частей: кинетической энергии относительного движения (1) и той части энергии, которая связана с сохраняющейся энергией центра масс пары. Поскольку связанное состояние может возникать именно в относительном движении пары, определяя энергию относительного движения как  $E_K^{(\lambda)} = \lambda[E - 2\varepsilon(\mathbf{K}/2)]$ , уравнения (12) и (14) можно свести к

$$\begin{aligned} [E_K^{(\lambda)} - \varepsilon_K^{(\lambda)}(\mathbf{k})] \psi_K^{(\lambda)}(\mathbf{k}) = \\ = \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \Theta_K^{(\lambda)}(\mathbf{k}') \psi_K^{(\lambda)}(\mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (16)$$

где индекс  $\lambda = \pm 1$  соответственно для пары частиц и дырок, характеристическая функция  $\Theta_K^{(\lambda)}(\mathbf{k})$  имеет вид

$$\begin{aligned} \Theta_K^{(+)}(\mathbf{k}) &= 1 - \bar{n}_\alpha(\mathbf{K}/2 + \mathbf{k}) - \bar{n}_{\bar{\alpha}}(\mathbf{K}/2 - \mathbf{k}), \\ \Theta_K^{(-)}(\mathbf{k}) &= 1 - \bar{p}_{\bar{\alpha}}(\mathbf{K}/2 + \mathbf{k}) - \bar{p}_\alpha(\mathbf{K}/2 - \mathbf{k}), \end{aligned} \quad (17)$$

а кинетическая энергия пары частиц или дырок определяется как  $\varepsilon_K^{(\lambda)}(\mathbf{k}) = \lambda \varepsilon_K^{(r)}(\mathbf{k})$ .

#### 4. ОТНОСИТЕЛЬНОЕ ДВИЖЕНИЕ ПАРЫ

Перепишем (16) в виде интегрального уравнения

$$\psi(\mathbf{k}) = G(\mathbf{k}; E) \int U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \psi(\mathbf{k}') \Theta(\mathbf{k}') d^2 k', \quad (18)$$

в котором обозначено  $\psi(\mathbf{k}) \equiv \psi_K^{(\lambda)}(\mathbf{k})$ ,  $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \equiv S/(2\pi)^2 V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ ,  $\Theta(\mathbf{k}') \equiv \Theta_K^{(\lambda)}(\mathbf{k}')$ , интегрирование проводится по всей  $2D$ -зоне Бриллюэна, а также определена запаздывающая функция Грина свободного относительного движения пары,

$$G(\mathbf{k}) = \frac{1}{E - \varepsilon_K^{(\lambda)}(\mathbf{k}) + i\gamma \text{sign } E}, \quad (19)$$

где  $\gamma \rightarrow +0$ .

Рассмотрим вспомогательное линейное однородное интегральное уравнение Фредгольма второго рода с симметричным ядром  $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ , определяющее собственные функции  $\varphi_s(\mathbf{k})$  и собственные значения  $\lambda_s$  этого ядра:

$$\varphi_s(\mathbf{k}) = \lambda_s \int U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \varphi_s(\mathbf{k}') d^2 k'. \quad (20)$$

В случае невырожденного ядра собственные функции  $\varphi_s(\mathbf{k})$  образуют бесконечную полную ортонормированную систему функций [22],

$$\int \varphi_{s'}^*(\mathbf{k}) \varphi_s(\mathbf{k}) d^2 k = \delta_{s's}, \quad (21)$$

и ядро интегрального оператора в (20) может быть представлено в виде спектрального разложения Гильберта–Шмидта по этой полной системе [22],

$$U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \sum_s \frac{\varphi_s(\mathbf{k}) \varphi_s^*(\mathbf{k}')}{\lambda_s}. \quad (22)$$

Разложим функцию  $\Theta(\mathbf{k})\psi(\mathbf{k})$  по полной системе функций  $\varphi_s(\mathbf{k})$ :

$$\Theta(\mathbf{k})\psi(\mathbf{k}) = \sum_s \alpha_s \varphi_s(\mathbf{k}). \quad (23)$$

Коэффициенты разложения записываются как

$$\alpha_s = \int \varphi_s^*(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}) \Theta(\mathbf{k}) d^2 k. \quad (24)$$

Используя (22) и (24), интегральное уравнение (18) можно свести к бесконечной системе линейных однородных уравнений:

$$\sum_{s'} \left\{ \delta_{ss'} - \frac{1}{\lambda_{s'}} G_{ss'}(E) \right\} \alpha_{s'} = 0, \quad (25)$$

в которой запаздывающая функция Грина в представлении, образованном функциями  $\varphi_s(\mathbf{k})$ , определена как

$$G_{ss'}(E) = \int \varphi_s^*(\mathbf{k}) G(\mathbf{k}; E) \Theta(\mathbf{k}) \varphi_{s'}(\mathbf{k}) d^2 k. \quad (26)$$

Отметим, что при нулевой температуре функция  $\Theta(\mathbf{k})$  равна единице внутри некоторой области  $\Xi$  ( $\Xi = \Xi_K^{(+)}$  для пары частиц, и  $\Xi = \Xi_K^{(-)}$  для пары дырок) импульсного пространства и нулю вне этой области, поэтому интегрирование по импульсу в таком случае фактически проводится именно по этой ограниченной области импульсного пространства. Условие нетривиальной совместности системы уравнений (25) определяет спектр энергии относительного движения пары.

В случае вырожденного ядра алгебраическая система (25) сводится к конечной системе линейных однородных уравнений и условие ее нетривиальной совместности принимает вид

$$\det \left\{ \delta_{ss'} - \frac{1}{\lambda_{s'}} G_{ss'}(E) \right\} = 0, \quad (27)$$



где индекс «s» нумерует конечное число собственных функций вырожденного ядра.

Из определения (26) следует, что основной вклад в матричные элементы функции Грина вносит относительно небольшая область  $\Xi$  импульсного пространства, что может рассматриваться как основание для того, чтобы заменить истинное невырожденное ядро  $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$  некоторым вырожденным ядром  $U_d(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ , близким к истинному в пределах области  $\Xi$ . Пусть  $k_b$  — характерный линейный размер области  $\Xi$ , такой что основной вклад в (18) дают импульсы  $k \leq k_b, k' \leq k_b$ . Тогда вектор передачи импульса при рассеянии  $\kappa = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$  ограничен,  $\kappa \leq 2k_b$ , и ядро  $U(\kappa)$  в области  $0 \leq \kappa \leq 2k_b$  может быть аппроксимировано простой квадратичной функцией

$$U_d(\kappa) = U_0 r_0^2 (1 - \kappa^2 r_0^2 / 2), \quad (28)$$

где  $U_0 > 0$  и  $r_0$  — параметры потенциала отталкивательного взаимодействия между частицами, характеризующие соответственно его амплитуду и радиус действия. При  $\kappa > 2k_b$  следует положить  $U_d(\kappa) = 0$ . Рассматривая этот приближенный потенциал как ядро интегрального уравнения (20), можно найти соответствующие ему собственные функции и собственные значения. Вырожденному ядру (28) соответствует конечное число собственных функций, и нетрудно убедиться в том, что это ядро имеет всего четыре собственные функции.

В случае вырожденного ядра собственные функции повторяют его форму [22] и могут быть записаны в виде

$$\varphi(\mathbf{k}) = a + \chi \mathbf{k} + b k^2 \quad (29)$$

при  $0 \leq k \leq k_b$ , и  $\varphi(\mathbf{k}) = 0$  при  $k > k_b$ , где коэффициенты  $a, b$  и  $\chi$  подлежат определению для каждой из собственных функций. Уравнения, из которых определяются эти коэффициенты, существенно упрощаются, благодаря тому что область интегрирования  $\Xi$  в (20) инвариантна по отношению к преобразованию инверсии  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ . Таким образом, собственные функции обладают определенной четностью по переменной  $\mathbf{k}$ . Система уравнений, определяющая коэффициенты в функциях (29), разделяется на две независимые подсистемы, из которых находятся соответственно четные и нечетные собственные функции.

Выберем направления координатных осей  $k_1$  и  $k_2$  в импульсном пространстве вдоль осей симметрии области  $\Xi$  и обозначим

$$\begin{aligned} K_n &= r_0^{2n+2} \int_{\Xi} k^{2n} d^2 k, \\ K_n^{(s)} &= r_0^{2n+2} \int_{\Xi} k_s^{2n} d^2 k, \end{aligned} \quad (30)$$

где  $n = 0, 1, 2$ , а  $s = 1, 2$  имеет смысл декартова индекса координатной оси в импульсном пространстве. Нормированные нечетные собственные функции и соответствующие собственные значения вырожденного ядра находятся сразу:

$$\varphi_s^{(-)}(\mathbf{k}) = \frac{r_0^2 k_s}{\sqrt{K_1^{(s)}}}, \quad \lambda_s^{(-)} = \frac{1}{U_0 K_1^{(s)}}. \quad (31)$$

Из условия разрешимости системы уравнений для коэффициентов  $a$  и  $b$ , определяющих четные собственные функции, находим два собственных значения

$$\lambda_s^{(+)} = \frac{-2}{U_0 K^2} \left[ (K_0 - K_1) \pm \sqrt{(K_0 - K_1)^2 + K^2} \right] \quad (32)$$

и соответствующие им вещественные собственные функции

$$\begin{aligned} \varphi_s^{(+)}(\mathbf{k}) &= \\ &= a_s \left[ 1 - \frac{K_0 \pm \sqrt{(K_0 - K_1)^2 + K^2}}{2K_1 - K_2} r_0^2 k^2 \right], \end{aligned} \quad (33)$$

где по-прежнему  $s = 1, 2$ ;  $a_s$  — нормировочные коэффициенты, и по определению

$$K^2 = K_0 K_2 - K_1^2 \quad (34)$$

— положительная (в силу неравенства Коши–Буняковского для интегралов  $K_n$ ) величина. Отметим, что найденные собственные функции вырожденного ядра (28) ортогональны с весом  $\Theta(\mathbf{k})$ .

Следует также отметить, что одно из найденных собственных значений (32), а именно, соответствующее верхнему знаку перед корнем, отрицательно, тогда как другое, как и остальные собственные значения (31), положительно. Собственная функция (33), соответствующая отрицательному собственному значению, не является знакопостоянной в области определения, меняя знак на некоторой линии (дуге окружности) внутри этой области.

Не любое ядро, соответствующее отталкивательному (положительно определенному) потенциалу, может иметь отрицательные собственные значения (хотя бы одно такое значение). Например, ядро, изображаемое функцией Гаусса, имеет все неотрицательные собственные значения.

Таким образом, матрица  $4 \times 4$  оператора Грина (26) распадается на две матрицы  $2 \times 2$  между четными,  $G_{ss'}^{(+)}(E)$ , и нечетными,  $G_{ss'}^{(-)}(E)$ , собственными функциями вырожденного ядра (28). Последняя матрица является диагональной с элементами

$$G_s^{(-)}(E) = \int G(\mathbf{k}; E) [\varphi_s^{(-)}(\mathbf{k})]^2 \Theta(\mathbf{k}) d^2k, \quad (35)$$

поэтому уравнение (27) распадается на три независимых уравнения

$$\det \{ \lambda_{s'}^{(+)} \delta_{ss'} - G_{ss'}^{(+)}(E) \} = 0, \quad G_s^{(-)}(E) = \lambda_s^{(-)}, \quad (36)$$

где  $s, s' = 1, 2$ ,

$$G_{ss'}^{(+)}(E) = \int G(\mathbf{k}; E) \varphi_s^{(+)}(\mathbf{k}) \varphi_{s'}^{(+)}(\mathbf{k}) \Theta(\mathbf{k}) d^2k. \quad (37)$$

Этими уравнениями определяется энергетический спектр относительного движения пары частиц.

### 5. СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ

При вычислениях удобно изменить начало отсчета энергии  $E \rightarrow E + \varepsilon_p$  и перейти от энергии относительного движения к энергии возбуждения, положив в (19)  $\varepsilon_K^{(\lambda)}(\mathbf{k}) = \zeta(\mathbf{k}) + \varepsilon_p$ . По определению энергия возбуждения пары принадлежит полюсе сплошного спектра,  $0 \leq \zeta(\mathbf{k}) \leq \zeta_0$ . При таком выборе начала отсчета энергия связанного состояния отрицательна:  $E < 0$ . Соответственно, энергетический знаменатель в (19) имеет определенный знак:  $E - \zeta(\mathbf{k}) < 0$ , поэтому бесконечно малой мнимой добавкой в знаменателе функции Грина под интегралом (19) можно пренебречь. Таким образом, при  $E < 0$  имеем  $G_s^{(\pm)} < 0$ . Учитывая, что оба собственных значения, соответствующие нечетным собственным функциям, положительны при  $U_0 > 0$ , как это следует из (31), можно прийти к выводу, что уравнения  $G_s^{(-)}(E) = \lambda_s^{(-)}$  при  $E < 0$  решений не имеют.

То из уравнений (36), которое связано с четными собственными функциями, можно записать в виде

$$G_{11}^{(+)} G_{22}^{(+)} - [G_{12}^{(+)}]^2 = \lambda_2^{(+)} G_{11}^{(+)} + \lambda_1^{(+)} G_{22}^{(+)} - \lambda_1^{(+)} \lambda_2^{(+)}. \quad (38)$$

Решение уравнения (38) удобно искать графическим методом, рассматривая его левую и правую части как функции переменной  $E < 0$ . Функция в левой части (38) неотрицательна в силу неравенства Коши–Буняковского для соответствующих интегралов. Также неотрицательна и сумма двух первых

членов в правой части формулы (38), несмотря на то что  $\lambda_1^{(+)}$  и  $\lambda_2^{(+)}$  имеют разные знаки. Действительно, положив в (22)  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ , можно в случае вырожденного ядра (28) вычислить сумму в правой части формулы (22), состоящую в этом случае всего из четырех слагаемых. Принимая во внимание явный вид нечетных собственных функций и соответствующих им собственных значений (31), находим

$$[\varphi_1^{(+)}(\mathbf{k})]^2 / \lambda_1^{(+)} + [\varphi_2^{(+)}(\mathbf{k})]^2 / \lambda_2^{(+)} = U_d(k\sqrt{2}). \quad (39)$$

Правая часть формулы (39) существенно положительна во всей области определения импульса относительного движения пары ввиду условия  $U_d(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) > 0$ , соответствующего отталкиванию между частицами. Учитывая (39), первые два слагаемых в правой части формулы (38) можно представить в виде произведения отрицательного числа

$$\lambda_1^{(+)} \lambda_2^{(+)} = -4/U_0^2 K^2 < 0 \quad (40)$$

и интеграла вида (37), в котором при  $E < 0$ , очевидно,  $G(\mathbf{k}; E) < 0$ , а произведение  $\varphi_s^{(+)}(\mathbf{k}) \varphi_{s'}^{(+)}(\mathbf{k})$  заменено определено положительной величиной  $U_d(k\sqrt{2})$ :

$$\begin{aligned} \lambda_2^{(+)} G_{11}^{(+)} + \lambda_1^{(+)} G_{22}^{(+)} &= \\ &= \int \frac{4U_d(k\sqrt{2})\Theta(\mathbf{k})}{U_0^2 K^2 [ |E| + \zeta(\mathbf{k}) ]} d^2k. \end{aligned} \quad (41)$$

Отметим, что величина (41) обратно пропорциональна эффективной константе связи  $U_0$ .

Асимптотическое при  $E \rightarrow -\infty$  поведение гриновских функций (37) следует из их определения:

$$G_{ss'}^{(+)}(E) \propto E^{-1} \delta_{ss'}. \quad (42)$$

В таком случае решение уравнения (38), соответствующее предельно большим значениям эффективной константы связи  $U_0$ , имеет вид

$$E = -\frac{U_0}{2} \left[ \sqrt{(K_0 - K_1)^2 + K^2} - (K_0 - K_1) \right]. \quad (43)$$

Отметим, что при  $E \rightarrow -\infty$  левая часть уравнения (38) стремится к нулю как  $E^{-2}$ , тогда как правая часть стремится к положительному конечному пределу  $|\lambda_1^{(+)} \lambda_2^{(+)}|$ .

Чтобы рассмотреть асимптотическое при  $E \rightarrow -0$  поведение гриновских функций (37), представляемых интегралами по области  $\Xi_K^{(-)}$  или  $\Xi_K^{(+)}$ , удобно перейти от интегрирования по компонентам импульса относительного движения к интегрированию по новым переменным  $\zeta$  и  $\tau$ , где  $\zeta$  — энергия

возбуждения, а  $\tau$  — криволинейная координата в пространстве импульсов вдоль изолинии  $\zeta = \text{const}$  энергии относительного движения пары. Тогда функции (37) можно переписать как

$$G_{ss'}^{(+)}(E) = \int_0^{\zeta_0} G(\zeta; E)g(\zeta)F_{ss'}(\zeta) d\zeta, \quad (44)$$

где  $g(\zeta)$  — плотность состояний относительного движения пары, соответствующая области  $\Xi_K^{(-)}$  или  $\Xi_K^{(+)}$  (обозначаемой далее  $\Xi$ ),  $\zeta_0$  — ширина полосы сплошного спектра относительного движения, а

$$F_{ss'}(\zeta) = \frac{1}{g(\zeta)} \int_{\zeta=\text{const}} \frac{\varphi_s^{(+)}(\mathbf{k})\varphi_{s'}^{(+)}(\mathbf{k})}{|\nabla_{\mathbf{k}}\zeta(\mathbf{k})|} \Theta(\mathbf{k}) d\tau. \quad (45)$$

Таким образом, величины  $F_{ss'}(\zeta)$  имеют смысл средних значений произведений  $\varphi_s^{(+)}(\mathbf{k})\varphi_{s'}^{(+)}(\mathbf{k})$  на изолинии  $\zeta = \text{const}$ . Отметим, что при  $s = s'$  функции  $F_{ss}(\zeta)$  заведомо положительны, как положительна (в силу неравенства Коши–Буняковского) и их комбинация

$$F^2 \equiv F_{11}F_{22} - F_{12}^2.$$

Здесь и далее  $F_{ss'} \equiv F_{ss'}(0)$ .

При малых  $|E|$  гриновские функции (37) имеют особенность, которая может быть выделена известным методом Канторовича [23]. Предположим, что функция

$$f(\zeta) = g(\zeta)F_{ss'}(\zeta)$$

является дифференцируемой при  $E = 0$ . Тогда (44) можно представить в виде

$$G_{ss'}^{(+)}(E) = -f(0) \ln \frac{\zeta_0}{|E|} + f'(0)|E| \ln \frac{\zeta_0}{|E|} - \left\{ f'(0)\zeta_0 + \int_0^{\zeta_0} \frac{[f(\zeta) - f(0) - f'(0)\zeta]}{\zeta + |E|} d\zeta \right\}, \quad (46)$$

где штрихом обозначено дифференцирование по переменной  $\zeta$ . Интеграл в фигурных скобках особенности при  $|E| = 0$  не имеет, поэтому при малых значениях  $|E|$  все выражение в фигурных скобках может быть заменено его значением при  $|E| = 0$ , которое мы обозначим как  $A_{ss'}$ . Таким образом,  $-A_{ss'}$  представляет собой периодическую часть гриновской функции при  $|E| \rightarrow 0$ , и, следовательно, при  $|E| \ll \zeta_0$  гриновские функции могут быть представлены как

$$G_{ss'}^{(+)}(E) = -[g(0)F_{ss'}(0)] \ln \frac{\zeta_0}{|E|} + [g(0)F_{ss'}(0)]'|E| \ln \frac{\zeta_0}{|E|} - A_{ss'}. \quad (47)$$

Два первых слагаемых в (47) определяют характер сингулярности гриновских функций в точке  $E = -0$ . Если плотность состояний на PFC отлична от нуля (PFC имеет конечную длину), т.е.  $g(0) \neq 0$ , то гриновские функции обнаруживают логарифмическую сингулярность:  $G_{ss'}^{(+)}(E) \propto \ln |E|$  при  $E \rightarrow -0$ . Если же PFC вырождается в точки, и  $g(0)$  обращается в нуль, характер сингулярности гриновских функций при  $E \rightarrow -0$  существенно смягчается:  $G_{ss'}^{(+)}(E) \propto |E| \ln 1/|E|$ .

В случае, когда PFC имеет конечную длину, левая часть формулы (38) расходится при  $E \rightarrow -0$  как  $[\ln(1/|E|)]^2$ , тогда как правая часть расходится только как  $[\ln(1/|E|)]$ . Поэтому с учетом рассмотренной выше асимптотики гриновских функций при  $E \rightarrow -\infty$  графики функций, представляющих левую и правую части уравнений (38), имеют вид, схематически представленный на рис. 4 сплошными линиями. На этом рисунке видно, что уравне-

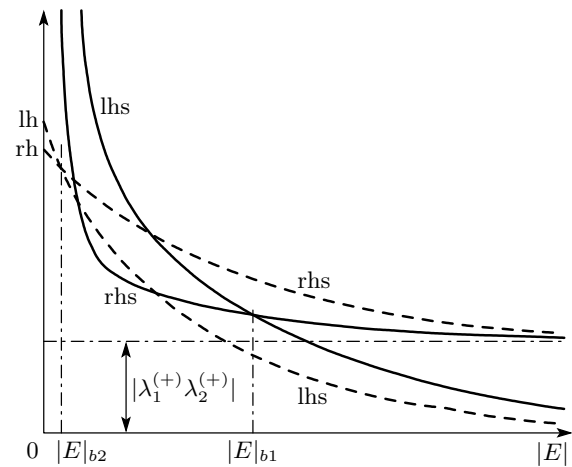


Рис. 4. Характер решения уравнения (38) при конечной длине PFC (сплошные линии) и в случае, когда PFC вырождается в точки (штриховые линии). Графики функций, изображающие левую и правую части уравнения (38), обозначены соответственно lhs и rhs. Показаны решения при конечной ( $|E|_{b1}$ ) и нулевой ( $|E|_{b2}$ ) длине PFC. Решение при нулевой длине PFC отвечает условию  $U_0 > U_0^{(c)}$ . В противном случае значение левой части (38) (обозначенное lh на вертикальной оси) оказывается меньше значения правой части (rh), и уравнение (38) решения не имеет

ние (38) имеет единственное решение при любом значении эффективной константы связи  $U_0$ . Характер этого решения в пределе слабой связи легко установить, используя явные выражения для гриновских функций (47). При этом, рассматривая случай  $g(0) \neq 0$ , второе слагаемое, обращающееся в нуль при  $|E| = 0$ , следует опустить. Уравнение (38) превращается в квадратное уравнение относительно величины  $x \equiv g(0) \ln(\zeta_0/|E|)$ , положительное решение которого можно представить как  $x_0 = 1/cU_0$ , где  $c$  — положительная константа, в пределе слабой связи определяемая выражением

$$c = C \left[ \sqrt{1 + \frac{F^2 K^2}{C^2}} + 1 \right]. \quad (48)$$

Здесь независимая от эффективной константы связи  $U_0$  постоянная  $C$  определяется интегралом вдоль РФС:

$$C = \frac{1}{g(0)U_0} \int_{\zeta=0} U_d(k\sqrt{2})\Theta(\mathbf{k}) \frac{d\tau}{|\nabla_k \zeta(\mathbf{k})|}. \quad (49)$$

Таким образом, имеем

$$|E| = \zeta_0 \exp\left(-\frac{2}{cU_0g(0)}\right), \quad (50)$$

т. е. связанное состояние относительного движения пары возникает уже при сколь угодно малой величине эффективной константы связи. Отметим, что при условии  $FK \ll C$  выражение (50) сохраняет свой вид с заменой  $c \rightarrow C$ .

Если РФС вырождается в точки (случай, рассмотренный ранее в [5]), первое слагаемое в (47) исчезает, и доминирующим при  $|E| \rightarrow 0$  оказывается вклад периодической части в гриновские функции. В таком случае решение уравнения (38) имеет место только при достаточно большой величине эффективной константы связи  $U_0$ , превышающей некоторое значение  $U_0^{(c)}$ , как это можно видеть из рис. 4. Действительно, при  $U_0 < U_0^{(c)}$  значение левой части формулы (38) при  $|E| = 0$ , обозначенное на рис. 4 как lh, становится меньше значения правой части (rh), что приводит к тому, что графики левой (lhs) и правой (rhs) частей уравнения (38), показанные на рис. 4 (для случая, когда  $U_0 > U_0^{(c)}$ ) штриховыми линиями, не имеют точки пересечения, и, таким образом, решение уравнения (38) отсутствует.

Решение (50), найденное для отталкивательного взаимодействия вида (28) в случае, когда РФС имеет конечную длину и  $g(0) \neq 0$ , формально совпадает с решением задачи Купера при взаимодействии притяжения вида  $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -U_0$  ( $U_0$  — положительная константа, взаимодействие отлично от

нуля в энергетическом слое шириной  $\zeta_0$ ) пары частиц с нулевым суммарным импульсом [1]. Такое решение имеет место для пар частиц, возбужденных внутри области  $\Xi^{(+)}$ , и для пар дырок, возбужденных внутри области  $\Xi^{(-)}$ . Известно [24], что энергия связи куперовской пары имеет экспоненциально малость (множитель 2 в экспоненте) по сравнению с величиной сверхпроводящей щели. Разумеется, то же самое имеет место и в случае спаривания с большим суммарным импульсом (множитель 2 в экспоненте в (50) по сравнению с параметром порядка, вычисленным в [13]). Причина такой малости заключается в том, что решение (50) по самой постановке задачи получено на фоне неперестроенного основного состояния нормальной ферми-жидкости и без учета процессов рассеяния между областями импульсного пространства  $\Xi^{(+)}$  и  $\Xi^{(-)}$ . Сам факт существования связанного состояния (50) является свидетельством неустойчивости основного состояния электронной системы, рассматриваемой как состояние, соответствующее заполнению всех состояний внутри области импульсного пространства, ограниченной ФС [25].

Отметим, что связанное стационарное состояние (50) возникает при отталкивательном взаимодействии, если ядро интегрального уравнения (18) имеет хотя бы одно отрицательное собственное значение. Ядро (29), как показано выше, такое отрицательное собственное значение определенно имеет. Если в (29) совершить предельный переход  $r_0^2 \rightarrow 0$  при условии  $U_0 r_0^2 = \text{const}$ , то возникающее в результате предельного перехода вырожденное ядро будет иметь единственное положительное собственное значение. При таком переходе полюс амплитуды рассеяния в плоскости комплексной энергии, соответствующий связанному стационарному состоянию, смещается с действительной оси в верхнюю полуплоскость и при гиперболической метрике импульсного пространства формально соответствует некоторому состоянию, характеризующемуся «отрицательным затуханием» [11], что также может рассматриваться как свидетельство неустойчивости основного состояния в виде ферми-заполнения.

Предельный переход  $r_0^2 \rightarrow 0$ ,  $U_0 r_0^2 = \text{const}$ , формально соответствующий приближению потенциала нулевого радиуса [26], допускает простую феноменологию, позволяющую зафиксировать то значение энергии связи пары, которое получается в результате решения уравнения (18) с потенциалом вида (28), если «память» об этом потенциале сохраняется в разрывной кусочно-постоянной волновой функции пары, скачком меняющей знак на некоторой линии

(линии нулей) внутри области определения импульса относительного движения. Такое решение для сверхпроводящего параметра порядка, возникающего в случае отталкивательного взаимодействия при спаривании с большим суммарным импульсом, получено в [11].

Как известно [6], связанному состоянию в модели BCS с притяжением соответствует чисто мнимый полюс вершинной функции, расположенный в верхней полуплоскости комплексной энергии. Абсолютная величина этого полюса дает энергетическую щель в спектре возбуждений системы, возникающую в результате перестройки ее основного состояния. К аналогичному результату, очевидно, приводит исследование вершинной функции и в случае класса отталкивательных потенциалов (28), имеющих отрицательные собственные значения (одно или несколько). Доказательство этого утверждения может быть получено подобно тому, как это сделано для отталкивательного потенциала, у которого отрицательна длина рассеяния для одного из значений углового момента  $l \neq 0$  [27, § 54], и который, таким образом, принадлежит к рассматриваемому классу потенциалов. При условии, что равные друг другу суммы входящих и выходящих импульсов в вершинной функции есть импульс пары  $\mathbf{K}$ , ее чисто мнимый полюс дает величину энергетической щели в спектре возбуждений относительного движения пары. Как и в модели BCS, в пределе слабой связи зависимость щели, найденная в [13], представляется экспоненциальной функцией вида (50) без множителя 2 в экспоненте и с вдвое большим предэкспоненциальным множителем.

## 6. КВАЗИСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ

При энергиях возбуждения  $0 < E < \zeta_0$  интегральное уравнение (18) определяет состояния сплошного спектра относительного движения пары. Распределение энергетических уровней в полосе сплошного спектра  $0 < \zeta < \zeta_0$  может быть найдено из системы уравнений (36). Может оказаться, что взаимодействие между частицами, составляющими пару, имеет результатом существенное сгущение уровней энергии относительного движения в малой окрестности некоторой точки  $\zeta_q$  внутри полосы сплошного спектра:  $0 < \zeta_q < \zeta_0$ . Соответствующее изменение плотности состояний относительного движения имеет резонансный характер, возникающий пик плотности состояний подобен размытому дельта-образному пику, отвечающему связанно-

му состоянию. Подобное квазистационарное состояние (QSS) характеризуется конечным временем жизни  $\tau_q$ , обратно пропорциональным величине размытия резонансного пика.

Комплексное решение системы уравнений (36), соответствующее QSS, имеет вид  $\tilde{E} = E - i\Gamma/2$ , где  $E$  — резонансная энергия, а  $\Gamma \propto \hbar/\tau_q > 0$  — затухание QSS. При конечной величине затухания бесконечно малой добавкой в знаменателе функции Грина (19) можно пренебречь и, опуская верхний индекс ( $\pm$ ), записать гриновские функции (35) и (37) в виде

$$G_{ss'}(E, \Gamma) = G'_{ss'}(E, \Gamma) + iG''_{ss'}(E, \Gamma),$$

где вещественная и мнимая части имеют вид

$$G'_{ss'}(E, \Gamma) = \int_0^{\zeta_0} \frac{(E - \zeta)F_{ss'}(\zeta)g(\zeta)}{(E - \zeta)^2 + \Gamma^2/4} d\zeta, \quad (51)$$

$$G''_{ss'}(E, \Gamma) = \frac{\Gamma}{2} \int_0^{\zeta_0} \frac{F_{ss'}(\zeta)g(\zeta)}{(E - \zeta)^2 + \Gamma^2/4} d\zeta. \quad (52)$$

Здесь функции  $F_{ss'}(\zeta)$  определены согласно (45). Таким образом, диагональные матричные элементы (52) определено положительны.

Система уравнений (36), определяющая теперь две неизвестные величины,  $E$  и  $\Gamma$ , должна быть записана в виде расширенной системы уравнений для ее вещественной и мнимой частей. Для каждого из уравнений (36), связанных с нечетными собственными функциями, получаем  $G'_s = \lambda_s^{(-)}$ ,  $G''_s = 0$ , откуда следует, что с нечетными собственными функциями не могут быть связаны не только дискретные уровни энергии относительного движения, выпадающие из сплошного спектра, но и QSS в полосе сплошного спектра. Действительно, уравнение  $G''_s = 0$ , как следует из определения (52), не может иметь решения ни при каком  $\Gamma > 0$ .

Вещественная и мнимая части уравнений (36), связанных с четными собственными функциями, имеют вид

$$\begin{aligned} G'_{11}G'_{22} - G_{12}^{\prime 2} &= \lambda_2^{(+)}G'_{11} + \lambda_1^{(+)}G'_{22} - \\ &\quad - \lambda_1^{(+)}\lambda_2^{(+)} + G''_{11}G''_{22} - G_{12}^{\prime\prime 2}, \\ G'_{11}G''_{22} + G''_{11}G'_{22} - 2G'_{12}G''_{12} &= \\ &= \lambda_2^{(+)}G''_{11} + \lambda_1^{(+)}G''_{22}. \end{aligned} \quad (53)$$

Каждое из уравнений (53) определяет некоторую кривую на плоскости  $E, \Gamma/2$ . Точки пересечения этих кривых (если они существуют) дают решение системы (53).

Рассмотрим QSS, в формирование которых основной вклад дают одночастичные состояния в непосредственной окрестности PFC. В таком случае энергия возбуждения QSS может рассматриваться как достаточно малая величина. Кроме того, ограничимся случаем, когда затухание QSS также достаточно мало, а именно, будем полагать, что  $\Gamma \leq 2E$ . При малых  $E$  и  $\Gamma$  нетрудно выделить сингулярный вклад в действительной части гриновских функций (51), используя для этого прием Канторовича [23]. Ограничимся рассмотрением случая, в котором PFC имеет конечную длину. Для вещественной части (51) имеем

$$G'_{ss'}(E, \Gamma) \propto -g(0)F_{ss'}(0) \ln \sqrt{\frac{\zeta_0^2}{E^2 + \Gamma^2/4} - A_{ss'}}, \quad (54)$$

где  $A_{ss'}$ , как и в (47), при  $E \rightarrow +0$  — периодическая часть гриновских функций. Аналогично, для мнимой части (52), которая при  $E \rightarrow +0$  является периодической функцией, приближенно находим

$$G''_{ss'}(E, \Gamma) \propto g(0)F_{ss'}(0) \left[ \frac{\pi}{2} + \operatorname{arctg} \frac{2E}{\Gamma} \right] \quad (55)$$

(поправочные слагаемые здесь не выписываем, поскольку точный предел при  $\Gamma \rightarrow +0$  функций (52), равный  $\pi g(E)F_{ss'}(E)$ , при малых  $E$  близок к соответствующему пределу выражения (55), равному  $\pi g(0)F_{ss'}(0)$ ).

Функции (54) зависят от  $E$  и  $\Gamma$  в комбинации  $E^2 + \Gamma^2/4 \equiv \rho^2$ , поэтому, если рассматривать  $\rho$  как полярный радиус на плоскости  $\Gamma/2, E$ , то, полагая  $\Gamma/2 = \rho \cos \varphi$ ,  $E = \rho \sin \varphi$ , где  $\varphi$  — соответствующий полярный угол, можно получить  $\operatorname{arctg} 2E/\Gamma = \varphi$ . Вместо  $\rho$  удобно ввести новую неизвестную  $x = g(0) \ln \zeta_0/\rho$ , определенно положительную при  $\rho < \zeta_0$ .

Во втором из уравнений (53) зависимость от  $\varphi$  выпадает, и оно определяет некоторое значение  $x = x_0$ , являющееся решением этого уравнения:

$$x_0 = \frac{1}{F^2} \left( \frac{2C}{K^2 U_0} - D \right), \quad (56)$$

где  $2D \equiv A_{11}F_{22} + A_{22}F_{11} - 2A_{12}F_{12}$ , положительная константа  $C$  определяется интегралом (49). Равенство  $x = x_0$  определяет окружность на плоскости  $\rho, \varphi$ , радиус которой равен

$$\rho_0 = \zeta_0 \exp \left( -\frac{x_0}{g} \right), \quad (57)$$

где  $g \equiv g(0)$ . В пределе слабой связи, когда вторым

слагаемым в скобках в (56) можно пренебречь, вместо (57) можно получить

$$\rho_0 = \zeta_0 \exp \left( -\frac{2}{c' U_0 g} \right), \quad (58)$$

где  $c' = C/F^2 K^2$ .

Исключая  $x$  в первом из уравнений (53), т. е. полагая в нем  $x = x_0$ , можно получить уравнение, определяющее полярный угол  $\varphi$ :

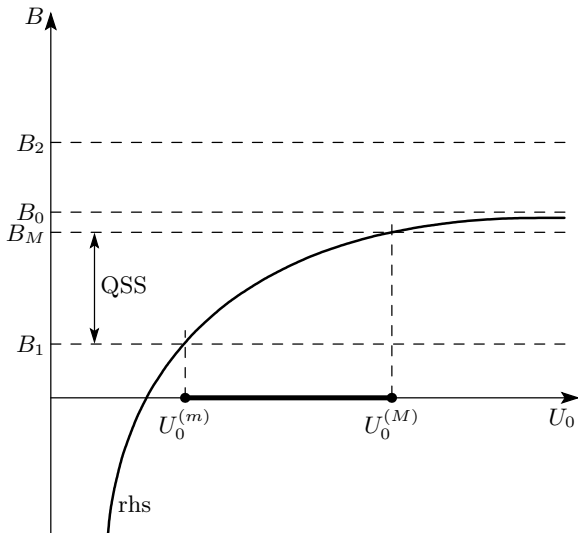
$$F^2 g^2 \left( \frac{\pi}{2} + \varphi \right)^2 = A^2 + \frac{\mu}{U_0} - \frac{4}{K^2 U_0^2} - F^2 x_0^2. \quad (59)$$

Здесь

$$A^2 = A_{11}A_{22} - A_{12}^2 \geq 0, \quad \mu/U_0 = \lambda_2^{(+)} A_{11} + \lambda_1^{(+)} A_{22}.$$

Выражением (59) определяется полярный угол  $\varphi = \varphi_0$ , причем, должно быть  $0 \leq \varphi_0 \leq \pi/2$ . Этот угол вместе с найденным ранее полярным радиусом  $\rho = \rho_0$  определяет решение (если оно вообще существует) системы уравнений (53). Необходимо отметить, что в задаче о QSS принципиальную роль играют вклады от периодической части  $A_{ss'}$  в вещественные части гриновских функций. Пренебрежение этими вкладами (как в задаче о связанных состояниях) приводит к уравнению вида (59) с  $A = 0$  и  $\mu = 0$ , которое, очевидно, решения не имеет.

Условия возникновения QSS с малым затуханием определяются двумя неравенствами:  $x_0 \geq 0$  и  $0 \leq \varphi_0 \leq \pi/2$ . Первое из них при достаточно очевидном условии  $D \geq 0$  приводит к ограничению сверху на значения эффективной константы связи:  $U_0 \leq U_0^{(M)} \equiv 2C/DK^2$ . Если при этом ограничении уравнение (59) имеет решение в интервале  $(0, \pi/2)$ , то это решение  $\varphi = \varphi_0$  вместе с (57) определяет QSS. На рис. 5 схематически показано, как возникает решение, соответствующее QSS. Вертикальная ось  $B$  соответствует значениям левой и правой частей уравнения (59), горизонтальная — значениям эффективной константы связи  $U_0$ . Рисунок 5 иллюстрирует характер решения уравнения (59) для пары с некоторым импульсом  $\mathbf{K}$ , т. е. при определенных значениях параметров этого уравнения, являющихся характеристиками области определения импульса относительного движения пары. Правая часть уравнения (59) при  $U_0 \rightarrow 0$  стремится к  $-\infty$  как  $-U_0^{-2}$ , а при  $U_0 \rightarrow \infty$  стремится к постоянному пределу  $B_0 = A^2 - D^2/F^2$ . Значение  $U_0^{(M)}$  ограничивает эффективную константу связи сверху, поэтому, если при изменении полярного угла от 0 до  $\pi/2$  левая часть (59) изменяется в пределах от



**Рис. 5.** Графическая иллюстрация возникновения QSS в зависимости от величины эффективной константы связи  $U_0$ . По вертикальной оси отложены значения  $B$  левой и правой частей уравнения (59). Допустимые условием  $0 \leq \varphi_0 \leq \pi/2$  независимые от  $U_0$  значения левой части заключены в интервале  $B_1 \leq B \leq B_2$ . График правой части представлен кривой, обозначенной rhs. Решения уравнений (56) и (59), соответствующие QSS, существуют в интервале значений эффективной константы связи  $U_0^{(m)} \leq U_0 \leq U_0^{(M)}$

$B_1 = \pi^2 F^2 g^2 / 4$  до  $B_2 = \pi^2 F^2 g^2$ , как показано на вертикальной оси на рис. 5, то точки пересечения горизонтальных прямых  $B = B_1$  и  $B = B_2$  с графиком правой части (59), обозначенной как rhs, определяют интервал значений эффективной константы связи

$$U_0^{(m)} \leq U_0 \leq U_0^{(M)}, \quad (60)$$

в котором могут возникать QSS с большим временем жизни.

Конкретные значения  $U_0^{(m)}$  и  $U_0^{(M)}$  существенно зависят от размеров и формы области интегрирования  $\Xi$ , а также от вида закона дисперсии для относительного движения пары  $\zeta(\mathbf{k})$ , которые, в свою очередь, определяются электронным законом дисперсии и величиной и направлением суммарного импульса пары  $\mathbf{K}$ . Поскольку асимптотические выражения (54) и (55) имеют место при выполнении условия зеркального нестинга FC, можно прийти к выводу, что существует некоторое множество векторов  $\mathbf{K}$ , близких к оптимальному (когда условие зеркального нестинга выполняется наилучшим образом), для которых условия возникновения QSS с ма-

лым затуханием заведомо могут быть выполнены. На рис. 5 продемонстрирована лишь одна из возможностей возникновения QSS с некоторым импульсом  $\mathbf{K}$ . Изменение  $\mathbf{K}$  влечет за собой изменение параметров уравнений (56) и (59), в частности, может оказаться, что  $B_1 > B_M$ , и QSS не возникает. При условии, что  $B_2 < B_M$ , где  $B_M$  соответствует значению константы связи  $U_0^{(M)}$ , положение верхней границы для эффективной константы связи определяется пересечением горизонтальной прямой  $B = B_2$  с графиком правой части (59).

Следует отметить, что изменение эффективной константы связи при заданном  $\mathbf{K}$  (например, ее уменьшение с ростом допирования [5]) может вывести ее за пределы интервала  $(U_0^{(m)}, U_0^{(M)})$  и, таким образом, привести к исчезновению QSS.

### 7. ПСЕВДОЩЕЛЕВОЕ СОСТОЯНИЕ

В настоящее время существуют разные точки зрения относительно природы псевдощелевого состояния, основанные на анализе моделей с сильными электронными корреляциями. Одна из них связана с предположением о том, что псевдощель возникает благодаря сильным флуктуациям фазы сверхпроводящего параметра порядка [28–30], и, таким образом, некогерентные состояния пар существуют в некотором интервале температур выше температуры сверхпроводящего перехода  $T_C$ . Другая точка зрения [31, 32] предполагает, что в псевдощелевом режиме проявляется особая фаза вещества, характеризующаяся «скрытым» (в смысле трудностей, связанных с экспериментальным обнаружением) параметром порядка, обусловленным циркуляцией орбитальных токов вдоль химических связей в медно-кислородных плоскостях. Шахматный порядок в распределении знака циркуляции по элементарным ячейкам соответствует антиферромагнитному орбитальному упорядочению. Некогерентное состояние в виде флуктуаций такого орбитального антиферромагнитного порядка [33, 34] также рассматривается как возможная причина возникновения псевдощелевого состояния купратов.

Несмотря на то что указанные подходы к описанию псевдощелевого состояния основываются на различных физических идеях, в конечном итоге они приводят к выводу о том, что выше  $T_C$  в достаточно широком температурном диапазоне существуют состояния либо в виде некогерентных пар, возбужденных при переходе вверх через  $T_C$  из конденсата (спаривание в канале частица–частица), либо в

виде пар, образованных орбитальными токами, циркулирующими в противоположных направлениях в соседних элементарных ячейках [33] (спаривание в канале частица–дырка). Достаточно широкий температурный диапазон, в котором существуют флуктуации фазы при отличной от нуля амплитуде сверхпроводящего параметра порядка, объясняется либо наличием квантовой критической точки [33], либо термическим разупорядочением волны  $d$ -плотности [34], соответствующей антиферромагнетизму. Отметим, что в рамках  $t$ - $J$ -модели, исследованной в [33], естественным образом возникают две бозевские ветви спектра элементарных возбуждений, одна из которых связана с отсутствием фермионных возбуждений на данном узле кристаллической решетки, а другая — с заполнением узла двумя фермионами. В [33] показано, каждый из двух сортов бозонов (интерпретируемых как дырки) конденсируется у дна своей энергетической зоны, причем положению дна первой из зон соответствует нулевой импульс ( $\mathbf{Q}_1 = 0$ ), тогда как дну второй зоны соответствует большой импульс  $\mathbf{Q}_2 = (\pi, \pi)$ . Характер корреляции токов, циркулирующих в элементарных ячейках, показывает, что между дырками двух сортов имеет место эффективное притяжение, соответствующее относительно малой энергии связи пары дырок с различными знаками циркуляции орбитального тока.

QSS с относительно большим временем жизни, найденные здесь в рамках представлений о дelokализованных электронах, также соответствуют особым элементарным возбуждениям электронной подсистемы кристалла, формируемым парами одночастичных состояний. При заданном суммарном импульсе пары такие возбуждения принадлежат сплошному спектру относительного движения пары и проявляются как резкое увеличение плотности состояний в узком, порядка затухания QSS, интервале энергии. Вообще говоря, QSS формируются всеми одночастичными состояниями из области определения импульса относительного движения пары. Таким образом, возникновению QSS соответствует подавление плотности одночастичных состояний во всем диапазоне изменения энергии относительного движения. В этом смысле появление псевдощели в спектре одночастичных возбуждений, наблюдаемое в купратах, может быть непосредственно связано с возникновением QSS.

Подчеркнем, что QSS, как и стационарное состояние пары частиц или дырок, возникают как решения одного и того же уравнения (18) для волновой функции относительного движения пары.

Следует отметить, что неравенство (60) позволя-

ет прийти к выводу о том, что QSS и связанный с ними псевдощелевой режим существуют в ограниченном диапазоне температур. Действительно, в уравнение движения пары (18) энергия взаимодействия между частицами  $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$  входит с весом  $\Theta(\mathbf{k}')$ , который при  $T = 0$  является характеристической функцией (17) кинематически разрешенной области  $\Xi$ :  $\Theta(\mathbf{k}') = 1$  внутри  $\Xi$ , и  $\Theta(\mathbf{k}') = 0$  вне  $\Xi$ . При  $T \neq 0$  из-за температурной зависимости средних чисел заполнения вклад функции  $\Theta(\mathbf{k}')$  в интеграл в (18) с ростом температуры уменьшается, что может быть интерпретировано (как уже отмечалось выше) как «температурное ослабление» взаимодействия между компонентами пары. Соответствующее уменьшение эффективной константы связи  $U_0$  приводит к тому, что, начиная с ее значения  $U_0^{(m)}$ , относящегося к определенной температуре  $T^*$ , решение уравнения (59), а следовательно, и существование QSS с малым затуханием оказывается невозможным. Температура  $T^*$  принимает различные (но близкие) значения для QSS с различными суммарными импульсами вблизи оптимального, поэтому переход (кроссовер) из псевдощелевого состояния в состояние нормальной ферми-жидкости должен наблюдаться в некотором интервале температур.

Температура кроссовера  $T^*$  имеет тот же энергетический масштаб, что и температура сверхпроводящего перехода  $T_C$ . Действительно, если предположить, что при заданном уровне допирования и при  $T = 0$  эффективная константа связи имеет некоторое значение  $U_0$  из интервала (60), то при повышении температуры, благодаря температурному ослаблению взаимодействия, следует ожидать ее уменьшения. Учитывая, что некогерентность пар возникает при температуре  $T_C$ , температурную зависимость эффективной константы связи можно оценить как  $U_0(T) = U_0 \text{th}(T_C/T)$ , откуда можно получить оценку температуры кроссовера:  $T^* = T_C \text{th}^{-1}(U_0^{(m)}/U_0)$ .

Наличие QSS как элементарных возбуждений электронной системы, проявляющихся в интервале температур  $T_C < T < T^*$ , может быть причиной весьма существенного отличия свойств этой системы выше температуры сверхпроводящего перехода  $T_C$  от свойств нормальной ферми-жидкости. Феноменологическая схема [35], развитая для описания состояния квазидвумерной электронной системы, возникающего (при повышении температуры) из сверхпроводящего конденсата пар («алгебраическая ферми-жидкость» [36, 30], обладающая свойствами, в некотором смысле промежуточными между свойствами нормальной ферми-жидкости и жидкости Латтинджера, в которой хорошо опре-



делены коллективные возбуждения в виде волн зарядовой и спиновой плотности и сильно затухают квазичастичные возбуждения), предполагают, что переход из сверхпроводящего в нормальное состояние происходит как переход Березинско-Костерлица–Таулеса в результате возникновения сдвоя фазы волновой функции конденсата из-за разрыва пар «вихрь–антивихрь». Асимптотически точная по параметру  $1/N$ , где  $N$  — число узлов сверхпроводящего параметра порядка, т. е. волновой функции пары, теория [35] предполагает, таким образом, существование некогерентных состояний пар в температурном интервале  $T_C < T < T^*$  и оказывается в состоянии объяснить многие свойства псевдощелевого состояния недодопированных купратов. Отметим, что при спаривании с большим суммарным импульсом при отталкивательном взаимодействии число узлов (число точек пересечения линии нулей волновой функции пары с FC),  $N \geq 8$ , и, кроме того, сама линия нулей может быть близка к участкам FC, образующим PFC. Приближение линии нулей к PFC формально означает предельный переход  $N \rightarrow \infty$ , расширяя область применимости теории [35] и одновременно увеличивая вклад бесщелевых возбуждений, возникающих у каждого из узлов и способствующих разрушению сверхпроводимости, приводя к экспоненциальному уменьшению амплитуды сверхпроводящего параметра порядка [13].

## 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Волновая функция  $\Theta(\mathbf{k})\psi(\mathbf{k})$  относительного движения пары (23) в связанном состоянии определена в области  $\Xi$  импульсного пространства с характерными размерами  $\Delta k_1$  и  $\Delta k_2$  в направлениях координатных осей  $k_1$  и  $k_2$ . Характерные размеры пары в реальном пространстве вдоль соответствующих координатных осей  $x_1$  и  $x_2$  можно оценить как  $\Delta x_1 \sim (\Delta k_1)^{-1}$  и  $\Delta x_2 \sim (\Delta k_2)^{-1}$ , а некий средний размер пары как  $\xi_0 \sim 1/\sqrt{\Xi}$ . Такие оценки могут быть сделаны как для стационарного состояния пары, так и для QSS [5]. Волновая функция связанного стационарного состояния, как это непосредственно следует из уравнения (18), не является знакопостоянной в области  $\Xi$ . Действительно, энергия связанного состояния  $E < 0$ , а следовательно, функция Грина в уравнении (18) определена отрицательна:  $G(\mathbf{k}; E) < 0$ . Поэтому функция  $\psi(\mathbf{k})$  обязательно должна менять знак на некоторой линии внутри  $\Xi$  (как следует из (23),

этой линией в случае вырожденного ядра (28) является дуга окружности), чтобы обеспечить равенство левой и правой частей уравнения (18) при  $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') > 0$ . Такие линии нулей волновой функции относительного движения существуют как в области  $\Xi^{(+)}$ , в которой возбуждается пара частиц, так и в области  $\Xi^{(-)}$ , в которой возбуждается пара дырок. Линия нулей имеется и у волновой функции относительного движения QSS с малой энергией возбуждения, поскольку в противном случае интеграл по области  $\Xi$  от произведения вещественной части функции Грина  $G(\mathbf{k}; E)$  и положительной функции  $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$  оказался бы существенно отрицательной величиной. Отметим, что сверхпроводящий параметр порядка, возникающий при спаривании с большим суммарным импульсом при отталкивательном взаимодействии [13], также имеет линию нулей, пересекающую PFC, в которую как раз и переходят найденные независимо друг от друга линии нулей в областях  $\Xi^{(-)}$  (для пар дырок) и  $\Xi^{(+)}$  (для пар частиц) при «включении» рассеяния между  $\Xi^{(-)}$  и  $\Xi^{(+)}$ .

Сверхпроводящий параметр порядка, описывающий конденсат пар с суммарным импульсом  $\mathbf{K}$ , таким образом, дважды обращается в нуль в пределах области  $\Xi_K$ . Ввиду вырождения по направлениям, кристаллографически эквивалентным направлениям вектора  $\mathbf{K}$ , параметр порядка, соответствующий бестоковому состоянию конденсата, представляется в виде линейной комбинации кристаллографически эквивалентных функций [5], каждая из которых имеет по два узла на FC. Следовательно, при тетрагональной симметрии кристалла сверхпроводящий параметр порядка, преобразующийся по тривиальному неприводимому представлению  $A_{1g}$ , не изменяет свой знак при повороте на угол  $\pi/2$ , но имеет восемь узлов на FC и может быть отнесен к расширенной  $s$ -волновой симметрии или  $(s+g)$ -симметрии [37]. Если параметр порядка преобразуется по другому одномерному неприводимому представлению  $B_{1g}$ , то он имеет двенадцать узлов на FC и формально может быть отнесен к  $d$ -волновой (или  $d+g$ ) симметрии, поскольку меняет знак при повороте на угол  $\pi/2$ .

Симметрия параметра порядка определяется взаимодействием, смешивающим состояния в областях  $\Xi_K$  определения импульсов относительного движения пар с различными кристаллографически эквивалентными суммарными импульсами. Кулоновское отталкивание (более слабое из-за большей передачи импульса по сравнению с рассеянием пар внутри каждой из областей  $\Xi_K$ ), очевидно, приводит к

симметрии  $A_{1g}$ . Взаимодействие, обусловленное антиферромагнитными флуктуациями [38], смешивает состояния, соответствующие импульсам пар, повернутых друг относительно друга на угол  $\pi/2$ , поэтому, если такое взаимодействие преобладает над кулоновским рассеянием между кристаллографически эквивалентными областями  $\Xi_K$ , то оно приводит к  $B_{1g}$ -симметрии параметра порядка. Отметим, что при уменьшении уровня допирования в купратах роль антиферромагнитных флуктуаций возрастает, что не исключает возможности изменения симметрии параметра порядка  $A_{1g} \leftrightarrow B_{1g}$  при некотором значении уровня допирования.

Зависимость вида  $\Delta = a + b\xi$  сверхпроводящего параметра порядка от кинетической энергии  $\xi(\mathbf{k})$  пары, рассмотренная в [39], довольно естественным образом связана с наблюдаемой в купратах асимметрией туннельных вольт-амперных характеристик, поэтому сам факт «наклона» сверхпроводящей щели (отношение параметров щели  $a/b \neq 0$ ) может явиться основанием [39] для отбора как взаимодействий, ответственных за сверхпроводимость, так и моделей, предназначенных для описания сверхпроводимости купратов. В этом смысле спаривание с большим суммарным импульсом при отталкивательном взаимодействии, приводящее к линии нулей [13] и, таким образом, к некоторому среднему наклону щели, совместимо с наблюдаемой асимметрией туннельных характеристик.

Энергия связанного состояния (50) экспоненциально зависит от плотности состояний  $g(0)$  относительного движения на PFC. В случае гиперболической метрики в области  $\Xi$ , возникающей в том случае, когда FC располагается в протяженной окрестности седловой точки электронного закона дисперсии, величина  $g(0)$  зависит от того, насколько близко к PFC находится логарифмическая особенность Ван Хофа плотности состояний относительного движения пары  $g(0) \equiv g(0; \zeta_s)$ , где  $\zeta_s$  — энергия логарифмической сингулярности, отсчитанная от PFC (рис. 2б). Поэтому можно утверждать [40], что близость FC к седловой точке является причиной увеличения плотности состояний на PFC,  $g(0; \zeta_s) \propto g(0) \ln \zeta_0 / \zeta_s$ , и соответствующего увеличения энергии связанного состояния (50). Заметим, что в случае предельно сильной анизотропии эффективных масс логарифмическая сингулярность вырождается в корневую,  $g(0; \zeta_s) \propto E_s^{-1/2}$  [14]. Близость FC к седловой точке является причиной возрастания также энергии и затухания QSS, как это видно из (57).

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования России (грант Е02-3.4-147), Федеральной целевой программы «Интеграция» (проект Б0049), РФФИ (грант 02-02-17133) и Федеральной целевой научно-технической программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития науки и техники» (государственные контракты №№ 40.072.1.1.1173, 40.012.1.1.1357).

## ЛИТЕРАТУРА

1. L. N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
2. J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
3. P. Fulde and R. A. Ferrel, Phys. Rev. **135**, A 550 (1964).
4. А. И. Ларкин, Ю. Н. Овчинников, ЖЭТФ **47**, 1136 (1964).
5. В. И. Белявский, В. В. Капаев, Ю. В. Копаев, ЖЭТФ **118**, 941 (2000).
6. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, ГИФМЛ, Москва (1962).
7. P. W. Anderson, Science **256**, 1526 (1992).
8. J. Orenstein and A. J. Millis, Science **288**, 468 (2000).
9. Z.-X. Shen, W. E. Spicer, D. M. King, D. S. Dessau, and B. O. Wells, Science **267**, 343 (1995).
10. В. И. Белявский, Ю. В. Копаев, ЖЭТФ **121**, 175 (2002).
11. V. I. Belyavsky and Yu. V. Kopaev, Phys. Rev. B **67**, 024513 (2003).
12. В. И. Белявский, В. В. Капаев, Ю. В. Копаев, Письма в ЖЭТФ **76**, 51 (2002).
13. В. И. Белявский, Ю. В. Копаев, В. М. Софронов, С. В. Шевцов, ЖЭТФ **124**, 1149 (2003).
14. А. А. Абрикосов, Physica C **341–348**, 97 (2000).
15. Е. Г. Максимов, УФН **170**, 1033 (2000).
16. H. Aoki, E-print archives, cond-mat/0305490.
17. P. W. Anderson, Science **237**, 1196 (1987).
18. G. I. Japaridze, A. P. Kampf, M. Sekania, P. Kakashvili, and Ph. Brune, Phys. Rev. B **65**, 014518 (2001).

19. J. C. Campuzano, M. R. Norman, and M. Randeria, in *Physics of Conventional and Unconventional Superconductors*, ed. by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, Springer-Verlag (2002).
20. A. Damascelli, Z. Hussain, and Z.-X. Chen, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003).
21. Д. Пайнс, Ф. Нозьер, *Теория квантовых жидкостей*, Мир, Москва (1967).
22. А. Б. Васильева, Н. А. Тихонов, *Интегральные уравнения*, Наука, Москва (2002).
23. Г. М. Фихтенгольц, *Курс дифференциального и интегрального исчисления*, т. 2, Физматгиз, Москва (1962).
24. А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, Наука, Москва (1987).
25. Дж. Шриффер, *Теория сверхпроводимости*, Наука, Москва (1970).
26. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
27. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, часть 2, Наука, Москва (2001).
28. V. J. Emery and S. A. Kivelson, *Nature* **374**, 434 (1995); *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3253 (1995).
29. L. B. Ioffe and A. J. Millis, *Science* **285**, 1241 (1999).
30. M. Franz and Z. Tešanović, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 257003 (2001).
31. J. B. Marston and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **43**, 11538 (1989); **61**, 14773 (2000).
32. S. Chakravarty, R. B. Laughlin, D. K. Morr, and C. Nayak, *Phys. Rev. B* **63**, 094503 (2001).
33. D. A. Ivanov, P. A. Lee, and X.-G. Wen, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3958 (2000).
34. S. Chakravarty, *Phys. Rev. B* **66**, 224505 (2002).
35. M. Franz, Z. Tešanović, and O. Vafek, *Phys. Rev. B* **66**, 054535 (2002).
36. L. Balents, M. P. A. Fisher, and C. Nayak, *Phys. Rev. B* **60**, 1654 (1999).
37. B. H. Brandow, *Phys. Rev. B* **65**, 054503 (2002).
38. P. Monthoux, A. V. Balatsky, and D. Pines, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3448 (1991).
39. J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **59**, 11962 (1999).
40. В. И. Белявский, Ю. В. Копаев, *Письма в ЖЭТФ* **72**, 734 (2000).