

# СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В СИСТЕМЕ $p$ - $d$ -ЭЛЕКТРОНОВ

*Р. О. Зайцев\**

*Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 15 ноября 2004 г.

Изучается электронная структура соединений при учете энергии Хаббарда как наибольшего энергетического параметра. Получены условия возникновения куперовской неустойчивости. Определена фазовая диаграмма существования сверхпроводящего состояния в зависимости от степени заполнения  $d$ - и  $p$ -оболочек переходного и непереходного элементов.

PACS: 74.20.-z, 71.10.Fd, 74.25.Dw

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Классическая модель Хаббарда, в которой учитывается прямой перескок между ближайшими катионами  $t$ - или  $e$ -оболочки переходного элемента, позволяет правильно описать электронные свойства сверхпроводников типа  $\text{Ln}_{2-x}\text{M}_x^{3+}\text{CuO}_4$  [1, 2]. Здесь при возрастании концентрации  $x$  четырехвалентного катиона  $\text{M}^{4+}$  происходит заполнение верхней половины подзоны Хаббарда, отвечающей коллективизации  $(x^2 - y^2)$ -состояний меди. При этом  $2p^6$ -оболочка кислорода остается полностью заполненной, что соответствует предположению о большой энергии дырочных  $p$ -возбуждений по сравнению с энергией дырочных состояний в  $3d^{10}$ -оболочке  $\text{Cu}^+$ .

Для других соединений, таких как  $\text{Ln}_{2-x}\text{M}_x^{3+}\text{CuO}_4$ ,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  и  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ , следует отказаться от предположения о полном заполнении  $p$ -оболочки анионов  $\text{O}^{2-}$  и явно учесть перескок между кислородными анионами и медными катионами [3, 4]. Энергетический сдвиг кислородных дырочных состояний с энергией  $\epsilon_p$  относительно катионных с энергией  $\epsilon_d$  считается заданным:  $r = \epsilon_p - \epsilon_d$ , так что классической модели Хаббарда соответствует  $r \gg U$ . Реальной ситуации отвечает обратный предел, когда энергия Хаббарда  $U$  оказывается больше или порядка энергетического сдвига  $r$ . В настоящей работе метод  $X$ -операторов используется в так называемой  $p$ - $d$ -модели. Основное

предположение при выборе гамильтониана состоит в том, что энергия Хаббарда в зависимости от главного квантового числа  $n$  может быть оценена по формуле  $U(n) \approx U(1)/n$ , где  $U(1)$  — энергия Хаббарда  $s$ -электронов равная 17 эВ. Поэтому для  $2p$ -электронов кислорода и для  $3d$ -электронов меди имеем соответственно 8.5 эВ и 5.67 эВ.

Согласно этим оценкам следует считать, что как для  $d$ -, так и для  $p$ -электронов энергия Хаббарда велика по сравнению с энергией перескока  $t_{pd}$ . По этой причине правильный выбор нулевого приближения и переход к  $X$ -операторам позволяет получить амплитуду рассеяния порядка  $t_{pd}(\mathbf{p})$  как в случае  $(d-d)$ -, так и в случае  $(p-p)$ -рассеяния. Этот же метод позволяет записать уравнение состояния, т. е. установить связь между химическим потенциалом, параметром  $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d$  и числом дырок на  $2p^6$ - и  $3d^{10}$ -оболочках кислорода и меди.

Что же касается величины  $U_{pd}$ , т. е. кулоновской энергии взаимодействия электронов, относящихся к соседним катионам меди и анионам кислорода, то эти матричные элементы предполагаются малыми и вместе с энергией взаимодействия электронов ( $V_{dd}$  и  $V_{pp}$ ), принадлежащих к соседним атомам, в статье вообще не рассматриваются.

При этом параметр Эмери  $r = \epsilon_p - \epsilon_d$  считается произвольным. Дело в том, что он содержит вклад кристаллического поля, обусловленного разностью потенциалов в местах нахождения катионов меди и анионов кислорода, который из-за эффектов экранирования до настоящего времени не поддавался каким-либо разумным оценкам.

\*E-mail: zaitsev@mbslab.kiae.ru

В такой постановке наша задача — построить фазовую диаграмму в зависимости от двух параметров:  $r = \epsilon_p - \epsilon_d$  и химического потенциала  $\mu = -(\epsilon_p - \epsilon_d)/2$ . Уравнения состояния позволяют отобразить полученную фазовую диаграмму в переменных  $h_p, h_d$ .

Эксперименты по изучению сопротивления в соединениях  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  и  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_2\text{O}_2^{2-}$  обнаруживают квадратичную температурную зависимость [5], что указывает на слабость электрон-фононного взаимодействия. Характерное значение энергии, которая определяет температуру перехода по формуле БКШ для соединения  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ , имеет тот же порядок, что и у известного соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Me}_x^{3+}\text{CuO}_4$ , допированного двухвалентными катионами Ba, Sr или Hg. Эти факты указывают на то, что электрон-электронное взаимодействие играет ключевую роль, величина которого существенно превышает ширину заполняющейся  $e_g$ -оболочки Cu.

В соединении  $\text{SrRuO}_4$  энергия Хаббарда  $4d$ -электронов рутения оказывается меньше, чем энергия Хаббарда  $3d$ -электронов меди, однако она по-прежнему превышает ширину недозаполненной  $t_{xy}$ -оболочки.

Число дырок на  $2p^6$ -оболочке кислорода ( $h_p$ ), лежащих в плоскости  $\text{CuO}_2$ -слоя, связано с числом дырок на  $3d^{10}$ -оболочке катионов Cu через условие электронейтральности:

$$2h_p + h_d = 1 - x \quad \text{в случае } \text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4, \quad (1a)$$

$$2h_p + h_d = 1 + x \quad \text{в случае } \text{La}_{2-x}\text{Me}_x^{2+}\text{CuO}_4. \quad (1b)$$

Энергия  $4s$ -состояний больше, чем энергия  $3d$ -состояний. Соответственно этому  $0 < h_d < 2$ , и мы должны следить за степенью недозаполнения  $p_{x,y}$ -оболочек кислорода, лежащих в плоскости  $\text{CuO}_2$ , принимая во внимание их двукратное вырождение и замечая, что энергия Хаббарда значительно больше, чем энергия Ферми.

Аналогичная ситуация имеет место в соединении  $\text{Sr}_2^{2+}\text{RuO}_4$ , где вырожденные  $4t_{zx}$ - и  $4t_{yz}$ -оболочки оказываются заполненными, в то время как  $4t_{xy}$ -оболочка заполняется в меру существования дырок на  $2p^6$ -оболочках кислородных анионов, лежащих в плоскости  $\text{RuO}_2$ . Учитывая условия электронейтральности, можно записать связь между числом дырок  $h_t$  на  $t_{xy}$ -оболочке катионов рутения и числом дырок  $h_p$  на кислородных анионах:

$$2h_p + h_t = 2 \quad \text{в случае } \text{Sr}_2\text{RuO}_4. \quad (1в)$$

Кристаллическая структура  $\text{Sr}_2^{2+}\text{RuO}_4$  не отличается от структуры  $\text{La}_2^{3+}\text{CuO}_4$ , так что фазовая диаграмма этих соединений оказывается одинаковой. Основное различие определяется различным расположением линий электронейтральности (1б) и (1в).

## 2. ГАМИЛЬТониАН И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для простоты предполагаем, что эта энергия является бесконечной по сравнению с интегралами перескока  $t^{ik}(r)$ ,  $t^i(r)$  и  $\tau(r)$ , которые входят в определение гамильтониана:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{i,j,\mathbf{r},\mathbf{r}',\sigma;\mathbf{r}\neq\mathbf{r}'} \hat{p}_{i\mathbf{r}\sigma}^+ \hat{p}_{j\mathbf{r}'\sigma} t^{(ij)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \\ & + \sum_{i,\mathbf{r},\mathbf{r}',\sigma} \left[ \hat{a}_{\mathbf{r}\sigma}^+ \hat{p}_{i\mathbf{r}'\sigma} t^{(i)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \text{h.c.} \right] + \\ & + \sum_{\mathbf{r},\mathbf{r}',\sigma;\mathbf{r}\neq\mathbf{r}'} \hat{a}_{\mathbf{r}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{r}'\sigma} \tau(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \\ & + \epsilon_p \sum_{i,\mathbf{r},\sigma} \hat{p}_{i\mathbf{r}\sigma}^+ \hat{p}_{i\mathbf{r}\sigma} + \epsilon_d \sum_{i,\mathbf{r},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{r}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{r}\sigma}. \quad (2) \end{aligned}$$

Здесь  $i, j$  — векторные индексы, соответствующие  $t_{1u}$ -состояниям,  $\epsilon_p$  и  $\epsilon_d$  — энергии однодырочных  $p$ - и  $d$ -состояний.

Если средние числа заполнения  $h_p$  и  $h_d$  меньше единицы, то достаточно рассмотреть переходы между полностью заполненным и четырьмя возможными однодырочными состояниями. Соответственно этому выразим операторы рождения и уничтожения через  $X$ -операторы, отвечающие переходам между полностью заполненными и однодырочными состояниями:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{r}\sigma}^+ &= \hat{X}^{\sigma,0}, \quad \hat{a}_{\mathbf{r}\sigma} = \hat{X}^{0,\sigma}, \\ \hat{p}_{k\mathbf{r}\sigma}^+ &= \hat{X}_{\mathbf{r}}^{k\sigma,0}, \quad \hat{p}_{k\mathbf{r}\sigma} = \hat{X}_{\mathbf{r}}^{0,k\sigma}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $k = x, y$ , а индексы  $(k\sigma, 0)$  и  $(0, k\sigma)$  обозначают переходы между полностью заполненной оболочкой  $2p^6$  и однодырочными  $|p_{x,y;\sigma}\rangle$ -состояниями (и наоборот).

Для области  $1 < h_d < 2$  необходимо рассмотреть переходы между двумя однодырочными  $(x^2 - y^2)$ -состояниями и двухдырочным состоянием с нулевым суммарным спином.

Как впервые заметил Эмери [3], основную роль в формировании спектра элементарных возбуждений  $\text{CuO}_2$ -комплекса имеют матричные элементы  $w$  перескока между кислородом и медью. При этом матричные элементы, пропорциональные  $w_p$  и  $w_d$ , меньше и имеют весьма сложную угловую зависимость

от квазиимпульса. По этой последней причине в целях упрощения будем предполагать, что диагональные  $p$ - $p$ - и  $d$ - $d$ -матричные элементы пропорциональны одной и той же безразмерной функции  $t_{\mathbf{p}}$ .

С учетом этих упрощений запишем обратную одночастичную функцию Грина, которая в нульпетлевом приближении самосогласованного поля («Хаббард I») и при  $U_p, U_d = +\infty$  имеет следующий вид:

$$G_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} (0, \sigma) \\ (ax) \\ (by) \\ (ay) \\ (bx) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \Omega_d(\mathbf{p}) & -fdw\tau_x(\mathbf{p}) & -fdw\tau_y(\mathbf{p}) & 0 & 0 \\ -f_p w \tau_x^*(\mathbf{p}) & \Omega_p(\mathbf{p}) & 0 & 0 & 0 \\ -f_p w \tau_y^*(\mathbf{p}) & 0 & \Omega_p(\mathbf{p}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Omega_p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_p \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Здесь введены удобные обозначения:

$$\omega_n = (2n + 1)\pi T,$$

$$\begin{aligned} \Omega_p &= i\omega - \epsilon_p, & \Omega_d(\mathbf{p}) &= i\omega - wdft_{\mathbf{p}} - \epsilon_d, \\ \Omega_p(\mathbf{p}) &= i\omega - w_p f_p t_{\mathbf{p}} - \epsilon_p. \end{aligned} \quad (5)$$

Сумма  $\epsilon_p + \tau_p f_p t_{\mathbf{p}}$  состоит из двух анизотропных ветвей  $p_{x,y}$  вырожденных состояний. Две другие ветви не коллективизируются и имеют энергию  $\epsilon_p$ .

Для бесконечной энергии Хаббарда концевые множители  $f_p$  и  $f_d$  являются линейными функциями  $h_{p,d}$  [6]. На краях каждого целочисленного интервала  $k < h_{p,d}^{(k)} < k + 1$  они оказываются равными обратной степени вырождения низшего  $k$ -дырочного или  $(k + 1)$ -дырочного состояния:

$$\begin{aligned} f_d^{(0)} &= 1 - \frac{h_d}{2}, & 0 < n_d < 1; \\ f_p &= 1 - \frac{3}{4}h_p, & 0 < n_p < 1; \\ f_d^{(1)} &= \frac{h_d}{2}, & 1 < h_d < 2; \\ f_p^{(1)} &= \frac{h_p + 2}{12}, & 1 < h_p < 2. \end{aligned} \quad (6)$$

Ниже мы ограничимся рассмотрением области  $0 < h_d < 2, 0 < h_p < 1$ .

### 3. УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

Наряду с двумя не коллективизированными  $p_{x,y}$ -ветвями, которые имеют одинаковые энергии

$E^{(1,2)} = \epsilon_p$ , полюсы одночастичной функции Грина (4) определяют еще три ветви:

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{p}}^{(3)} &= \xi_{\mathbf{p}}^{(p)} = w_p f_p t_{\mathbf{p}} + \epsilon_p, & \xi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} &= \frac{\xi_{\mathbf{p}}^{(p)} + \xi_{\mathbf{p}}^{(d)}}{2} \pm \\ & \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\xi_{\mathbf{p}}^{(p)} - \xi_{\mathbf{p}}^{(d)}\right)^2 + 4w^2 f_p f_d |\tau_{\mathbf{p}}|^2}, \end{aligned}$$

где  $|\tau_{\mathbf{p}}|^2 = |\tau_x(\mathbf{p})|^2 + |\tau_y(\mathbf{p})|^2$ . (7)

Используя однопетлевое приближение, находим соотношение между химическим потенциалом  $\mu = -(\epsilon_d + \epsilon_p)/2$ , температурой и средними числами частиц, приходящихся на одну элементарную ячейку. С учетом кратности вырождения по спиновым и кристаллическим индексам имеем суммы от диагональных матричных элементов одночастичной функции Грина:

$$\begin{aligned} h_d &= 2fdT \sum_{\omega, \mathbf{p}} G_{\omega}^{d,d}(\mathbf{p}) \exp(i\delta\omega), \\ h_p &= f_p T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \left\{ G_{xx} + G_{yy} + \frac{2}{i\omega - \epsilon_p} \right\} \exp(i\delta\omega). \end{aligned} \quad (8)$$

Причина исчезновения двойки перед суммой по  $p$ -электронным состояниям двухатомной молекулы  $\text{CuO}_2$  связана с тем, что  $h_p$  есть среднее число  $p$ -электронов, приходящихся на один анион кислорода, а не на всю элементарную ячейку.

Используя явное выражение для обратной функции Грина (4), находим

$$\begin{aligned} G_{dd} &= \sum_{\lambda=\pm} A_{\mathbf{p}}^{(-\lambda)} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}}, \\ G_{xx} = G_{yy} &= \frac{1}{2(i\omega_n - \xi_{\mathbf{p}}^{(p)})} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda=\pm} A_{\mathbf{p}}^{(\lambda)} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}}, \\ A_{\mathbf{p}}^{\pm} &= \frac{1}{2} \left[ 1 \pm \frac{\xi_{\mathbf{p}}^{(p)} - \xi_{\mathbf{p}}^{(d)}}{\sqrt{\left(\xi_{\mathbf{p}}^{(p)} - \xi_{\mathbf{p}}^{(d)}\right)^2 + 4w^2 f_p f_d |\tau_{\mathbf{p}}|^2}} \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

В результате подстановки и суммирования по  $i\omega_n$  получаем уравнения состояния, выраженные через суммы от функций Ферми  $n_F(\epsilon)$ .

Для  $d$ -дырочных состояний необходимо рассмотреть две области:

$$\begin{aligned} h_d &= 2fd \sum_{\mathbf{p}, \lambda=\pm} A_{\mathbf{p}}^{(-\lambda)} n_F\left(\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}\right) \\ & \text{при } 0 < h_d < 1, \quad f_d = 1 - \frac{h_d}{2}, \\ h_d &= 1 + f_d \sum_{\mathbf{p}, \lambda=\pm} A_{\mathbf{p}}^{(-\lambda)} n_F\left(\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}\right) \\ & \text{при } 1 < h_d < 2, \quad f_d = \frac{h_d}{2}. \end{aligned} \quad (10a)$$

Для  $p$ -дырочных состояний достаточно рассмотреть область  $0 < h_p < 1$ , для которой имеем  $f_p = 1 - 3h_p/4$ ,

$$h_p = f_p \left\{ 2n_F(\epsilon_p) + \sum_{\mathbf{p}} \left[ n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{(p)}) + \sum_{\lambda=\pm} A_{\mathbf{p}}^{(\lambda)} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}) \right] \right\}. \quad (106)$$

С учетом квадратной симметрии все интегралы перескока выражаются через единственную функцию квазиимпульсов  $\epsilon(\mathbf{p})$ :

$$\xi_{\mathbf{p}}^{(p)} = w_p \epsilon(\mathbf{p}), \quad \xi_{\mathbf{p}}^{(d)} = w_d \epsilon(\mathbf{p}),$$

$$w^2 |\tau_{\mathbf{p}}|^2 = w^2 (1 - \epsilon(\mathbf{p})).$$

Для этой функции можно задать затравочную функцию плотности состояний

$$\rho_0(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon - \epsilon(\mathbf{p})),$$

после чего уравнения состояний представляются в виде однократных интегралов.

Классической модели Эмери соответствует приближение  $w \gg w_p \sim w_d$ , однако более реалистичная ситуация отвечает неравенствам  $w \sim w_p \gg w_d$ .

#### 4. КРИТЕРИЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

При бесконечной энергии Хаббарда взаимодействие  $s$ - и  $t$ -возбуждений проявляется в рассеянии и сильной зависимости амплитуды рассеяния от положения уровня Ферми. Мы находим куперовскую неустойчивость из условия появления сингулярности у двухчастичной функции Грина [7]. В лестничном приближении проблема сводится к нахождению условий неисчезающих решений в соответствующей однородной системе уравнений. При нулевых суммарном импульсе, суммарной проекции спина и энергии в нашей задаче эта система имеет следующий вид:

$$\Gamma_{\alpha\bar{\alpha};\nu\bar{\nu}}(\mathbf{p}) = g_{\alpha\bar{\alpha};\nu\bar{\nu}}(\mathbf{p}) - \sum_{\mathbf{p}',\beta,\bar{\beta}} g_{\alpha\bar{\alpha};\beta\bar{\beta}}(\mathbf{p}') K_{\beta,\bar{\beta}}^{\gamma,\bar{\gamma}}(\mathbf{p}') \Gamma_{\gamma\bar{\gamma};\nu\bar{\nu}}(\mathbf{p}'), \quad (11)$$

где

$$K_{\beta,\bar{\beta}}^{\gamma,\bar{\gamma}}(\mathbf{p}') = T \sum_{\omega} G_{-\omega}^{\beta\gamma}(-\mathbf{p}') G_{\omega}^{\bar{\beta}\bar{\gamma}}(\mathbf{p}').$$

Индексы  $\alpha$  и  $\bar{\alpha}$  относятся к переходам с противоположными знаками изменения проекции спина. Компоненты гриновской функции  $G_{\omega}^{\alpha\beta}(\mathbf{p})$  определяются через обратную матрицу (4). Согласно Дайсону [8], амплитуда рассеяния  $g_{\alpha\bar{\alpha};\beta\bar{\beta}}$  определяется двойным коммутатором:  $\{\hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha} [\hat{X}_{\mathbf{r}}^{\bar{\alpha}} \hat{H}]\}$ . В конечном счете он выражается через структурные постоянные  $N_{\alpha,\beta}^{\pm}$  соответствующей супералгебры [1, 2]:

$$[\hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha}, \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{\beta}]_{\pm} = N_{\alpha,\beta}^{\pm} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha+\beta} \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}. \quad (12)$$

В нашем случае гамильтониан (2) представляется в виде суммы произведений ферми-операторов, относящихся к разным ячейкам:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{r},\mathbf{r}';\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \left( t(\mathbf{r},\mathbf{r}')^{\nu,\beta} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\nu} \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{\beta} + t(\mathbf{r},\mathbf{r}')^{\bar{\nu},\bar{\beta}} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\bar{\nu}} \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{\bar{\beta}} \right). \quad (13)$$

Здесь индексы с чертой (например,  $\bar{\alpha}$ ) обозначают переходы с измененным знаком проекции спина (по отношению к  $\alpha$ ).

Непосредственное вычисление приводит к следующим равенствам:

$$[\hat{X}_{\mathbf{r}}^{\bar{\alpha}}, \hat{H}] = \sum_{\mathbf{r}',\nu,\beta;\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} N_{\alpha,\nu}^{+} t(\mathbf{r},\mathbf{r}')^{\nu,\beta} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\bar{\alpha}+\nu} \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{\beta} + \sum_{\mathbf{r}',\bar{\nu},\bar{\beta};\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} N_{\alpha,\bar{\nu}}^{+} t(\mathbf{r},\mathbf{r}')^{\bar{\nu},\bar{\beta}} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\bar{\alpha}+\bar{\nu}} \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{\bar{\beta}}. \quad (14)$$

$$\{\hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha} [\hat{X}_{\mathbf{r}}^{\bar{\alpha}}, \hat{H}]\} = \sum_{\mathbf{r}',\nu,\beta;\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} N_{\alpha,\bar{\alpha}+\nu}^{-} N_{\alpha,\nu}^{+} t(\mathbf{r},\mathbf{r}')^{\nu,\beta} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha+\bar{\alpha}+\nu} \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{\beta} + \sum_{\mathbf{r}',\bar{\nu},\bar{\beta};\mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} N_{\alpha,\bar{\alpha}+\bar{\nu}}^{-} N_{\alpha,\bar{\nu}}^{+} t(\mathbf{r},\mathbf{r}')^{\bar{\nu},\bar{\beta}} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha+\bar{\alpha}+\bar{\nu}} \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{\bar{\beta}}. \quad (15)$$

В нашем случае, когда мы изучаем переходы между состояниями с полностью заполненными оболочками и однодырочными состояниями, можно без труда провести вычисление двойных коммутаторов. На рис. 1 дано графическое представление борновских амплитуд.

В случае  $(d-d)$ -рассеяния с помощью гамильтониана (2) находим

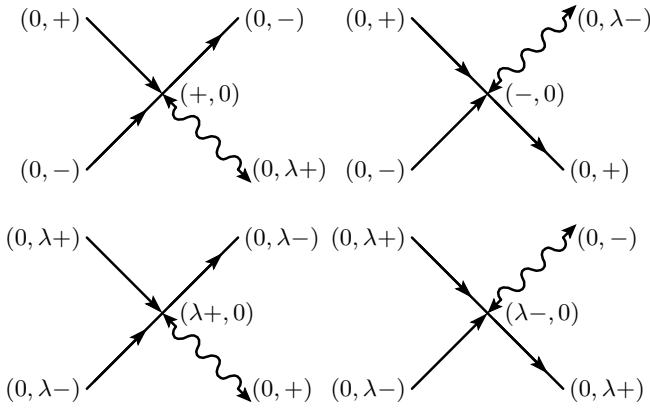


Рис. 1. Борновские амплитуды кинематического взаимодействия при  $n_d < 1$ ; для верхней подзоны Хаббарда ( $n_d > 1$ ) следует провести замену  $(0, \sigma) \rightarrow (-\sigma, 2)$

$$\begin{aligned} & \left[ \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0,-\sigma)} \left\{ \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0,\sigma)}, \hat{H} \right\} \right] = \\ & = - \sum_{i, \mathbf{r}'} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0,\sigma)} \hat{p}_{i\mathbf{r}'-\sigma} t^{(i)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - \\ & - \sum_{i, \mathbf{r}'} \hat{p}_{i\mathbf{r}'\sigma} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0,-\sigma)} t^{(i)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - \\ & - \sum_{\mathbf{r}'; \mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0,\sigma)} \hat{a}_{\mathbf{r}'-\sigma} \tau(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - \\ & - \sum_{\mathbf{r}'; \mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{r}'\sigma} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0,-\sigma)} \tau(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \quad (16) \end{aligned}$$

В случае  $(p-p)$ -рассеяния

$$\begin{aligned} & \left[ \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0;i,-\sigma)} \left\{ \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0;i,\sigma)}, \hat{H} \right\} \right] = \\ & = - \sum_{\mathbf{r}'} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0;i,\sigma)} \hat{p}_{i\mathbf{r}'-\sigma} t^{(i)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - \\ & - \sum_{\mathbf{r}'} \hat{p}_{i\mathbf{r}'\sigma} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0;i-\sigma)} t^{(i)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - \\ & - \sum_{j, \mathbf{r}', \sigma; \mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0;i,\sigma)} \hat{p}_{j\mathbf{r}'-\sigma} t^{(ij)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - \\ & - \sum_{j, \mathbf{r}', \sigma; \mathbf{r}' \neq \mathbf{r}} \hat{p}_{j\mathbf{r}'\sigma} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0;i,-\sigma)} t^{(ij)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \quad (17) \end{aligned}$$

После перехода к компонентам Фурье и к системе центра инерции оказывается, что амплитуды рассеяния зависят только от импульса рассеянных частиц и только множителями отличаются от интегралов перескока  $t^{\alpha,\beta}(\mathbf{p})$ :

$$\begin{aligned} g_{\alpha,\alpha;\gamma\nu}(\mathbf{p}; \mathbf{p}') & = -\delta_{\alpha,\gamma} \{t^{\alpha,\nu}(\mathbf{p}') + t^{\alpha,\nu}(-\mathbf{p}')\} - \\ & - \delta_{\alpha,\nu} \{t^{\alpha,\gamma}(\mathbf{p}') + t^{\alpha,\gamma}(-\mathbf{p}')\}. \quad (18) \end{aligned}$$

Индексы  $\alpha, \gamma, \nu$  — номера одночастичных переходов  $(d, x, y)$ .

Дальнейшие упрощения ядра интегрального уравнения (11) связаны с возможностью провести суммирование по внутренним индексам  $\beta$  и  $\bar{\beta}$ . Для достижения этой цели запишем уравнение Дайсона, которое уже было использовано для нахождения обратной функции Грина (10). В однопетлевом приближении («Хаббард I») имеем

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} f_{\nu} t^{\nu,\beta}(\mathbf{p}) G_{\omega}^{\beta,\gamma}(\mathbf{p}) & = \\ & = \delta_{\nu,\gamma} - \left[ \left( \hat{G}_{\omega}^{(0)} \right)^{-1} \hat{G}_{\omega}(\mathbf{p}) \right]_{\gamma}^{\nu}; \quad (19a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{\bar{\nu}} f_{\bar{\lambda}} t^{\bar{\lambda},\bar{\nu}}(-\mathbf{p}) G_{-\omega}^{\bar{\nu},\bar{\gamma}}(-\mathbf{p}) & = \\ & = \delta_{\bar{\lambda},\bar{\gamma}} - \left[ \left( \hat{G}_{-\omega}^{(0)} \right)^{-1} \hat{G}_{-\omega}(-\mathbf{p}) \right]_{\bar{\gamma}}^{\bar{\lambda}}. \quad (19б) \end{aligned}$$

Умножим соотношение (16) на  $[G_{-\omega}(-\mathbf{p})]_{\bar{\gamma}}^{\bar{\beta}}$ , а соотношение (17) — на  $[G_{\omega}(\mathbf{p})]_{\gamma}^{\beta}$ , тогда получим возможность исключить суммы по номерам переходов, содержащие интегралы перескока  $t^{\nu,\beta}(\mathbf{p})$  и  $t^{-\bar{\lambda},\bar{\nu}}(-\mathbf{p})$ .

Исключив эти суммы, а также пренебрегая нелогарифмическими слагаемыми, содержащими первые степени гриновских функций, получим следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\bar{\alpha};\nu\bar{\nu}}(\mathbf{p}) & = g_{\alpha\bar{\alpha};\nu\bar{\nu}}(\mathbf{p}) + \\ & + T \sum_{\omega, \mathbf{p}', \beta, \bar{\beta}} \left\{ \frac{1}{f_{\alpha}} \left[ \left( \hat{G}_{\omega}^{(0)} \right)^{-1} \hat{G}_{\omega}(\mathbf{p}) \right]_{\gamma}^{\alpha} \left[ \hat{G}_{-\omega}(-\mathbf{p}) \right]_{\bar{\gamma}}^{\bar{\alpha}} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{f_{\bar{\alpha}}} \left[ \left( \hat{G}_{-\omega}^{(0)} \right)^{-1} \hat{G}_{-\omega}(-\mathbf{p}) \right]_{\bar{\gamma}}^{\bar{\alpha}} \left[ \hat{G}_{\omega}(\mathbf{p}) \right]_{\gamma}^{\alpha} \right\} \times \\ & \times \Gamma_{\gamma\bar{\gamma};\nu\bar{\nu}}(\mathbf{p}'). \quad (20) \end{aligned}$$

Для определения условий возникновения куперовской неустойчивости достаточно рассмотреть систему однородных уравнений, которые соответствуют неоднородной системе (20):

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\bar{\alpha}} & = \\ & = T \sum_{\omega, \mathbf{p}', \gamma, \bar{\gamma}} \left\{ \frac{1}{f_{\alpha}} \left[ \left( \hat{G}_{\omega}^{(0)} \right)^{-1} \hat{G}_{\omega}(\mathbf{p}) \right]_{\gamma}^{\alpha} \left[ \hat{G}_{-\omega}(-\mathbf{p}) \right]_{\bar{\gamma}}^{\bar{\alpha}} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{f_{\bar{\alpha}}} \left[ \left( \hat{G}_{-\omega}^{(0)} \right)^{-1} \hat{G}_{-\omega}(-\mathbf{p}) \right]_{\bar{\gamma}}^{\bar{\alpha}} \left[ \hat{G}_{\omega}(\mathbf{p}) \right]_{\gamma}^{\alpha} \right\} \Gamma_{\gamma\bar{\gamma}}. \quad (21) \end{aligned}$$

В отсутствие магнитного поля все матричные элементы не зависят от значения проекции спина. Обратная нулевая функция Грина имеет только диагональные матричные элементы  $\left[ \left( \hat{G}_{-\omega}^{(0)} \right)^{-1} \right]_{\alpha}^{\alpha} = i\omega - \epsilon_{\alpha}$ , так что в рамках используемого логарифмического приближения задача определения температуры сверхпроводящего перехода сводится к написанию условия разрешимости однородной системы алгебраических уравнений:

$$\Gamma_{\alpha} = -2 \frac{\epsilon_{\alpha}}{f_{\alpha}} T \sum_{\omega, \mathbf{p}, \gamma} \left[ \hat{G}_{\omega}(\mathbf{p}) \right]_{\gamma}^{\alpha} \left[ \hat{G}_{-\omega}(-\mathbf{p}) \right]_{\gamma}^{\alpha} \Gamma_{\gamma}. \quad (22)$$

Таким образом, задача вычисления температуры сверхпроводящего перехода сводится к нахождению условия разрешимости системы алгебраических уравнений (22).

Ядро этого уравнения имеет сильное вырождение по индексам  $\alpha, \gamma$ . Непосредственные вычисления показывают, что из окончательного условия разрешимости исчезают все произведения недиагональных миноров матрицы оператора правой части уравнения (22). Что же касается диагональных составляющих, то условие разрешимости выражается через простейшую сумму диагональных компонент:

$$1 = -2 \sum_{\alpha} \frac{\epsilon_{\alpha}}{f_{\alpha}} T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \left[ \hat{G}_{\omega}(\mathbf{p}) \right]_{\alpha}^{\alpha} \left[ \hat{G}_{-\omega}(-\mathbf{p}) \right]_{\alpha}^{\alpha}. \quad (23)$$

Диагональные компоненты одночастичных функций Грина удобно выразить через нормальные координаты и собственные значения соответствующей обратной матрицы:

$$\left[ \hat{G}_{\omega}(\mathbf{p}) \right]_k^k = \sum_{\lambda} \frac{A_k^{(\lambda)}(\mathbf{p})}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}}, \quad \xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)} = \epsilon_{\mathbf{p}}^{\lambda} - \mu, \quad (24)$$

где  $\epsilon_{\mathbf{p}}^{\lambda}$  — собственные значения обратной матрицы (4).

При подстановке этого разложения в (23) следует заметить, что с принятой логарифмической точностью следует отбросить слагаемые с различными номерами полюсных слагаемых:

$$\begin{aligned} 1 &= -2 \sum_{k\lambda} \frac{\epsilon_k}{f_k} T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \frac{A_k^{(\lambda)}(\mathbf{p}) A_k^{(\lambda)}(-\mathbf{p})}{\omega_n^2 + (\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)})^2} = \\ &= - \sum_{k\lambda} \frac{\epsilon_k}{f_k} \sum_{\mathbf{p}} \frac{A_k^{(\lambda)}(\mathbf{p}) A_k^{(\lambda)}(-\mathbf{p})}{\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}} \operatorname{th} \left( \frac{\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}}{2T_c} \right). \quad (25) \end{aligned}$$

Таким образом, при заданном номере энергетической полосы имеется совокупность сингулярных слагаемых, которые определяют температуру сверхпроводящего перехода. Иными словами, в области

металлической проводимости при заданном значении химического потенциала существует фиксированный номер  $\lambda$ , для которого условие  $\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)} = 0$  определяет поверхность Ферми.

Выделяя такие слагаемые, можно переписать условие куперовской неустойчивости для заданного номера энергетической полосы  $\lambda$ :

$$1 = - \sum_k \frac{\epsilon_k}{f_k} \sum_{\mathbf{p}} \frac{A_k^{(\lambda)}(\mathbf{p}) A_k^{(\lambda)}(-\mathbf{p})}{\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}} \operatorname{th} \left( \frac{\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}}{2T_c} \right). \quad (26)$$

Это соотношение может быть записано в классической форме БКШ:  $T_c = \bar{\epsilon} \exp(-1/\Lambda)$ , где

$$\Lambda = -2 \sum_k \frac{\epsilon_k}{f_k} \sum_{\mathbf{p}} A_k^{(\lambda)}(\mathbf{p}) A_k^{(\lambda)}(-\mathbf{p}) \delta(\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)}). \quad (27)$$

В нашем простейшем случае, когда заполняется нижняя хаббардовская подзона  $h_d < 1$ , нормальные координаты и собственные функции определяются с помощью соотношений (9). В результате при заданном  $\lambda$  находим константу БКШ и условие существования сверхпроводимости при  $T = 0$ :  $\Lambda_{(\lambda)} > 0$ , где

$$\begin{aligned} \Lambda_{(\lambda)} &= -2 \frac{\epsilon_d}{f_d} \sum_{\mathbf{p}} \left( A_k^{(-\lambda)}(\mathbf{p}) \right)^2 \delta \left( \xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)} \right) - \\ &\quad - \frac{\epsilon_p}{f_p} \sum_{\mathbf{p}} \left( A_k^{(\lambda)}(\mathbf{p}) \right)^2 \delta \left( \xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)} \right). \quad (28) \end{aligned}$$

Нетрудно проследить, что при переходе к заполнению верхней хаббардовской подзоны условие сверхпроводимости имеет тот же вид (28), но с заменой знака перед  $\epsilon_d$ :

$$\begin{aligned} \Lambda_{(\lambda)} &= 2 \frac{\epsilon_d}{f_d} \sum_{\mathbf{p}} \left( A_k^{(-\lambda)}(\mathbf{p}) \right)^2 \delta \left( \xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)} \right) - \\ &\quad - \frac{\epsilon_p}{f_p} \sum_{\mathbf{p}} \left( A_k^{(\lambda)}(\mathbf{p}) \right)^2 \delta \left( \xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda)} \right). \quad (29) \end{aligned}$$

В обоих случаях  $\lambda = -1$  при заполнении нижней гибридной подзоны,  $\lambda = +1$  при заполнении верхней гибридной подзоны.

Условие существования сверхпроводимости при независимом заполнении негибридизованной  $p$ -зоны имеет вид  $\epsilon_p < 0$ .

## 5. МОДЕЛЬ ЭМЕРИ – ХИРША

Рассмотрим максимально упрощенную модель, когда можно вообще пренебречь прямыми перескоками  $w_p, w_d$  по сравнению с перескоками между  $3d$ -электронами меди и  $p_{x,y}$ -электронами кислорода.

Такая постановка задачи была предложена Эмери [3], а также Хиршем [4], которые изучали систему с заданными одночастичными энергиями  $\epsilon_p$  и  $\epsilon_d$ , что соответствует следующему гамильтониану:

$$\hat{H} = -t \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}', \lambda, \sigma} \left[ \hat{p}_{\mathbf{r}, \sigma, \lambda}^+ \hat{a}_{\mathbf{r}', \sigma} + \text{h.c.} \right] + \epsilon_p \sum_{\mathbf{r}, \lambda, \sigma} \hat{p}_{\mathbf{r}, \sigma, \lambda}^+ \hat{p}_{\mathbf{r}, \sigma, \lambda} + \epsilon_d \sum_{\mathbf{r}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{r}, \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{r}, \sigma}. \quad (30)$$

Здесь  $\hat{p}_{\mathbf{r}, \sigma, \lambda}^+$  и  $\hat{a}_{\mathbf{r}, \sigma}^+$  — операторы рождения дырочных  $p$ - и  $d$ -возбуждений в  $\mathbf{r}$ -ячейке с проекцией спина  $\sigma$  и орбитальными состояниями  $\lambda = x, y$ .

Предположим, что энергия электростатического отталкивания электронов, принадлежащих одному и тому же атому, велика как по сравнению с энергиями одноэлектронных состояний  $\epsilon_{p,d}$ , так и по сравнению с интегралом перескока  $t$ .

Уравнение для нахождения спектра одночастичных возбуждений находим через полюсы четырехкомпонентной функции Грина, которую определим через обратную матрицу:

$$G_{\omega}^{-1} \mathbf{p} = \begin{pmatrix} (0; \sigma) \\ (\sigma; 2) \\ (0; j, \sigma) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \Omega_0 & 0 & -\tau_{\mathbf{p}}^{(0,k)} \\ 0 & \Omega_2 & -\tau_{\mathbf{p}}^{(2,k)} \\ -\tau_{\mathbf{p}}^{(j,0)} & -\tau_{\mathbf{p}}^{(j,2)} & \delta_{(j,k)} \Omega_p \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Для  $\text{CuO}_2$ -слоя

$$\tau_{\mathbf{p}}^{(\alpha,k)} = t f_{\alpha} (1 - \exp(ip_k)), \\ \tau_{\mathbf{p}}^{(j,\alpha)} = t f_j (1 - \exp(-ip_j)).$$

Кристаллические индексы  $k, j$  независимо пробегают по два значения:  $x, y$ . Для частного случая квадратной элементарной ячейки концевые множители для  $p$ -электронов не зависят от кристаллического индекса  $f_j = f_p = 1 - 3h_p/4$ . Что же касается  $(x^2 - y^2)$ -дырочных состояний, то они существенно различаются для нижней и верхней хаббардовской подзон и поэтому

$$f_0 = 1 - h_d/2, \quad f_2 = h_d/2.$$

В нульпетлевом приближении «Хаббард I» средние числа заполнения самосогласованным образом определяются через произведения виртуальной

функции Грина в совпадающих точках на соответствующие концевые множители. Так, для среднего числа  $(x^2 - y^2)$ -дырок

$$h_d = 2T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \exp(i\omega\delta) \Omega_p (f_0 \Omega_2 + f_2 \Omega_0) \Phi^{-1}. \quad (32)$$

Для среднего числа  $p$ -дырок

$$h_p = f_p \left\{ 3n_F(\epsilon_p) + T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \exp(i\omega\delta) \Omega_0 \Omega_2 \Phi^{-1} \right\}. \quad (33)$$

Определитель матрицы (31) дает уравнение для спектра элементарных возбуждений  $\Phi_{-i\omega}(\mathbf{p}) = 0$ , где

$$\Phi = \Omega_0 \Omega_2 \Omega_p - f_p t_{\mathbf{p}}^2 (f_0 \Omega_2 + f_2 \Omega_0), \\ t_{\mathbf{p}}^2 = 2t^2 \left( 2 - \sum_k \cos p_k \right). \quad (34)$$

После введения химического потенциала  $\mu$  получаем

$$\Omega_0 = i\omega + \frac{U}{2} + \mu, \quad \Omega_2 = i\omega - \frac{U}{2} + \mu, \\ \Omega_p = i\omega - \epsilon_p. \quad (35)$$

В случае предельно большой энергии  $\epsilon_p$ , когда  $\Omega_p \rightarrow -\infty$ , получаем уравнения для спектра возбуждений, которые сводятся к классической модели Хаббарда с эффективным интегралом перескока  $-\tau_{\mathbf{p}} = t_{\mathbf{p}}^2 / \epsilon_p$ .

В предельном случае бесконечно большой энергии Хаббарда  $d$ -электронов ( $\Omega_2 \rightarrow -\infty$ ) имеем вариант одновременного заполнения  $p$ - и  $d$ -нижней хаббардовской подзоны со следующим спектром:

$$\xi_{\mathbf{p}}^{\pm} = \pm \sqrt{\frac{r_0^2}{4} + f_0 f_p t_{\mathbf{p}}^2} - \mu_0, \quad h_d < 1, \quad (36)$$

где

$$r_0 = \epsilon_p + \frac{U}{2}, \quad \mu_0 = \mu - \frac{\epsilon_p}{2}.$$

В этом пределе уравнения состояния переписываются следующим образом:

$$h_p = f_p \left\{ 3n_F(\epsilon_p) + \sum_{\mathbf{p}; \lambda = \pm} \left[ A^{(\lambda)}(\mathbf{p}) n_F(\xi^{(\lambda)}(\mathbf{p})) \right] \right\}, \quad (37a)$$

$$h_d = 2f_d \sum_{\mathbf{p}; \lambda = \pm} A^{(-\lambda)}(\mathbf{p}) n_F(\xi^{(\lambda)}(\mathbf{p})). \quad (37b)$$

Если нижняя подзона Хаббарда заполнена, а верхняя заполняется одновременно с  $p$ -состояниями, то  $\Omega_0 \rightarrow +\infty$  и снова имеем две ветви:

$$\xi_{\mathbf{p}}^{\pm} = \pm \sqrt{\frac{r_2^2}{4} + f_2 f_p t_{\mathbf{p}}^2} - \mu_2, \quad 1 < h_d < 2, \quad (38)$$

где

$$r_2 = \epsilon_p - \frac{U}{2}, \quad \mu_2 = \mu - \frac{\epsilon_p}{2}.$$

В этом пределе уравнения состояния имеют следующий вид:

$$h_p = f_p \left\{ 3n_F(\epsilon_p) + \sum_{\mathbf{p}; \lambda = \pm} \left[ A^{(\lambda)}(\mathbf{p}) n_F(\xi^{(\lambda)}(\mathbf{p})) \right] \right\}, \quad (39a)$$

$$h_d = 1 + f_d \sum_{\mathbf{p}; \lambda = \pm} A^{(-\lambda)}(\mathbf{p}) n_F(\xi^{(\lambda)}(\mathbf{p})). \quad (39b)$$

В обоих предельных случаях нормальные координаты не зависят от химического потенциала и определяются следующим образом:

$$A_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \frac{1}{2} \left[ 1 \pm \frac{r}{\sqrt{r^2 + 4f_p f_d t_{\mathbf{p}}^2}} \right]. \quad (40)$$

Условие возникновения сверхпроводящего состояния определяется из требования появления сингулярности у двухчастичной вершинной части  $\Gamma_{\alpha, \beta}$  при нулевых суммарных частоте, импульсе и спине.

Используя лестничное приближение, получаем линейное неоднородное интегральное уравнение для  $\Gamma_{\alpha, \beta}$ . Точке возникновения сингулярности отвечает возможность разрешить систему однородных уравнений, соответствующую системе интегральных уравнений (11).

Для любых двух операторов Хаббарда  $\hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha}$  имеем тождество

$$\left[ \hat{H}, \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha} \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{\beta} \right] = -\hat{X}_{\mathbf{r}'}^{\beta} \left[ \hat{H}, \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha} \right] + \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha} \left[ \hat{H}, \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{\beta} \right] + \left\{ \left[ \hat{H}, \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha} \right] \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{\beta} \right\}. \quad (41)$$

Если под  $\hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha}$  подразумевать операторы рождения однодырочных ферми-возбуждений, то, действуя левой частью равенства (41) на волновую функцию основного состояния, получаем энергию двухдырочных возбуждений плюс дополнительную энергию, происходящую от третьего слагаемого правой части

формулы (41). Оно как раз и определяет борновские амплитуды кинематического взаимодействия.

Выразим гамильтониан (30) через операторы Хаббарда:

$$\hat{p}_{\mathbf{r}, \sigma, \lambda}^+ = \hat{X}_{\mathbf{r}, \sigma}^{(\lambda, 0)}, \quad \hat{a}_{\mathbf{r}, \sigma}^+ = \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(\sigma, 0)} + \sigma \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(2, -\sigma)}, \quad (42)$$

а затем подставим его в последнее слагаемое соотношения (41). В результате для случая рассеяния с противоположными значениями проекции спина  $\sigma$  имеем следующие ненулевые амплитуды:

$$\begin{aligned} \left\{ \left[ \hat{H}, \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(\sigma, 0)} \right] \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{(-\sigma, 0)} \right\} &= -\delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \times \\ &\times \sum_{r_2, \lambda} t_{\lambda}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}) \left( \hat{X}_{\mathbf{r}_2, \sigma}^{(\lambda, 0)} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(-\sigma, 0)} - \hat{X}_{\mathbf{r}_2, -\sigma}^{(\bar{\lambda}, 0)} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(\sigma, 0)} \right); \\ \left\{ \left[ \hat{H}, \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(\lambda, 0)} \right] \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{(\bar{\lambda}, 0)} \right\} &= \\ &= -\delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \delta_{\lambda, \lambda'} \times \\ &\times \sum_{r_2} t_{\lambda}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}) \left( \hat{X}_{\mathbf{r}_2}^{(\sigma, 0)} \hat{X}_{\mathbf{r}, -\sigma}^{(\lambda, 0)} - \hat{X}_{\mathbf{r}_2}^{(-\sigma, 0)} \hat{X}_{\mathbf{r}, \sigma}^{(\lambda, 0)} \right); \\ \left\{ \left[ \hat{H}, \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(2, -\sigma)} \right] \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{(2, \sigma)} \right\} &= \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \sum_{r_2, \lambda} t_{\lambda}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}) \times \\ &\times \left( \hat{X}_{\mathbf{r}_2, \sigma}^{(\lambda, 0)} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(2, \sigma)} - \hat{X}_{\mathbf{r}_2, -\sigma}^{(\bar{\lambda}, 0)} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(2, -\sigma)} \right). \quad (43) \end{aligned}$$

После перехода к импульсному представлению  $\hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha} = \sum_{\mathbf{p}} \hat{X}_{\mathbf{p}}^{(\alpha)} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})$  обнаруживаем, что каждое слагаемое в правой части (43) дает борновскую амплитуду кинематического взаимодействия  $g_{\alpha, \beta, \lambda, \nu}(\mathbf{p})$ . Пары  $(\alpha, \beta)$  отвечают начальным состояниям в левой части (43):

$$[(-\sigma, 0), (\sigma, 0)]; \quad [(\lambda, 0), (-\lambda, 0)]; \quad [(2, -\sigma), (2, \sigma)].$$

Индексам « $\lambda$ », « $\nu$ » соответствуют всевозможные двухчастичные состояния в правой части (43).

Комбинируя всевозможные пары переходов, получаем всего шесть алгебраических уравнений. Это упрощение происходит оттого, что амплитуды кинематического взаимодействия (41) отличны от нуля только для переходов с одинаковыми кристаллическими индексами  $\lambda$  и для совпадающих ячеек (см. рис. 1).

Для неизвестных вершинных частей  $\Gamma_{00}$ ,  $\Gamma_{22}$ ,  $\Gamma_{20}$ ,  $\Gamma_{02}$  и  $\Gamma_{\lambda\lambda}$  имеются три соотношения:

$$\Gamma_{\lambda\lambda} = \Gamma_p, \quad 2\Gamma_{02} = \Gamma_{00} - \Gamma_{22} = -2\Gamma_{20}. \quad (44)$$

Условие разрешимости получающихся уравнений удастся записать таким образом, что между вершинами  $\Gamma_{00}$  и  $\Gamma_{22}$  имеется связь:  $\Gamma_{00}/\Gamma_{22} = -f_0 \xi_2^2 / f_2 \xi_0^2$ .



Окончательная система уравнений для  $\Gamma_p$  и  $\Gamma = \Gamma_{00}\xi_0^2/f_0 = -\Gamma_{22}\xi_2^2/f_0$  имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \Gamma &= 2T \times \\ &\times \sum_{\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^2 \left[ t_{\mathbf{p}}^2 f_p^2 (\Omega_2 - \Omega_0) \left( \frac{f_0 \Omega_2}{\Omega_0} + \frac{f_2 \Omega_0}{\Omega_2} \right) \Gamma + \right. \\ &\quad \left. + \Omega_p \Omega_0^2 \Omega_2^2 \Gamma_p \right] |\Phi_{\omega}(\mathbf{p})|; \\ \Gamma_p &= 2f_p T \times \\ &\times \sum_{\omega, \mathbf{p}} \left[ t_{\mathbf{p}}^2 f_p^2 (\Omega_2 - \Omega_0) \left( \frac{f_0 \Omega_2}{\Omega_0} + \frac{f_2 \Omega_0}{\Omega_2} \right) \Gamma + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Omega_p \Omega_0^2 \Omega_2^2}{f_p^2} \Gamma_p \right] |\Phi_{\omega}(\mathbf{p})|, \end{aligned} \quad (45)$$

где

$$\Phi_{\omega}(\mathbf{p}) = [\Omega_0 \Omega_2 \Omega_p - (\Omega_0 f_2 + \Omega_2 f_0) f_p t_{\mathbf{p}}^2]^{-2}.$$

Условие разрешимости полученной системы имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} 2f_p T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \left[ t_{\mathbf{p}}^4 f_p (\Omega_2 - \Omega_0) \left( \frac{f_0 \Omega_2}{\Omega_0} + \frac{f_2 \Omega_0}{\Omega_2} \right) + \right. \\ \left. + \Omega_p \frac{\Omega_0^2 \Omega_2^2}{2f_p^2} \right] |\Phi_{\omega}(\mathbf{p})| = 1. \end{aligned} \quad (46)$$

Учитывая условие  $\Omega_0 - \Omega_2 = U$  и полагая

$$\begin{aligned} t_{\mathbf{p}}^2 f_0 (f_0 \Omega_2 + f_2 \Omega_0) &\approx \Omega_0 \Omega_2 \Omega_p, \\ \Omega_{\nu} &\approx -\xi_{\nu} \quad (\nu = 0, 2, p), \end{aligned}$$

находим условие существования сверхпроводящего состояния:

$$2U f_p \frac{\xi_p^2 (f_0 \xi_2^2 + f_2 \xi_0^2)}{\xi_0 \xi_2} + \xi_p (f_2 \xi_0 + f_0 \xi_2)^2 < 0. \quad (47)$$

В предельном случае  $\xi_p \gg U$  из формулы (47) получаем формулу БКШ  $T_c \propto \exp(-1/\Lambda_0)$ , в которую входит постоянная  $\Lambda_0$ , которая совпадает с общим выражением, полученным в недавней работе автора [2]:

$$\Lambda_0 = 2\rho_0 \frac{U(U^2 - 4\mu^2)}{[U(1-n) - 2\mu]^2}, \quad (48)$$

где  $1-n = x$  — степень недозаполнения нижней подзоны Хаббарда,  $\rho_0$  — затравочная плотность состояний с эффективным интегралом перескока  $-t_{\mathbf{p}}^2/\epsilon_p$ .

Наибольший интерес представляет случай, когда энергия возбуждений находится внутри корреляционной щели. В предельном случае  $U \rightarrow \infty$ , когда происходит одновременное заполнение нижних хаббардовских подзон как для  $d$ -, так и для

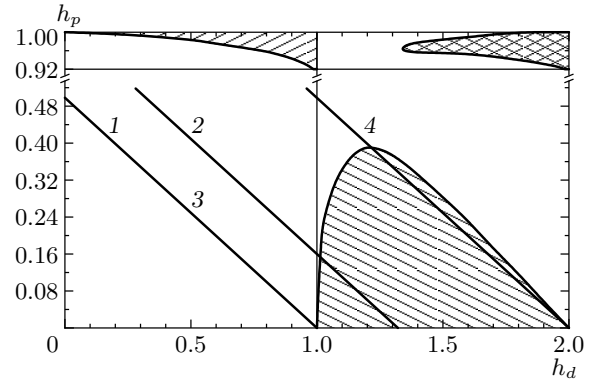


Рис. 2. Фазовая диаграмма для слоя  $\text{CuO}_2$  при  $T = 0$ , рассчитанная в пределе бесконечной энергии Хаббарда и с прямоугольной плотностью состояний. Изображены линии электронейтральности: 1 —  $2h_p + h_d = 1$  ( $\text{Ln}_2\text{CuO}_4$ ), 2 —  $2h_p + h_d = 4/3$  ( $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ), 3 —  $2h_p + h_d = 1$  ( $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$ ), 4 —  $2h_p + h_d = 2$  ( $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ ).

$p$ -возбуждений, имеем спектр (36),  $n_{p,d} < 1$ , а условие сверхпроводимости (47) преобразуется к следующему виду [9]:

$$\frac{\epsilon_p}{f_0} + \frac{\epsilon_d}{2f_p} < 0, \quad r = \epsilon_p - \epsilon_d, \quad \mu = -\frac{\epsilon_p + \epsilon_d}{2}. \quad (49)$$

Можно заметить, что это условие выполняется только при заполнении верхней  $\xi_{\mathbf{p}}^{(+)}$ -подзоны (36). Используя уравнения состояния в форме (37), удается обнаружить, что в этих условиях сверхпроводимость может существовать только для значений  $h_p$ , достаточно близких к единице:

$$4(8 - 5h_d)/(32 - 19h_d) < h_p < 1, \quad 0 < h_d < 1. \quad (50)$$

Если нижняя  $d$ -подзона Хаббарда заполнена, а  $p$ -состояния заполняются одновременно с верхней подзоной  $1 < h_d < 2$ , то  $\xi_0 \approx -U \rightarrow -\infty$ , а условие сверхпроводимости (47) преобразуется к виду, аналогичному (49):

$$-\frac{\epsilon_p}{f_2} + \frac{\epsilon_d}{2f_p} < 0, \quad r = \epsilon_p - \epsilon_d, \quad \mu = -\frac{\epsilon_p + \epsilon_d}{2}. \quad (51)$$

В этой области сверхпроводимость может осуществляться как при заполнении  $\xi_{\mathbf{p}}^{(-)}$ , так и при заполнении  $\xi_{\mathbf{p}}^{(+)}$  (см. рис. 2).

Если же энергия  $p$ -состояний превышает энергию одночастичных состояний в верхней  $d$ -подзоне ( $\epsilon_p > \epsilon_d$ ), то при  $h_d > 4/3$  сверхпроводимость существует во всей  $\xi_{\mathbf{p}}^{(-)}$ -подзоне:

$$0 < h_p < 4(2 - h_d)/(6 + h_d), \quad 4/3 < h_d < 2. \quad (52)$$

В случае, когда энергия  $p$ -состояний находится внутри корреляционной щели,  $1 < h_d < 4/3$ ,  $\epsilon_p < \epsilon_d$ , граница по  $h_p$  определяется соотношением (52) и осуществляется только для нижней части  $\xi_p^{(-)}$ -подзоны.

Соответствующая кривая  $h_p = h_p(h_d)$ , полученная в модели плоской зоны, начинается от точки  $h_d = 1$ ,  $h_p = 0$ , достигает максимума  $h_p^{max} = 0.39$  при  $h_d \approx 1.23$  и переходит в кривую (52) в точке  $h_d = 4/3$ ,  $h_p = 4/11$  (рис. 2).

В этой области число  $p$ -возбуждений достаточно мало, их амплитуда рассеяния положительна, а сверхпроводимость осуществляется кинематическим взаимодействием  $d$ -возбуждений. С повышением числа  $p$ -возбуждений их «отталкивательная» роль возрастает, что и приводит к ограничению по  $h_p$  области существования сверхпроводящих решений.

Заметим также, что условие сверхпроводимости (49) выполняется и при  $h_d > 4/3$ ,  $h_p \approx 1$ , т.е. при заполнении верхней подзоны (38). Однако в этой области концентраций заряд  $\text{CuO}_2$ -комплекса  $Q = 2h_p + h_d - 3$  везде положителен, что делает ее неинтересной для физического рассмотрения.

Важной особенностью полученной фазовой диаграммы является отсутствие симметрии относительно частично-дырочного преобразования  $h_d \rightarrow 2 - h_d$  при заданном числе  $p$ -дырок  $h_p$ . Сверхпроводимость оказывается наиболее эффективной в области  $h_d > 1$ , в то время как в области  $h_d < 1$ ,  $h_p < 0.9$  сверхпроводимость вообще отсутствует.

Эта ситуация качественно соответствует эксперименту на  $\text{Ln}_{2-x}\text{Me}_x\text{CuO}_4$ . При допировании двухвалентными катионами  $\text{Me}^{2+}$  при  $T = 0$  сверхпроводимость возникает и существует в достаточно широкой области концентраций:  $0.04 < x < 2/3$ .

В случае иттриевых соединений  $\text{Y}^{3+}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  при всех экспериментально достижимых  $\delta \leq 1/2$  величина  $h_d \geq 1$ , что соответствует дырочной сверхпроводимости. При этом стехиометрическое соединение  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  имеет максимально возможную  $T_c$ , что качественно согласуется с нашими результатами.

Для соединения с рутением  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  линия электронейтральности проходит вблизи правой границы сверхпроводящей фазы, что обуславливает его достаточно низкую температуру сверхпроводящего перехода ( $T_c \approx 1$  К).

При допировании четырехвалентными катионами  $\text{Me}^{4+}$  сверхпроводимость обнаруживается в узкой области концентраций:  $0.14 < x < 0.18$ . Существование последнего эффекта (так называемой

электронной сверхпроводимости), не проявляющегося в модели Эмери, следует считать обусловленным прямыми перескоками между катионами меди.

## 6. ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕННОЙ $p$ - $d$ -МОДЕЛИ

Для того чтобы получить фазовую диаграмму общего вида, применимую для сравнения с экспериментами, связанными с допированием трехвалентными и четырехвалентными катионами, необходимо провести учет не только прямых кислород-кислородных перескоков  $w_p$ , но также и перескоков между катионами меди  $w_d$ .

Для построения фазовой диаграммы достаточно заметить, что условие  $\Lambda = 0$  устанавливает связь между энергетической разностью  $r = \epsilon_p - \epsilon_d$  и химическим потенциалом  $-(\epsilon_p + \epsilon_d)/2$ . Подстановка этой связи в уравнения состояния (10) приводит к возникновению зависимости между  $h_p$  и  $h_d$ , что соответствует сверхпроводящей фазовой диаграмме.

Для дальнейших вычислений вместо двух конечных множителей  $f_p$  и  $f_d$  удобно ввести безразмерные переменные  $u$  и  $v$ :

$$u = \frac{w_p f_p - w_d f_d}{|r|}, \quad v = \frac{4w^2 f_p f_d}{r^2}. \quad (53a)$$

Из этих уравнений находим величины  $w_p f_p$  и  $w_d f_d$ :

$$\begin{aligned} w_p f_p &= |r| \left\{ \frac{u}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{u^2 + av} \right\}, \\ w_d f_d &= |r| \left\{ -\frac{u}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{u^2 + av} \right\}, \end{aligned} \quad (53b)$$

где  $a = w_p w_d / w^2$ .

Вместо химического потенциала при  $T = 0$  будем использовать безразмерную переменную  $y$ , которую находим из условия  $\xi^{(\pm)}(y) = 0$ .

Это соотношение, записанное в новых переменных и с помощью явного вида спектра возбуждений (7), имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \mu = -\frac{\epsilon_p + \epsilon_d}{2} &= -y \frac{w_p f_p + w_d f_d}{2} \pm \\ &\pm \frac{|r|}{2} \sqrt{(1 + uy \text{sign } r)^2 + v(1 - y)}. \end{aligned} \quad (54)$$

В результате химический потенциал, а также  $\epsilon_p$  и  $\epsilon_d$  оказываются функциями переменных  $u, v, r, y$ .

Проводя элементарные вычисления с помощью

формул (53) и (54), получим  $\epsilon_p = -\mu + r/2$ ,  $\epsilon_d = -\mu - r/2$  или

$$\begin{aligned} \epsilon_p &= -\frac{y|r|}{2}\sqrt{u^2 + av} \mp \\ &\mp \frac{|r|}{2}\sqrt{(1 + uy \operatorname{sign} r)^2 + v(1 - y)} + \frac{r}{2}, \\ \epsilon_d &= -\frac{y|r|}{2}\sqrt{u^2 + av} \mp \\ &\mp \frac{|r|}{2}\sqrt{(1 + uy \operatorname{sign} r)^2 + v(1 - y)} - \frac{r}{2}, \end{aligned} \quad (55)$$

где  $a = w_p w_d / w^2$ , верхний и нижний знаки относятся к верхней и нижней гибридационным подзонам.

Концевые множители и средние числа заполнения также записываются через переменные  $u, v, y$ . Так, при заполнении нижней гибридационной подзоны и при  $T = 0$  имеем

$$\begin{aligned} h_p &= \frac{4K_{(-)}}{4 + 3K_{(-)}}, & f_p &= \frac{4}{4 + 3K_{(-)}} \\ & & & (0 < h_p < 1), \\ h_d &= \frac{2K_{(+)}}{1 + K_{(+)}} , & f_d &= \frac{1}{1 + K_{(+)}} \\ & & & (0 < h_d < 1), \\ h_d &= \frac{2}{2 - K_{(+)}} , & f_d &= \frac{1}{2 + K_{(+)}} \\ & & & (1 < h_d < 2). \end{aligned} \quad (56)$$

Введенные здесь величины  $K_{(\pm)}$ , вообще говоря, зависят от четырех параметров  $u, v, y, r$ . Однако в предельном случае  $T = 0$  величины  $K_{(\pm)}$  зависят только от трех переменных  $u, v, y$ .

В пределе  $T = 0$  и при заполнении нижней гибридационной подзоны имеем следующие определения:

$$K_{(\pm)}(u, v, y) = \int_{-1}^y A^{(\pm)}(u, v, x) \rho_0(x) dx. \quad (57)$$

Здесь введена нормированная затравочная плотность состояний  $\rho_0(\epsilon)$ , а нормальные координаты оказываются не зависящими от энергетической разности  $r = \epsilon_p - \epsilon_d$ :

$$\begin{aligned} A^{(\pm)}(u, v, x) &= \frac{1}{2} \times \\ &\times \left[ 1 \pm \operatorname{sign} r \frac{1 + ux \operatorname{sign} r}{\sqrt{(1 + ux \operatorname{sign} r)^2 + v(1 - x)}} \right]. \end{aligned} \quad (58)$$

В простейшем случае плоской зоны, когда  $\rho_0(\epsilon) = \theta(1 - \epsilon^2)/2$ , при  $T = 0$  находим функции  $K_{(\pm)}(u, v, y)$ :

$$\begin{aligned} K_{(\pm)}(u, v, y) &= \frac{1}{4} \left\{ \pm \frac{v}{2} \times \right. \\ &\times \ln \left[ \frac{2u(1 + uy) - v + 2|u|\sqrt{(1 + uy)^2 + v(1 - y)}}{2u(1 - u) - v + 2|u|\sqrt{(1 - u)^2 + 2v}} \right] + \\ &+ (1 + y) \pm \frac{1}{u} \left[ \sqrt{(1 + uy)^2 + v(1 - y)} - \right. \\ &\left. \left. - \sqrt{(1 - u)^2 + 2v} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (59)$$

Таким образом, при заданных значениях трех безразмерных энергий  $w_p/|r|$ ,  $w_d/|r|$  и  $a = w_p w_d / w^2$  уравнения (54) вместе с соотношениями (56)–(59) позволяют определить переменные  $u, v$ , а с ними и средние числа заполнения  $h_d, h_p$  в зависимости от единственного параметра  $y$ .

Для того чтобы получить сверхпроводящую фазовую диаграмму, сначала исключим из уравнений (53) переменную  $|r|$ :

$$w_d f_d [u + \sqrt{u^2 + av}] = w_p f_p [-u + \sqrt{u^2 + av}]. \quad (60)$$

Далее используем условие появления сверхпроводимости (29), записанное для нижней гибридационной подзоны:  $\Lambda_{(-)} = 0$ . Записанное в переменных  $\epsilon_p/r$  и  $\epsilon_d/r$ , оно будет зависеть только от  $u, v, y$ :

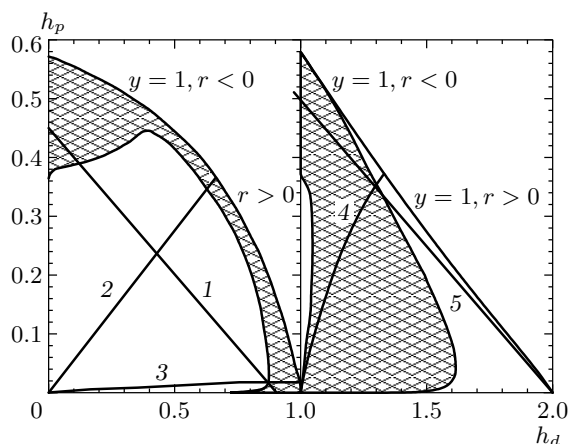
$$\begin{aligned} \mp 2 \frac{\epsilon_d}{|r| f_d} \left( A^{(+)}(u, v, y) \right)^2 - \\ - \frac{\epsilon_p}{|r| f_p} \left( A^{(-)}(u, v, y) \right)^2 = 0. \end{aligned} \quad (61)$$

Здесь верхний знак относится к области  $0 < h_d < 1$ , нижний знак — к области  $1 < h_d < 2$ .

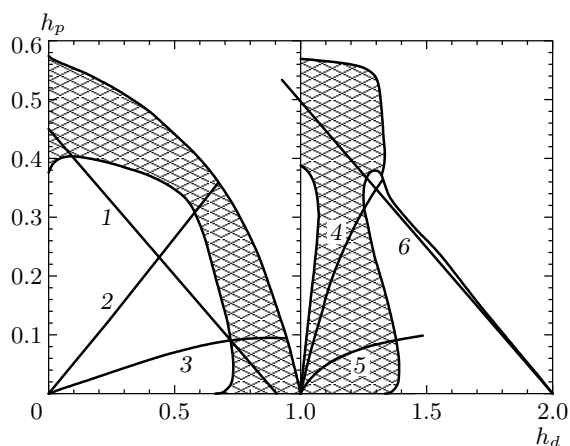
Полученная из определения химического потенциала для величин  $\epsilon_p/r$  и  $\epsilon_d/r$  их явная зависимость от  $u, v, y$  имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_p}{|r|} &= -\frac{y}{2}\sqrt{u^2 + av} \mp \\ &\mp \frac{1}{2}\sqrt{(1 + uy \operatorname{sign} r)^2 + v(1 - y)} + \frac{\operatorname{sign} r}{2}, \\ \frac{\epsilon_d}{|r|} &= -\frac{y}{2}\sqrt{u^2 + av} \mp \\ &\mp \frac{1}{2}\sqrt{(1 + uy \operatorname{sign} r)^2 + v(1 - y)} - \frac{\operatorname{sign} r}{2}. \end{aligned} \quad (62)$$

Таким образом, система уравнений (60) и (61) позволяет определить две величины в зависимости от третьей: например,  $u = u(y)$  и  $v = v(y)$ .



**Рис. 3.** Фазовая диаграмма обобщенной модели Эмери при интегралах перескока  $w = w_p = w_d$  и  $T = 0$ : 1 –  $1 - 2h_p + h_d = 0.9$ , 2 –  $r = 0$ , 3 –  $r = 2.5w_p$ , 4 –  $\tilde{r} = 0$ , 5 –  $2h_p + h_d = 2$



**Рис. 4.** Фазовая диаграмма обобщенной модели Эмери при интегралах перескока  $w = w_p = w_d$  и  $T = 0$ : 1 –  $1 - 2h_p + h_d = 0.9$ , 2 –  $r = 0$ , 3 –  $r = w_p$ , 4 –  $r = 0$ , 5 –  $r = w_p$ , 6 –  $2h_p + h_d = 2$

Подстановка этих функций в уравнения состояния (56)–(58) позволяет установить вид фазовой диаграммы в переменных  $h_p, h_d$  (рис. 3 и 4).

Общее соотношение справедливо при условии  $h_p < 1$ . Сверхпроводимость существует при условии  $\Lambda_k > 0$ .

В предельном случае  $v = 0$  происходит независимое заполнение подзон, когда выполняется условие равенства химических потенциалов, относящихся к  $p$ - и  $d$ -дырочным подсистемам. В этом случае сохраняется симметрия фазовой диаграммы относительно частично-дырочного преобразования  $h_d \rightarrow 2 - h_d$ .

Если предположить, что прямые перескоки малы по сравнению с  $p$ - $d$ -перескоками между кислородными анионами и катионами меди, тогда следует считать, что  $u = 0$ . В этом предельном случае мы получаем результаты, относящиеся к классической модели Эмери. Здесь фазовая диаграмма имеет максимальную асимметрию. Сверхпроводимость отсутствует в области малых  $h_p$  и при  $h_d < 1$ . Однако при малом числе  $h_p$  и при  $h_d > 1$  сверхпроводимость существует в широкой области изменения переменных  $1 < h_d < 2$ . (рис. 2).

### 7. ВЫВОДЫ

В разд. 6 рассмотрен наиболее реалистичный случай, когда прямые перескоки между медными катионами малы по сравнению с прямыми перескоками между анионами кислорода. Вычисления проводятся для модели плоской зоны.

Как видно на рис. 3 и 4, в области  $h_p < 1$  и  $h_d < 1$  сверхпроводимость существует только в достаточно узкой области, прилегающей к полосе  $2/3 < h_d < 1$ ,  $h_p \ll 1$ . Что же касается области  $1 < h_d < 2$ , то здесь сверхпроводимость отсутствует только в области малых электронных концентраций  $2 - h_d \ll 1$ ,  $h_p < 1$ .

В заключение заметим, что для изучаемых соединений, как и для всех высокотемпературных сверхпроводников, существенная зависимость  $T_c$  от концентрации допирующей примеси полностью обусловлена сильной зависимостью амплитуды электрон-электронного рассеяния от расположения уровня Ферми относительно середины зоны проводимости. Характерная энергия, которая определяет  $T_c$ , имеет порядок интеграла перескока, равного  $10^3$  К. Безразмерная постоянная  $\Lambda_k$ , входящая в формулу БКШ и определяемая в уравнении (29), не превышает  $1/4$ . Она сильно зависит от числа  $p$ - и  $d$ -электронов, которые рассеиваются с энергиями, близкими к энергии Ферми. Все эти факты качественно согласуются с экспериментами на соединениях  $\text{Ln}_{2-x}\text{Me}_x\text{CuO}_4$ ,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  и  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ .

### 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Настоящая работа фактически есть продолжение и обобщение предыдущей статьи автора [2], в которой рассмотрен предельный случай  $U_{dd} \gg t_{dd}$  и в этом пределе вычислена амплитуда рассеяния двух электронов с противоположными спинами.

При этом оказалось, что при малых энергиях (в газовой фазе) эта амплитуда положительна, однако с повышением энергии Ферми она меняет знак, что соответствует эффекту Рамзауэра в решетке. Следует заметить, что для газовой фазы в модели Хаббарда этот результат был получен автором в 1976 году [6]. Там же была доказана эквивалентность стандартной теории рассеяния и метода  $X$ -операторов, относящихся к случаю бесконечной энергии Хаббарда. Сходные результаты были получены и в так называемой  $t$ - $J$ -модели [10], где амплитуда рассеяния была вычислена с помощью  $T$ -матрицы, а затем проведен переход к пределу  $U_{dd} \rightarrow \infty$ .

Основной результат настоящей работы состоит в получении фазовой диаграммы как для верхней, так и для нижней зоны  $(x^2 - y^2)$ -электронов при слабом недозаполнении  $2p^6$ -оболочки кислородных анионов. Здесь наблюдается основное отличие фазовой диаграммы модели Эмери от классической модели Хаббарда, которое состоит в нарушении частично-дырочной симметрии  $d$ -электронной подсистемы при заданном числе  $p$ -дырок. Этот результат соответствует наблюдаемой асимметрии при переходе от лантан-стронциевых к неодим-цериевым купратам. Все эти результаты получены из гамильтониана Эмери–Хирша [3, 4] при нулевых значениях межъядерных кулоновских матричных элементов:  $U_{pd} = 0$ ,  $V_{dd} = 0$ ,  $V_{pp} = 0$ . Достаточно предположить, что энергия Хаббарда есть наибольший энергетический параметр.

Следует отметить, что вычисление температуры сверхпроводящего перехода в рамках  $t$ - $J$ -модели [11] не является последовательным по той причине, что учитывает поправки второго порядка по интегралу перескока (поскольку  $J \sim t^2/U$ ), в то время как при  $U \gg |t|$  разложение амплитуды рассеяния начинается с членов первого порядка по  $t_{pd}$ . Этот же недостаток имеет теория Занга–Райса [12], в которой рассмотрение ведется в рамках двух предположений: а)  $|t_{pd}| \ll r = \epsilon_p - \epsilon_d$  и б)  $U_{dd} \gg r$ . В настоящей работе также используется предположение б), однако при этом разложение амплитуды рассеяния оказывается линейным по параметру  $t_{pd}$ .

Использование лестничного приближения для

нахождения условий возникновения куперовской неустойчивости находит строгое обоснование. В модели Эмери поправки паркетного типа не содержат логарифмических расходимостей, в силу того что необходимое условие нестинга в данной задаче не выполняется ни при каком расположении уровня Ферми. Неборновские поправки к ядру интегральных уравнений Горькова приводят к возникновению конечного времени релаксации с переворотом спина. Соответствующее обратное время релаксации пропорционально второй степени температуры. Отсюда можно заключить, что при  $T = 0$  упомянутые выше поправки оказываются несущественными. Что же касается парамагнитных поправок типа Рудермана–Киттеля, то их влияние оказывается существенным именно в той области, где отсутствует куперовская неустойчивость. Доказательство этого утверждения является предметом отдельного рассмотрения.

## ЛИТЕРАТУРА

1. R. O. Zaitsev, Phys. Lett. A **134**, 199 (1988).
2. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **125**, 891 (2004).
3. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
4. J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett. **59**, 228 (1987).
5. Y. Maeno, H. Hashimoto et al., Nature (London) **372**, 532 (1994).
6. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
7. Л. П. Горьков, ЖЭТФ **34**, 735 (1958).
8. F. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217, 1230 (1956).
9. R. O. Zaitsev, Sol. St. Comm. **76**, 795 (1990).
10. M. Yu. Kagan and T. M. Rice, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 3771 (1994).
11. H. Fukuyama and K. Yosida, Jpn. J. Appl. Phys. Lett. **26**, 371 (1987).
12. F. C. Zhang and T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 9028 (1988).