

О СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ВЫСОКОСПИНОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

*Р. О. Зайцев**

*Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 21 июля 2010 г.
после переработки 21 января 2011 г.

На основе представления о сильном взаимодействии в одной и той же элементарной ячейке установлена возможность существования куперовской неустойчивости в соединениях переходных металлов. Вычисляется многокомпонентная амплитуда рассеяния возбуждений. Получены уравнения сверхпроводимости для металлических соединений переходных $3d$ -металлов. Показано, что в полюсном приближении уравнения сверхпроводимости сводятся к многокомпонентным уравнениям сверхпроводимости с заданными константами БКШ. Разработан метод нахождения одноорбитальных и разноорбитальных констант в зависимости от полного спина. Для одноорбитальных уравнений получены концентрационные области существования сверхпроводящего упорядочения.

1. ВВЕДЕНИЕ

После открытия высокотемпературной сверхпроводимости в соединениях меди [1], а затем через много лет и в соединениях железа [2], стало ясно, что это явление должно существовать для соединений всех остальных переходных $3d$ -элементов. Общим свойством электронов, находящихся на недозаполненной оболочке переходного элемента, является сильное внутриатомное электрон-электронное взаимодействие, достигающее десяти электрон-вольт [3]. Вычисление амплитуды рассеяния электронных возбуждений в решетке с учетом сильного короткодействующего отталкивания обнаруживает возможность изменения знака амплитуды рассеяния, начиная с некоторого конечного значения относительной энергии. Это обстоятельство позволило объяснить возникновение и наличие высокотемпературной сверхпроводимости внутри конечного интервала дырочных и электронных концентраций [4–6].

В соединениях $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$, $\alpha\text{-Fe}(\text{Te},\text{Se})$, где наблюдается аномальная сверхпроводимость, наблюдаются те же закономерности, что и в купратах: высокая температура сверхпроводящего перехода (T_c), аномальный изотопический эффект, резкая зависимость T_c от степени недозаполнения

нижней подзоны Хаббарда. В соответствии с этим в настоящей работе для построения теории сверхпроводимости используется та же модель Хаббарда, но с учетом возможной зависимости исходного гамильтониана от квантовых чисел, характеризующих низшее высокоспиновое квантовое состояние. Будет рассмотрено последовательное заполнение дырочной $3d$ -оболочки с учетом сильного электрон-электронного внутриатомного взаимодействия в предположении о том, что его величина является наибольшим энергетическим параметром.

2. ГАМИЛЬТониАН И НУЛЕВАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА

Гамильтониан системы записывается через операторы рождения и уничтожения и в простейшем случае переходов к ближайшим соседям имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \sum_{i,k,\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\sigma} \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{a}_{k,\sigma}(\mathbf{r}_2) t_{i,k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \mu \sum_{k,\mathbf{r},\sigma} \hat{a}_{k,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{a}_{\lambda,\sigma}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Ниже считается, что интеграл перескока $t_{i,k}(\mathbf{r})$ не зависит от проекции спина σ , но зависит от кристал-

*E-mail: Zaitsev_rogdai@mail.ru

лических индексов (i, k) , каждый из которых пробегает пять значений: $xy, yz, zx, x^2 - y^2$ и $3z^2 - r^2$.

После перехода к атомному представлению операторы рождения и уничтожения выражаются в виде линейной комбинации X -операторов Хаббарда:

$$\hat{a}_{k,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} b_{\alpha}^{k,\sigma} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\alpha}, \quad \hat{a}_{p,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\beta} b_{\beta}^{p,\sigma} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\beta}. \quad (2)$$

Здесь индексы α и β соответствуют взаимно-обратным переходам $s \rightarrow m$, т.е. $\beta(m, s) = -\alpha(s, m)$; $b_{\alpha}^{k,\sigma}$ — известные коэффициенты векторного сложения, соответствующие отделению одной частицы; $X_{\mathbf{r}}^{\alpha}$ — X -операторы ферми-типа, удовлетворяющие нефермижидкостным перестановочным соотношениям

$$\left\{ \hat{X}_{\mathbf{r}}^{nm}, \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{kp} \right\} = \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} \left(\delta_{mk} \hat{X}^{np} + \delta_{pn} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{km} \right). \quad (3)$$

Уравнения для нахождения средних чисел заполнения n_m находим из определения температурной функции Грина для каждой пары сопряженных X -операторов:

$$D^{\alpha,\beta}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}, \tau') = -\Theta(\tau - \tau') \langle X_{\mathbf{r}}^{\alpha}(\tau) X_{\mathbf{r}}^{\beta}(\tau') \rangle + \Theta(\tau' - \tau) \langle X_{\mathbf{r}}^{\beta}(\tau') X_{\mathbf{r}}^{\alpha}(\tau) \rangle. \quad (4)$$

Для вычисления одночастичной функции Грина используем простейшее однопетлевое приближение самосогласованного поля. В этом приближении компоненты Фурье одночастичной функции Грина $D_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p})$ только множителями f_{β} отличаются от так называемой виртуальной функции Грина $G_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p})$, которая, в свою очередь, удовлетворяет уравнению типа Дайсона:

$$D_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) = G_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) f_{\beta};$$

$$\left\{ \hat{G}_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) \right\}_{\beta}^{\alpha} = \{i\omega - \epsilon_m + \epsilon_s\} \delta(\alpha + \beta) - \Sigma_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}). \quad (5)$$

Здесь $\epsilon_m - \epsilon_s$ — энергия перехода, отвечающая номеру перехода α , $\omega = T(2n + 1)\pi$.

При заданных номерах одночастичного перехода $\beta(m, s)$ каждый концевой множитель f_{β} по определению равен сумме средних чисел заполнения начального и конечного состояний. В нашем приближении собственно-энергетическая часть есть сумма произведений концевой множителя на обобщенную матрицу перескоков, а также однопетлевой поправки:

$$f_{\alpha(s,m)} = n_s + n_m, \quad \Sigma_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) = f_{\alpha} t_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{p}) + \Sigma_{\omega}^{\alpha,\beta},$$

$$t_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{p}) = b_{\alpha}^{k,\sigma} t_{k,s}(\mathbf{p}) b_{\beta}^{s,\sigma}. \quad (6)$$

Средние значения для чисел заполнения n_{N+1}^m конечных состояний m находим через диагональную компоненту при $\beta = -\alpha$:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0+} D^{\alpha,\beta}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}, \tau + \delta) =$$

$$= \lim_{\delta \rightarrow 0+} T \sum_{\omega, \mathbf{p}} D_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) \exp(i\omega\delta) =$$

$$= \langle X_{\mathbf{r}}^{\beta(m,s)} X_{\mathbf{r}}^{\alpha(s,m)} \rangle = \langle X_{\mathbf{r}}^{m,s} X_{\mathbf{r}}^{s,m} \rangle =$$

$$= \langle X_{\mathbf{r}}^{m,m} \rangle = n_{N+1}^m. \quad (7)$$

Уравнения (7) определяют концевые множители $f(\alpha(s, m)) = n_s + n_m$, которые входят в определение диагональных компонент одночастичной функции Грина, которая через уравнения (5), (6) выражается через всевозможные концевые множители.

3. АМПЛИТУДА КИНЕМАТИЧЕСКОГО РАССЕЯНИЯ

Амплитуды двухчастичного рассеяния $G_{\alpha,\beta;\lambda,\nu}^0(\mathbf{p})$ определяются как коэффициенты при произведениях операторов $\hat{X}_{\lambda} \hat{X}_{\nu}$, полученных в результате вычисления двойных перестановочных соотношений X -операторов Хаббарда $\left\{ \hat{X}_{\alpha}, [\hat{X}_{\beta}, \hat{H}] \right\}$, где \hat{H} — оператор Гамильтона, выраженный через X -операторы [3].

Конкретные вычисления показывают, что при заданном значении проекции спина виртуальных перескоков дело сводится к нахождению четырех независимых вершин [7].

Зафиксируем индексы одночастичного перехода $\alpha(n, m)$ таким образом, что n -состояние есть $(N - 1)$ -частичное состояние с заданной проекцией полного спина $S^z - 1/2$, в то время как m -состояние есть N -частичное состояние с заданной проекцией полного спина S^z . Если рассеяние происходит на совокупности виртуальных переходов со спином «вверх», тогда следует фиксировать переход между $(N - 1)$ -, d - и N -частичными состояниями, а затем вычислить антикоммутиатор:

$$\left\{ \hat{X}^{n,m}, \hat{X}^{c,d} \right\} = \delta_{m,c} \hat{X}^{n,d} + \delta_{d,n} \hat{X}^{c,m}. \quad (8)$$

Для того чтобы вычислить амплитуду рассеяния одночастичных возбуждений с противоположным знаком изменения проекции спина, необходимо задать переход между $(N - 1)$ -, a - и N -частичными b -состояниями, принадлежащими к группе одноча-

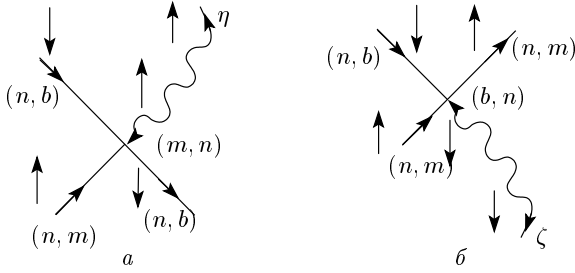


Рис. 1. Графическое изображение вершинной части кинематического взаимодействия при заданной проекции n -состояния

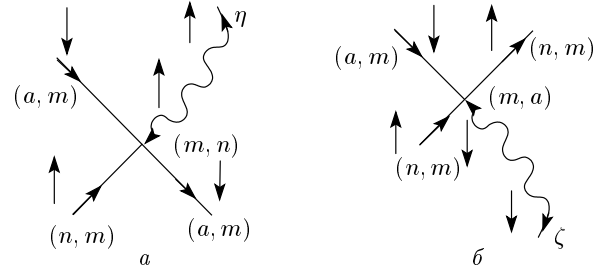


Рис. 2. Графическое изображение вершинной части кинематического взаимодействия при заданной проекции m -состояния

стичных переходов с группой «перевернутых» спинов, а затем вычислить коммутатор¹⁾:

$$\begin{aligned} & \left[\hat{X}^{a,b}, \left(\delta_{m,c} \hat{X}^{n,d} + \delta_{d,n} \hat{X}^{c,m} \right) \right] = \\ & = \delta_{m,c} \left(\delta_{b,n} \hat{X}^{a,d} - \delta_{a,d} \hat{X}^{n,b} \right) + \\ & + \delta_{d,n} \left(\delta_{b,c} \hat{X}^{a,m} - \delta_{a,m} \hat{X}^{c,b} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

В нашем случае состояния (a, n, d) и (b, m, c) принадлежат состояниям с различным числом электронов. Поэтому первое и четвертое слагаемые в правой части равенства (9) должны быть отброшены и это соотношение упрощается:

$$\begin{aligned} & \left[\hat{X}^{a,b}, \left(\delta_{m,c} \hat{X}^{n,d} + \delta_{d,n} \hat{X}^{c,m} \right) \right] = \\ & = -\delta_{m,c} \delta_{a,d} \hat{X}^{n,b} + \delta_{d,n} \delta_{b,c} \hat{X}^{a,m}. \end{aligned} \quad (10)$$

Мы ограничиваемся рассмотрением переходов между высокоспиновыми состояниями, когда каждое состояние определяется числом частиц и проекцией полного спина. Поскольку, с другой стороны, все одночастичные возбуждения соответствуют переходам с изменением проекции спина на $\pm 1/2$, в первом слагаемом правой части формулы (10) следует считать, что $a = n$, а во втором слагаемом — $b = m$. В результате мы получим четырехвершинные части, определяющие кинематическое взаимодействие для двух диаграмм, которые представлены на рис. 1а, 2а.

Если же мы рассматриваем рассеяние на совокупности виртуальных переходов со спином «вниз», то следует фиксировать переход между N -, b - и

$(N - 1)$ -частичными a -состояниями, а затем вычислить антикоммутатор:

$$\left\{ \hat{X}^{n,m}, \hat{X}^{b,a} \right\} = \delta_{m,b} \hat{X}^{n,a} + \delta_{a,n} \hat{X}^{b,m}. \quad (11)$$

Для того чтобы вычислить амплитуду рассеяния одночастичных возбуждений с противоположным знаком изменения проекции спина, необходимо задать переход между $(N - 1)$ -, c - и N -частичными d -состояниями, принадлежащими к той же группе одночастичных переходов со спином «вниз», а затем вычислить коммутатор:

$$\begin{aligned} & \left[\hat{X}^{c,d}, \left(\delta_{m,b} \hat{X}^{n,a} + \delta_{a,n} \hat{X}^{b,m} \right) \right] = \\ & = \delta_{m,b} \left(\delta_{d,n} \hat{X}^{c,a} - \delta_{a,c} \hat{X}^{n,d} \right) + \\ & + \delta_{n,a} \left(\delta_{b,d} \hat{X}^{c,m} - \delta_{m,c} \hat{X}^{b,d} \right). \end{aligned} \quad (12)$$

Заметим, что в нашем случае состояния (a, n, c) и (b, m, d) принадлежат состояниям с различным числом электронов. Поэтому первое и четвертое слагаемые в правой части формулы (12) должны быть отброшены, и вместо (12) имеем

$$\begin{aligned} & \left[\hat{X}^{c,d}, \left(\delta_{m,b} \hat{X}^{n,a} + \delta_{a,n} \hat{X}^{b,m} \right) \right] = \\ & = -\delta_{m,b} \delta_{a,c} \hat{X}^{n,d} + \delta_{n,a} \delta_{b,d} \hat{X}^{c,m}. \end{aligned} \quad (13)$$

Мы ограничиваемся рассмотрением переходов между высокоспиновыми состояниями, когда каждое состояние определяется числом частиц и проекцией полного спина. Поскольку рассматриваемые одночастичные возбуждения соответствуют переходам с изменением проекции спина на $\pm 1/2$, в первом слагаемом правой части формулы (13) следует считать, что $b = d = m$, а во втором слагаемом — $a = c = n$. В результате мы получим четырехвершинные части, определяющие кинематическое взаимодействие для двух диаграмм, которые представлены на рис. 1б, 2б.

¹⁾ Появление коммутатора вместо антикоммутатора связано с тем, что операторы $\hat{X}^{n,d}$ и $\hat{X}^{c,m}$ принадлежат к операторам бозе-типа, каждый из которых отвечает переходом без изменения числа частиц.

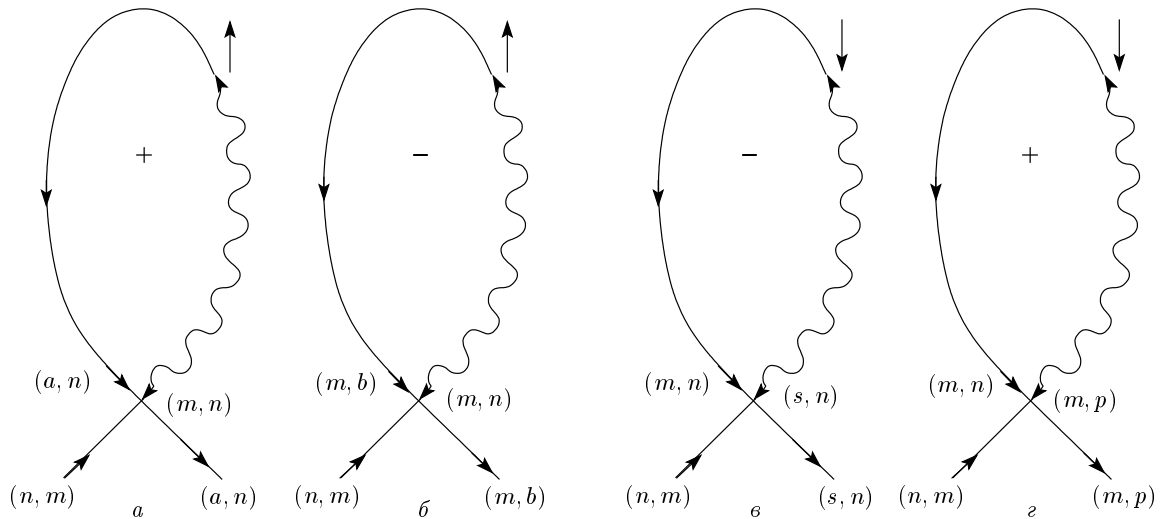


Рис. 3. Графическое изображение аномальной собственно-энергетической части при заданной проекции m - или n -состояний

4. АНОМАЛЬНАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА

Для написания уравнений сверхпроводимости запишем обратную функцию Грина с учетом наличия аномальных собственно-энергетических функций $\hat{\Sigma}$ и $\check{\Sigma}$ [8],

$$\begin{aligned} (\hat{G}_\omega(\mathbf{p}))^{-1} &= \\ &= \begin{pmatrix} (\hat{G}_\omega^0(\mathbf{p}))^{-1} & -\hat{\Sigma}^{an} \\ -\check{\Sigma}^{(an)} & -(\hat{G}_{-\omega}^0(\mathbf{p}))^{-1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь $G^{(0)}$ — нулевая функция Грина, вычисленная в нуль-петлевом приближении:

$$\left((\hat{G}_\omega^0(\mathbf{p}))^{-1} \right)_{k,\beta}^{i,\alpha} = (i\omega_n + \mu)\delta_{ik} - fb_\alpha b_\beta t_{i,k}(\mathbf{p}), \quad (15)$$

где $\omega_n = \pi T(2n+1)$, μ — химический потенциал, f — концевой множитель, определенный для каждого целочисленного интервала изменения концентраций, b_k — коэффициенты разложения операторов рождения и уничтожения по X -операторам Хаббарда.

Вычисление аномальных собственно-энергетических частей проводится в соответствии с графиками рис. 3, каждый из которых содержит одну из вершин кинематического взаимодействия с множителем, который пропорционален произведению компоненты Фурье от интеграла перескока на аномальную гриновскую функцию. Соответствующие компоненты аномальной функции Грина

определяются через обратную функцию Грина с помощью общего уравнения (14).

Собственно-энергетические части с противоположными знаками проекции спина различаются знаком. Поэтому в согласии с рис. 3 можно написать

$$(\Sigma^{an})_{\beta k}^{\alpha i} = \mp 2b_\alpha T \sum_{\omega_n, \mathbf{p}, s} t_{i,s}(\mathbf{p}) b_\gamma (G_{\omega_n}(\mathbf{p}))_{\beta k}^{\gamma s}. \quad (16)$$

Знак «плюс» или «минус» берется в зависимости от того, какое (начальное или конечное) квантовое состояние сохраняется при продвижении вдоль всей диаграммы. Это простое правило позволяет записать уравнения (16) в явном виде, однако при этом возникают достаточно сложные уравнения. По этой причине ограничимся простейшей задачей получения системы уравнений для нахождения температуры сверхпроводящего перехода.

5. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ВЕРШИННОЙ ЧАСТИ

Как показано Горьковым [8], для получения условия возникновения сверхпроводимости достаточно рассмотреть однородную систему лестничных уравнений. Поскольку в нашем случае нулевая вершинная часть, входящая в определение аномальной функции Грина, зависит только от выходящих импульсов, соответствующие уравнения имеют системы алгебраических уравнений:

$$\Gamma_1(\alpha, \beta|\gamma, \psi) = -T \sum_{\mathbf{p}, \omega, \eta, \zeta, \lambda, \nu} \Gamma^{(0)}(\alpha, \beta|\eta, \zeta; \mathbf{p}) \times G_{\omega}^{\eta, \lambda}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{\zeta, \nu}(-\mathbf{p}) \Gamma(\lambda, \nu|\gamma, \psi). \quad (17)$$

В соответствии с рис. 1, 2 вершинная часть разбивается на две части:

$$\Gamma(\alpha, \beta|\gamma, \psi) = \Gamma_1(\alpha, \beta|\gamma, \psi) + \Gamma_2(\alpha, \beta|\gamma, \psi). \quad (18)$$

Используя рис. 1, напомним

$$\begin{aligned} \Gamma_1(\alpha, \beta|\gamma, \psi) = & \\ = & \left\{ T \sum_{\mathbf{p}, \omega, \eta, \lambda, \nu} t^{\bar{\alpha}, \eta}(\mathbf{p}) G_{\omega}^{\eta, \lambda}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{\beta, \nu}(-\mathbf{p}) + \right. \\ & \left. + T \sum_{\mathbf{p}, \omega, \zeta, \lambda, \nu} t^{\bar{\beta}, \zeta}(\mathbf{p}) G_{\omega}^{\alpha, \lambda}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{\zeta, \nu}(-\mathbf{p}) \right\} \times \\ & \times \Gamma(\lambda, \nu|\gamma, \psi), \quad (19) \end{aligned}$$

где индексы фиксированы в соответствии с рис. 1:

$$\alpha \rightarrow \alpha(n, m), \quad \bar{\alpha} \rightarrow \bar{\alpha}(m, n),$$

$$\beta \rightarrow \beta(n, b), \quad \bar{\beta} \rightarrow \bar{\beta}(n, b).$$

Как видно на рис. 1, β - и α -переходы имеют одинаковые начальные значения проекции полного спина. Индексы η и λ соответствуют всевозможным одночастичным переходам с положительным знаком изменения проекции спина, в то время как ζ и ν соответствуют всем переходам с отрицательным знаком изменения проекции спина.

Вершинную часть $\Gamma_2(\alpha, \beta|\gamma, \psi)$ напомним, используя рис. 2:

$$\begin{aligned} \Gamma_2(\alpha, \beta|\gamma, \psi) = & \\ = & - \left\{ T \sum_{\mathbf{p}, \omega, \eta, \lambda, \nu} t^{\bar{\alpha}, \eta}(\mathbf{p}) G_{\omega}^{\eta, \lambda}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{\beta, \nu}(-\mathbf{p}) + \right. \\ & \left. + T \sum_{\mathbf{p}, \omega, \zeta, \lambda, \nu} t^{\bar{\beta}, \zeta}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{\alpha, \lambda}(-\mathbf{p}) G_{\omega}^{\zeta, \nu}(\mathbf{p}) \right\} \Gamma(\lambda, \nu|\gamma, \psi). \quad (20) \end{aligned}$$

Здесь индексы определяются в соответствии с рис. 2, а β - и α -переходы имеют одинаковые конечные проекции полного спина:

$$\alpha \rightarrow \alpha(n, m), \quad \bar{\alpha} \rightarrow \alpha(m, n),$$

$$\beta \rightarrow \beta(a, m), \quad \bar{\beta} \rightarrow \bar{\beta}(m, a).$$

Множители $t_{\mathbf{p}}^{\bar{\beta}, \zeta}$ и элементы функции Грина $G_{\omega}^{\alpha, \nu}(\mathbf{p})$ выражаются через коэффициенты векторного сложения b_{α} , амплитуду перехода к соседней ячейке $t_{\mathbf{p}}$ и одночастичную матрицу перехода (см. формулы (5), (6)), однако ниже мы воспользуемся полюсным приближением для одночастичной функции Грина:

$$G_{\omega}^{\alpha, \beta}(\mathbf{p}) = \frac{e_{\lambda}^{(-\alpha)}(\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(\beta)}(\mathbf{p})}{i\omega - \xi_{\lambda}(\mathbf{p})} = \frac{e_{\lambda}^{(-\alpha)}(\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(\beta)}(\mathbf{p})}{i\omega - fb^2 \epsilon_{\lambda}(\mathbf{p}) + \mu}. \quad (21)$$

Здесь $b^2 = \sum_{\gamma} b_{\gamma}^2$, где суммирование проводится по заданной группе переходов; $\epsilon_{\lambda}(\mathbf{p})$ — выделенное собственное значение матрицы интегралов перескока, которое пересекает уровень Ферми; $e_{\lambda}^{-\alpha}(\mathbf{p})$ и $e_{\lambda}^{\beta}(\mathbf{p})$ — соответствующие собственные функции, удовлетворяющие уравнениям

$$\sum_{\zeta, k} t_{i, k}^{(\beta, \zeta)}(\mathbf{p}) e_{k, \lambda}^{(\zeta)}(\mathbf{p}) = b^2 e_{i, \lambda}^{(\beta)}(\mathbf{p}) \epsilon_{\lambda}(\mathbf{p}). \quad (22)$$

Используя полюсное приближение (21) и уравнения (22), можно вычислить суммы, входящие в определения вершинных частей:

$$\begin{aligned} \sum_{\zeta} t_{\mathbf{p}}^{\bar{\beta}, \zeta} G_{\omega}^{\zeta, \nu}(\mathbf{p}) &= \sum_{\zeta} t_{\mathbf{p}}^{\bar{\beta}, \zeta} \frac{e_{\lambda}^{(-\zeta)}(\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(\nu)}(\mathbf{p})}{i\omega - \xi_{\lambda}(\mathbf{p})} = \\ &= \frac{1}{f_{\beta}} \frac{e_{\lambda}^{(-\beta)}(\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(\nu)}(\mathbf{p})}{i\omega - \xi_{\lambda}(\mathbf{p})} (\xi_{\lambda}(\mathbf{p}) + \mu). \end{aligned}$$

Учитывая неполюсный характер первого слагаемого $\sim \xi_{\lambda}(p)$, окончательно получим, что в полюсном приближении можно написать

$$\sum_{\zeta} t_{\mathbf{p}}^{\bar{\beta}, \zeta} G_{\omega}^{\zeta, \nu}(\mathbf{p}) \approx \frac{\mu}{f_{\beta}} G_{\omega}^{\beta, \nu}(\mathbf{p}). \quad (23)$$

При заданных значениях кристаллических индексов $t_{i, k}^{-\beta, \zeta}(\mathbf{p}) = b_{-\beta} t_{i, k}(\mathbf{p}) b_{\zeta}$, откуда можно заключить, что полюсная гриновская функция зависит от номеров перехода через нормированные множители $b_{-\alpha}/b$ и b_{β}/b . Таким образом, соотношение (21) переписывается следующим образом:

$$G_{\omega}^{\alpha, \beta}(\mathbf{p}) \approx \frac{b_{\alpha} b_{\beta} e_{\lambda}^{(j)}(-\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(n)}(\mathbf{p})}{b^2 (i\omega + \mu - fb^2 t_{\mathbf{p}})}. \quad (24)$$

С помощью этих определений удастся вычислить сумму (23), входящую в определение ядра интегрального уравнения для вершинной части:

$$\sum_{\zeta} t_{\mathbf{p}}^{\bar{\beta}, \zeta} G_{\omega}^{\zeta, \nu}(\mathbf{p}) \approx \frac{\mu}{f_{\beta}} \frac{b_{\beta} b_{\nu} e_{\lambda}^{(j)}(-\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(n)}(\mathbf{p})}{b^2 (i\omega + \mu - fb^2 t_{\mathbf{p}})}. \quad (25)$$

Подставляя выражения (24) и (25) в правые части уравнений (20) и (19) и складывая их, получим уравнения с разделяющимися переменными:

$$\Gamma_{\alpha,\beta}^{(i,k)} = \frac{\mu T}{f} \sum_{\omega, \mathbf{p}, n, s, j, m} S_{\alpha,\beta,\alpha',\beta'}^{ik,jm} \frac{b_{\alpha'} b_{\beta'}}{b^2} \times \\ \times G_{\omega}^{(j,n)}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{(m,s)}(-\mathbf{p}) \sum_{\nu, \zeta} \frac{b_{\nu} b_{\zeta}}{b^2} \Gamma_{\nu, \zeta}^{n,s}. \quad (26)$$

Здесь латинские индексы нумеруют кристаллические состояния, а греческие индексы нумеруют переходы, соответствующие заданному кристаллическому индексу, одночастичные гриновские функции, записанные в полюсном приближении, имеют следующий вид:

$$G_{\omega}^{(j,n)}(\mathbf{p}) = \frac{e_{\lambda}^{(j)}(-\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(n)}(\mathbf{p})}{i\omega_n - \xi_{\lambda}(\mathbf{p})}. \quad (27)$$

Используя уравнения (26), находим систему уравнений, зависящую только от кристаллических индексов:

$$\bar{\Gamma}_{i,k} = \\ = 2T \sum_{\omega, \mathbf{p}, \zeta, \nu, j, m} \bar{S}_{ik,jm} G_{\omega}^{(j,n)}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{(m,s)}(-\mathbf{p}) \bar{\Gamma}_{n,s}, \quad (28)$$

где

$$\bar{\Gamma}_{i,k} = \sum_{\alpha,\beta} \frac{b_{\alpha} b_{\beta}}{b^2} \Gamma_{\alpha,\beta}^{i,k}, \\ \bar{S}_{ik,jm} = \frac{\mu}{f} \sum_{\alpha,\beta,\zeta,\nu} \frac{b_{\alpha} b_{\beta}}{b^2} S_{\alpha,\beta,\zeta,\nu}^{ik,jm} \frac{b_{\zeta} b_{\nu}}{b^2}. \quad (29)$$

Сумма, стоящая в правой части, содержит положительные и отрицательные слагаемые, соответствующие вершинным частям, изображенным на рис. 1, 2. Окончательное выражение в правой части было удвоено, что соответствует суммированию по проекции электронного спина.

С учетом этих соображений после использования полюсного приближения (27) система уравнений (28) преобразуется к системе уравнений многозонной теории для нахождения температуры сверхпроводящего перехода T_c :

$$\bar{\Gamma}_{i,k} = \sum_{\mathbf{p}, n, s, j, m} \bar{S}_{ik,jm} e_{\lambda}^{(j)}(-\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(m)}(\mathbf{p}) \times \\ \times e_{\lambda}^{(n)}(\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(s)}(-\mathbf{p}) \frac{\mu}{\xi_{\lambda}(\mathbf{p})} \text{th} \left(\frac{\xi_{\lambda}(\mathbf{p})}{2T_c} \right) \bar{\Gamma}_{n,s}. \quad (30)$$

Фигурирующая здесь величина $\bar{S}_{ik,jm} = \bar{R}(i,k) \times (\delta_{ij} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kj})$ будет вычислена для каждого целочисленного интервала изменения переменной h_d .

6. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ СОЕДИНЕНИЙ МЕДИ ($0 < h_d < 1$)

В качестве первого примера рассмотрим уравнения для случая $0 < h_d < 1$. В этом случае достаточно рассмотреть переходы между пустым и однодырочным состояниями с заданным кристаллическим индексом и заданной проекцией спина.

При этом можно заметить, что все амплитуды (одноорбитальные и разноорбитальные) для рассеяния с противоположной проекцией спина имеют отрицательный знак. Отсюда заключаем, что уравнение для определения T_c имеет известный вид:

$$\bar{\Gamma}_{i,k} = \frac{\mu}{f} \sum_{\mathbf{p}, n, s} \left[e_{\lambda}^{(i)}(-\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(k)}(\mathbf{p}) + e_{\lambda}^{(k)}(-\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(i)}(\mathbf{p}) \right] \times \\ \times e_{\lambda}^{(n)}(\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(s)}(-\mathbf{p}) \text{th} \left(\frac{\xi_{\lambda}(\mathbf{p})}{2T_c} \right) \frac{1}{\xi_{\lambda}(\mathbf{p})} \bar{\Gamma}_{n,s}. \quad (31)$$

Из этого уравнения следует, что сверхпроводимость существует только при положительных значениях химического потенциала μ [4].

Согласно уравнению состояния (7), для области $h_d < 1$

$$h_d = 2\kappa f \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}), \quad f = 1 - h_d \left(1 - \frac{1}{2\kappa} \right), \quad (32)$$

где параметр κ обозначает число независимых орбитальных компонент: $\kappa = 1, 2, 3, 5$.

Для самодуальных решеток условие появления сверхпроводимости $\mu = 0$, что при $T = 0$ эквивалентно требованию $\sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}) = 1/2$. Отсюда находим область существования сверхпроводимости:

$$\frac{2\kappa}{1 + 2\kappa} < h_d < 1, \quad (33)$$

где $\kappa = 1, 2, 3$ для низкоспиновых, $\kappa = 5$ для высокоспиновых состояний.

7. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ СОЕДИНЕНИЙ НИКЕЛЯ ($1 < h_d < 2$)

В случае сильной кубической анизотропии однодырочные $3d$ -состояния имеют десятикратное вырождение $\hat{a}_{\sigma,k}^{\dagger}|0\rangle$ где $\sigma = \pm 1$, а кристаллический индекс пробегает пять значений: $k = 1, \dots, 5$.

Низшие двухдырочные состояния имеют спин $S = 1$:

$$\hat{a}_{k\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{n\sigma}^{\dagger} |0\rangle \quad (S^z = \pm\sigma);$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_{k\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{n\downarrow}^{\dagger} + \hat{a}_{k\downarrow}^{\dagger} \hat{a}_{n\uparrow}^{\dagger} \right) |0\rangle \quad (S^z = 0), \quad (34)$$

где кристаллические индексы k и n пробегает 5 значений таким образом, чтобы выполнялось условие $k > n$. Учитывая переходы между однодырочными и всевозможными двухдырочными состояниями, можно написать разложение операторов уничтожения по X -операторам Хаббарда:

$$\hat{a}_{k\sigma,r} = \sum_{m < k} \left\{ \hat{X}_r^{(m\sigma|k\sigma,m\sigma)} + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{X}_r^{(m\bar{\sigma}|T_{mk})} \right\} - \sum_{m > k} \left\{ \hat{X}_r^{(m\sigma|k\sigma,m\sigma)} + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{X}_r^{(m\bar{\sigma}|T_{mk})} \right\}, \quad (35)$$

где $k\sigma, m\sigma$ — двухдырочные состояния ($S = 1, S^z = \sigma$), T_{mk} обозначает двухдырочное состояние с ну-

левой проекцией спина ($S = 1, S^z = 0$), составленное по правилу (34). Таким образом, для каждого заданного кристаллического индекса и заданной проекции спина существуют четыре перехода к состояниям с проекцией единица и четыре перехода к состояниям с нулевой проекцией полного спина.

Для построения аномальной собственно-энергетической части каждому переходу необходимо поставить в соответствие обратный переход со всеми измененными знаками проекций спинов. Принцип построения матрицы аномальной собственно-энергетической части определяется знаками отличных от нуля вершинных частей, изображенных на рис. 2а:

$$S(\alpha, \beta) =$$

$1 \uparrow 1 \downarrow -$	$(1-, 2- 2-)$	$(T_{1,2} 2+)$	$(1-, 3- 3-)$	$(T_{1,3} 3+)$
$(2+ 1+, 2+)$	0	-	0	0
$(2- T_{1,2})$	-	+	0	0
$(3+ 1+, 3+)$	0	0	0	-
$(3- T_{1,3})$	0	0	-	+
$(4+ 1+, 4+)$	0	0	0	0
$(4- T_{1,4})$	0	0	0	0
$(5+ 1+, 5+)$	0	0	0	0
$(5- T_{1,5})$	0	0	0	0

(36)

$1 \uparrow 1 \downarrow -$	$(1-, 4- 4-)$	$(T_{1,4} 4+)$	$(1-, 5- 5-)$	$(T_{1,5} 5+)$
$(2+ 1+, 2+)$	0	0	0	0
$(2- T_{1,2})$	0	0	0	0
$(3+ 1+, 3+)$	0	0	0	0
$(3- T_{1,3})$	0	0	0	0
$(4+ 1+, 4+)$	0	-	0	0
$(4- T_{1,4})$	-	+	0	0
$(5+ 1+, 5+)$	0	0	0	-
$(5- T_{1,5})$	0	0	-	+

Здесь выписаны матричные элементы, возникающие от аномальных средних $\langle \hat{a}_{1\uparrow} \hat{a}_{1\downarrow} \rangle$.

Остальные четыре матрицы $\langle \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{n\downarrow} \rangle$ при $k = n$, диагональные по нижним кристаллическим индексам, имеют аналогичный вид.

Отмеченные знаком «минус» значения матричных элементов возникают в случае, когда совпадают индексы одночастичных состояний, относящихся к номеру строки и номеру столбца. Отмеченные знаком «плюс» значения матричных элементов возникают в случае, когда совпадают индексы двухча-

стичных состояний. В случае отсутствия совпадений соответствующая вершинная часть обращается в нуль и поэтому матричный элемент следует считать равным нулю.

На основе этих соображений вычисляем безразмерную константу λ :

$$\lambda = \frac{1}{b^2} \sum b_\alpha^2 b_\beta^2 S_{\alpha,\beta} = -\frac{1}{2}, \quad b^2 = \sum_\alpha b_\alpha^2, \quad (37)$$

где использованы спиновые коэффициенты векторного сложения:

$$\begin{aligned}
 b_1 = b_3 = b_5 = b_7 = 1, \\
 b_2 = b_4 = b_6 = b_8 = \frac{1}{\sqrt{2}}.
 \end{aligned}
 \tag{38}$$

Эффективная константа определяется через нормированные коэффициенты векторного сложения

$$\Lambda = \frac{\mu}{f} \sum B_\alpha^2 B_\beta^2 S_{\alpha,\beta} = -\frac{\mu}{12f},
 \tag{39}$$

где μ — химический потенциал, отсчитываемый от минимального значения энергии квазичастиц, компоненты $B_k = Cb_k$, а постоянная C определяется из условия нормировки $\sum_k B_k^2 = 1$

$$\begin{aligned}
 B_1 = B_3 = B_5 = B_7 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}, \\
 B_2 = B_4 = B_6 = B_8 = \frac{1}{\sqrt{3}}.
 \end{aligned}
 \tag{40}$$

Вычисление остальных четырех матриц, диагональных по кристаллическому индексу, приводит к тем же результатам (37), (39).

Концевой множитель f есть линейная функция дырочной концентрации h_d : $f = a + bh_d$, где коэффициенты a и b подбираются таким образом, чтобы для целых значений h_d величина f была равной обратной кратности вырождения.

В нашем случае, когда $1 < h_d < 2$, согласно этому определению,

$$f = \frac{h_d - 1}{30} + \frac{2 - h_d}{10}.
 \tag{41}$$

Как следует из уравнения состояния, записанного для интервала $1 < h_d < 2$,

$$\begin{aligned}
 h_d = 1 + 30f_d \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}), \quad \xi_{\mathbf{p}} = fb^2 t_{\mathbf{p}} - \mu, \\
 b^2 = \sum_k b_k^2.
 \end{aligned}
 \tag{42}$$

В точке перехода, где химический потенциал μ обращается в нуль, величина обратного значения концевого множителя, $(f_c)^{-1} = 20$, равна среднеарифметической кратности вырождения между крайними точками выделенного интервала изменения концентрации дырок.

Точно таким же способом могут быть построены вершинные части, соответствующие аномальным средним, которые недиагональны по кристаллическим индексам.

Ниже выписаны матричные элементы, отвечающие матрицам $\langle \hat{a}_{1\uparrow} \hat{a}_{2\downarrow} \rangle$, а также $\langle \hat{a}_{2\uparrow} \hat{a}_{1\downarrow} \rangle$:

$$S_{\alpha,\beta}^{1,2} =$$

$1 \uparrow 2 \downarrow - \rangle$	$(1-, 2- 1-)$	$(T_{1,2} 1+)$	$(2-, 3- 3-)$	$(T_{2,3} 3+)$
$(2+ 1+, 2+)$	0	0	0	0
$(2- T_{1,2})$	0	+	0	0
$(3+ 1+, 3+)$	0	0	0	-
$(3- T_{1,3})$	0	0	-	0
$(4+ 1+, 4+)$	0	0	0	0
$(4- T_{1,4})$	0	0	0	0
$(5+ 1+, 5+)$	0	0	0	0
$(5- T_{1,5})$	0	0	0	0

$1 \uparrow 2 \downarrow - \rangle$	$(2-, 4- 4-)$	$(T_{2,4} 4+)$	$(2-, 5- 5-)$	$(T_{2,5} 5+)$
$(2+ 1+, 2+)$	0	0	0	0
$(2- T_{1,2})$	0	0	0	0
$(3+ 1+, 3+)$	0	0	0	0
$(3- T_{1,3})$	0	0	0	0
$(4+ 1+, 4+)$	0	-	0	0
$(4- T_{1,4})$	-	0	0	0
$(5+ 1+, 5+)$	0	0	0	-
$(5- T_{1,5})$	0	0	-	0

(43)

$$S_{\alpha,\beta}^{2,1} =$$

$2 \uparrow 1 \downarrow -$	$(1-, 2- 2-)$	$(T_{1,2} 2+)$	$(1-, 3- 3-)$	$(T_{1,3} 3+)$
$(1+ 2+, 1+)$	0	0	0	0
$(1- T_{1,2})$	0	+	0	0
$(3+ 2+, 3+)$	0	0	0	-
$(3- T_{2,3})$	0	0	-	0
$(4+ 2+, 4+)$	0	0	0	0
$(4- T_{2,4})$	0	0	0	0
$(5+ 2+, 5+)$	0	0	0	0
$(5- T_{2,5})$	0	0	0	0

$2 \uparrow 1 \downarrow -$	$(1-, 4- 4-)$	$(T_{1,4} 4+)$	$(1-, 5- 5-)$	$(T_{1,5} 5+)$
$(1+ 2+, 1+)$	0	0	0	0
$(1- T_{1,2})$	0	0	0	0
$(3+ 2+, 3+)$	0	0	0	0
$(3- T_{2,3})$	0	0	0	0
$(4+ 2+, 4+)$	0	-	0	0
$(4- T_{2,4})$	-	0	0	0
$(5+ 2+, 5+)$	0	0	0	-
$(5- T_{2,5})$	0	0	-	0

(44)

Безразмерные недиагональные константы взаимодействия вычисляем по той же схеме, что и диагональные:

$$\lambda_{1,2} = \lambda_{2,1} = \frac{1}{b^2} \sum b_{\alpha}^2 S_{\alpha,\beta}^{(1,2)} b_{\beta}^2 = -\frac{11}{24} \approx -0.458. \quad (45)$$

Эффективная константа определяется через нормированные коэффициенты векторного сложения (40):

$$\Lambda_{1,2} = \frac{\mu}{f} \sum \frac{B_{\alpha}^2 B_{\beta}^2 S_{\alpha,\beta}^{(1,2)}}{f} = -\frac{11\mu}{144f}, \quad (46)$$

где μ — химический потенциал, отсчитываемый от минимального значения энергии квазичастиц.

Вычисление остальных 18 недиагональных матриц, соответствующих аномальным средним $\langle \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{n\downarrow} \rangle$ при $k \neq n$, приводит к тем же результатам (45) и (46).

Таким образом, мы имеем систему уравнений:

$$\bar{\Gamma}_{i=k} = \frac{\mu}{6f} \sum_{\mathbf{p}, n, s} e_{\lambda}^{(i)}(-\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(i)}(\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(n)}(\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(s)}(-\mathbf{p}) \times \text{th} \left(\frac{\xi_{\lambda}(\mathbf{p})}{2T_c} \right) \bar{\Gamma}_{n,s}, \quad (47a)$$

$$\bar{\Gamma}_{i \neq k} = \frac{11\mu}{144f} \times \sum_{\mathbf{p}, n, s} \left[e_{\lambda}^{(i)}(-\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(k)}(\mathbf{p}) + e_{\lambda}^{(k)}(-\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(i)}(\mathbf{p}) \right] \times e_{\lambda}^{(n)}(\mathbf{p}) e_{\lambda}^{(s)}(-\mathbf{p}) \text{th} \left(\frac{\xi_{\lambda}(\mathbf{p})}{2T_c} \right) \bar{\Gamma}_{n,s}. \quad (47b)$$

8. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ СОЕДИНЕНИЙ КОБАЛЬТА ($2 < h_d < 3$)

В случае $2 < h_d < 3$ необходимо рассмотреть переходы между двухдырочными состояниями со спином 1 и трехдырочными состояниями со спином 3/2.

В случае сильной кубической анизотропии десять низших двухдырочных высокоспиновых имеют спин $S = 1$:

$$\hat{a}_{k\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{n\sigma}^{\dagger} |0\rangle \quad (S^z = \pm\sigma);$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_{k\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{n\downarrow}^{\dagger} + \hat{a}_{k\downarrow}^{\dagger} \hat{a}_{n\uparrow}^{\dagger} \right) |0\rangle \quad (S^z = 0), \quad (48)$$

где кристаллические индексы k и n пробегает 5 значений таким образом, чтобы выполнялось условие $k > n$. Эти состояния резонируют с сорока трехдырочными состояниями с полным спином 3/2 ($k > n > m$):

$$\hat{a}_{k\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{n\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{m\sigma}^{\dagger} |0\rangle \quad \left(S^z = \frac{3}{2}\sigma \right), \quad (49a)$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (49b)$$

$$\left(S^z = \frac{1}{2} \right),$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (49c)$$

$$\left(S^z = -\frac{1}{2} \right).$$

Для построения аномальной собственно-энергетической части каждому переходу необходимо поставить в соответствие обратный переход со всеми измененными знаками проекций спинов. Принцип построения матрицы аномальной собственно-энергетической части определяется знаками отличных от нуля вершинных частей, изображенных в виде матрицы (50):

$$\hat{S}_{\alpha,\beta}^{1,1} =$$

$1 \uparrow 1 \downarrow - \rangle$	$(1, 2, 3 2, 3)$	$(1, 2, 4 2, 4)$	$(1, 2, 5 2, 5)$	$(1, 3, 4 3, 4)$	$(1, 3, 5 3, 5)$	$(1, 4, 5 4, 5)$
$(2, 3 1, 2, 3)$	\hat{W}	0	0	0	0	0
$(2, 4 1, 2, 4)$	0	\hat{W}	0	0	0	0
$(2, 5 1, 2, 5)$	0	0	\hat{W}	0	0	0
$(3, 4 1, 3, 4)$	0	0	0	\hat{W}	0	0
$(3, 5 1, 3, 5)$	0	0	0	0	\hat{W}	0
$(4, 5 1, 4, 5)$	0	0	0	0	0	\hat{W}

Здесь на диагонали расположены шесть одинаковых матриц \hat{W} :

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} 1 \uparrow 1 \downarrow - \rangle & \left(-\frac{3}{2}(1, 2, 3|-1) \right) & \left(-\frac{1}{2}(1, 2, 3|0) \right) & \left(\frac{1}{2}(1, 2, 3|1) \right) \\ \left(1(2, 3)|\frac{3}{2}(1, 2, 3) \right) & 0 & 0 & - \\ \left(0(2, 3)|\frac{1}{2}(1, 2, 3) \right) & 0 & - & + \\ \left(-1(2, 3)|-\frac{1}{2}(1, 2, 3) \right) & - & + & 0 \end{pmatrix}. \quad (51)$$

Отмеченные знаком «минус» значения матричных элементов возникают в случае, когда совпадают индексы двухдырочных состояний, относящихся к номеру строки и номеру столбца. Отмеченные знаком «плюс» значения матричных элементов возникают в случае, когда совпадают индексы трехдырочных состояний. В случае отсутствия совпадений соответствующая вершинная часть обращается в нуль и поэтому матричный элемент следует считать равным нулю.

На основе этих соображений вычисляем безразмерную константу λ :

$$\lambda = \frac{1}{b^2} \sum b_\alpha^2 b_\beta^2 S_{\alpha,\beta} = -\frac{1}{4}, \quad b^2 = \sum_\alpha b_\alpha^2, \quad (52)$$

где использованы спиновые коэффициенты векторного сложения:

$$\begin{aligned} b_1 &= -b_5 = b_9 = -b_{13} = 1, \\ b_2 &= -b_6 = b_{10} = -b_{14} = \frac{\sqrt{3}}{2}, \\ b_3 &= -b_7 = b_{11} = b_{15} = \frac{\sqrt{2}}{2}, \\ b_4 &= -b_8 = b_{12} = -b_{16} = \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (53)$$

Эффективная константа определяется через нормированные коэффициенты векторного сложения

$$\Lambda = \frac{\mu}{f} \sum B_\alpha^2 B_\beta^2 S_{\alpha,\beta}^{(1,1)} = -\frac{\mu}{36f}, \quad (54)$$

где μ — химический потенциал, отсчитываемый от минимального значения энергии квазичастиц, компоненты $B_k = C b_k$, а постоянная C определяется из условия нормировки: $\sum_k B_k^2 = 1$.

Вычисление остальных четырех матриц, диагональных по кристаллическому индексу, приводит к тем же результатам (52)–(54).

Концевой множитель f есть линейная функция дырочной концентрации h_d : $f = a + bh_d$, где коэффициенты a и b подбираются таким образом, чтобы для целых значений h_d величина f была равной обратной кратности вырождения.

В нашем случае, когда $2 < h_d < 3$, согласно этому определению,

$$f = \frac{hd - 2}{40} + \frac{3 - hd}{30}. \tag{55}$$

Как следует из уравнения состояния, записанного для интервала $2 < h_d < 3$:

$$h_d = 2 + 40f_d \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}), \tag{56}$$

$$\xi_{\mathbf{p}} = fb^2 t_{\mathbf{p}} - \mu, \quad b^2 = \sum_k b_k^2.$$

В точке перехода, где обращается в нуль химический потенциал μ , величина обратного значения концевой множителя, $(f_c)^{-1} = 35$ равна среднеарифметической кратности вырождения между крайними точками выделенного интервала изменения концентрации дырок.

Точно таким же способом могут быть построены вершинные части, соответствующие аномальным гриновским функциям, которые недиагональны по кристаллическим индексам.

Рассмотрим, например, таблицу, отвечающую матрицам $\langle \hat{a}_{2\uparrow} \hat{a}_{1\downarrow} \rangle$:

$$\hat{S}_{\alpha,\beta}^{(1,2)} =$$

1 ↑ 1 ↓ −	(1, 2, 3 2, 3)	(1, 2, 4 2, 4)	(1, 2, 5 2, 4)	(1, 3, 4 3, 5)	(1, 3, 5 3, 5)	(1, 4, 5 4, 5)
(1, 3 1, 2, 3)	\hat{V}	0	0	0	0	0
(1, 4 1, 2, 4)	0	\hat{V}	0	0	0	0
= (1, 5 1, 2, 5)	0	0	\hat{V}	0	0	0
(3, 4 2, 3, 4)	0	0	0	\hat{U}	0	0
(3, 5 2, 3, 5)	0	0	0	0	\hat{U}	0
(4, 5 2, 4, 5)	0	0	0	0	0	\hat{U}

. (57)

Здесь на диагонали расположены три одинаковые матрицы \hat{V} ,

$$\hat{V} =$$

1 ↑ 1 ↓ −	$\left(-\frac{3}{2}(1, 2, 3) -1(2, 3)\right)$	$\left(-\frac{1}{2}(1, 2, 3 0(2, 3))\right)$	$\left(\frac{1}{2}(1, 2, 3 1(2, 3))\right)$
$\left(1(1, 3) \frac{3}{2}(1, 2, 3)\right)$	0	0	0
$\left(0(1, 3) \frac{1}{2}(1, 2, 3)\right)$	0	0	+
$\left(-1(1, 3) -\frac{1}{2}(1, 2, 3)\right)$	0	+	0

. (58)

где наблюдаются совпадения только для трехдырочных состояний $S^z(1, 2, 3)$, что соответствует появлению отталкивательных вершинных частей (со зна-

ком «плюс»).

На диагонали также имеются три матрицы \hat{U} :

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} 1 \uparrow 1 \downarrow - & \left(-\frac{3}{2}(1, 3, 4) | -1(3, 4)\right) & \left(-\frac{1}{2}(1, 3, 4) | 0(3, 4)\right) & \left(\frac{1}{2}(1, 3, 4) | -1(3, 4)\right) \\ \hline \left(1(3, 4) | \frac{3}{2}(2, 3, 4)\right) & 0 & 0 & - \\ \left(0(3, 4) | \frac{1}{2}(2, 3, 4)\right) & 0 & - & 0 \\ \left(-1(3, 4) | -\frac{1}{2}(2, 3, 4)\right) & - & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (59)$$

Здесь попарно совпадают двухдырочные состояния $S^z(3, 4)$, что соответствует появлению «притягательных» вершинных частей (со знаком «минус»).

Существует также группа переходов, когда к

двухдырочным состояниям с номерами 2, 3 добавляется дырочное состояние с номером 4 (или 5). Для этой группы переходов получим следующую таблицу:

$$\begin{pmatrix} 4 \uparrow 1 \downarrow - & \left(-\frac{3}{2}(1, 2, 3) | -1(2, 3)\right) & \left(-\frac{1}{2}(1, 2, 3) | 0(2, 3)\right) & \left(\frac{1}{2}(1, 2, 3) | 1(2, 3)\right) \\ \hline \left(1(2, 3) | \frac{3}{2}(2, 3, 4)\right) & 0 & 0 & - \\ \left(0(2, 3) | \frac{1}{2}(2, 3, 4)\right) & 0 & - & 0 \\ \left(-\frac{1}{2}(2, 3) | -\frac{1}{2}(2, 3, 4)\right) & - & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (60)$$

Здесь мы снова получили матрицу (59).

Безразмерные недиагональные константы взаимодействия вычисляем по той же схеме, что и диагональные:

$$\lambda_{1,2} = \lambda_{2,1} = \frac{1}{b^2} \sum b_\alpha^2 b_\beta^2 S_{\alpha,\beta}^{(1,2)} = -\frac{1}{6}. \quad (61)$$

Эффективная константа определяется через нормированные коэффициенты векторного сложения (53)

$$\Lambda_{1,2} = \frac{\mu}{f} \sum B_\alpha^2 B_\beta^2 S_{\alpha,\beta} = -\frac{\mu}{72f}, \quad (62)$$

где μ — химический потенциал, отсчитываемый от минимального значения энергии квазичастиц.

9. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ СОЕДИНЕНИЙ ЖЕЛЕЗА ($3 < h_d < 4$)

В этой области концентраций система резонирует между сорока трехдырочными состояниями с полным спином $3/2$ ($k > n > m$):

$$\hat{a}_{k\sigma}^\dagger \hat{a}_{n\sigma}^\dagger \hat{a}_{m\sigma}^\dagger |0\rangle \quad \left(S^z = \frac{3}{2}\sigma\right),$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ & \left(S^z = \frac{1}{2}\right), \\ & \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ & \left(S^z = -\frac{1}{2}\right), \end{aligned} \quad (63)$$

и двадцатью пятью четырехдырочными состояниями с полным спином $S = 2$ (где $k > n > m > s$):

$$\hat{a}_{k\sigma}^\dagger \hat{a}_{n\sigma}^\dagger \hat{a}_{m\sigma}^\dagger \hat{a}_{s\sigma}^\dagger |0\rangle \quad (S^z = 2\sigma);$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger + \right. \\ & \left. + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (S^z = 1), \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}} \left(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger + \right. \\ \left. + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger + \right. \\ \left. + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (S^z = 0), \\ \frac{1}{2} \left(\hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger + \right. \\ \left. + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (S^z = -1).$$

Для построения аномальной собственно-энергетической части каждому переходу необходимо поставить в соответствие обратный переход со всеми измененными знаками проекций спинов. Принцип построения матрицы аномальной собственно-энергетической части определяется знаками отличных от нуля вершинных частей, изображенных в виде следующей матрицы:

	1 ↑ 1 ↓ -)	(1, 2, 3, 4 2, 3, 4)	(1, 2, 4, 5 2, 4, 5)	(1, 2, 3, 5 2, 3, 5)	(1, 3, 4, 5 3, 4, 5)
$\hat{S}_{\alpha,\beta}^{1,1} =$	(2, 3, 4 1, 2, 3, 4)	\hat{W}	0	0	0
	(2, 4, 5 1, 2, 4, 5)	0	\hat{W}	0	0
	(2, 3, 5 1, 2, 3, 5)	0	0	\hat{W}	0
	(3, 4, 5 1, 3, 4, 5)	0	0	0	\hat{W}

На диагонали расположены четыре одинаковые матрицы \hat{W} :

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & - \\ 0 & 0 & - & + \\ 0 & - & + & 0 \\ - & + & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (65)$$

Здесь выписаны матричные элементы, отвечающие матрице $\langle \hat{a}_{1\uparrow} \hat{a}_{1\downarrow} \rangle$. Остальные четыре матрицы $\langle \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{n\downarrow} \rangle$ при $k = n$, диагональные по нижним кристаллическим индексам, имеют аналогичный вид.

Отмеченные знаком «минус» значения матричных элементов возникают в случае, когда совпадают индексы трехдырочных состояний, относящихся к номеру строки и номеру столбца. Отмеченные знаком «плюс» значения матричных элементов возникают в случае, когда совпадают индексы четырехдырочных состояний. В случае отсутствия совпадений соответствующая вершинная часть обращается в нуль и поэтому матричный элемент следует считать равным нулю.

На основе этих соображений вычисляем безразмерную константу λ :

$$\lambda = \frac{1}{b^2} \sum b_\alpha^2 b_\beta^2 S_{\alpha,\beta} = -\frac{1}{4}, \quad b^2 = \sum_\alpha b_\alpha^2, \quad (66)$$

где использованы спиновые коэффициенты векторного сложения:

$$b_1 = -b_5 = b_9 = -b_{13} = 1, \\ b_2 = -b_6 = b_{10} = -b_{14} = \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad (67)$$

$$b_3 = -b_7 = b_{11} = -b_{15} = \frac{\sqrt{2}}{2}, \\ b_4 = -b_8 = b_{12} = -b_{16} = \frac{1}{2}. \quad (68)$$

Эффективная константа определяется через нормированные коэффициенты векторного сложения:

$$\Lambda = \frac{\mu}{f} \sum B_\alpha^2 B_\beta^2 S_{\alpha,\beta} = -\frac{\mu}{40f}, \quad (69)$$

где μ — химический потенциал, отсчитываемый от минимального значения энергии квазичастиц, компоненты $B_k = C b_k$, а постоянная C определяется из условия нормировки $\sum_k B_k^2 = 1$.

Концевой множитель f есть линейная функция дырочной концентрации h_d : $f = a + b h_d$, где коэффициенты a и b подбираются таким образом, чтобы для целых значений h_d величина f была равной обратной кратности вырождения.

В нашем случае, когда $3 < h_d < 4$, согласно этому определению,

$$f = \frac{h_d - 3}{25} + \frac{4 - h_d}{40}. \quad (70)$$

Как следует из уравнения состояния, записанного для интервала $3 < h_d < 4$,

$$h_d = 3 + 25 f_d \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}), \quad \xi_{\mathbf{p}} = f b^2 t_{\mathbf{p}} - \mu, \\ b^2 = \sum_k b_k^2. \quad (71)$$

В точке перехода, где обращается в нуль химический потенциал μ , величина обратного значения концевоего множителя, $(f_c)^{-1} = 65/2$, равна среднеарифметической кратности вырождения между крайними точками выделенного интервала изменения концентрации дырок. Эта величина компенсирует малость константы $|\lambda| = 1/4$.

Вычисление остальных четырех матриц, диаго-

нальных по кристаллическому индексу, приводит к тем же результатам (65), (66).

Точно таким же способом могут быть построены вершинные части, соответствующие недиагональным гриновским функциям. Рассмотрим, например, таблицу, отвечающую аномальной собственной-энергетической части $\langle \hat{a}_{2\uparrow} \hat{a}_{1\downarrow} \rangle$:

$1 \uparrow 2 \downarrow -$	(1, 2, 3, 4 1, 3, 4)	(1, 2, 4, 5 1, 4, 5)	(1, 2, 3, 5 1, 3, 5)	(2, 3, 4, 5 3, 4, 5)
$\hat{S}_{\alpha,\beta}^{1,2} = (2, 3, 4 1, 2, 3, 4)$	\hat{V}	0	0	0
$(2, 4, 5 1, 2, 4, 5)$	0	\hat{V}	0	0
$(2, 3, 5 1, 2, 3, 5)$	0	0	\hat{V}	0
$(3, 4, 5 1, 3, 4, 5)$	0	0	0	\hat{U}

(72)

Здесь на диагонали расположены три одинаковые матрицы \hat{V} ,

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (73)$$

В первой матрице, стоящей на диагонали, наблюдаются совпадения только для четырехдырочных состояний $S^z(1, 2, 3, 4)$, что соответствует появлению отталкивательных вершинных частей (со знаком «плюс»). Во второй матрице, стоящей на диагонали, наблюдаются совпадения только для четырехдырочных состояний $S^z(1, 2, 4, 5)$, что соответствует появлению отталкивательных вершинных частей (со знаком «плюс»). В третьей матрице, стоящей на диагонали, наблюдаются совпадения только для четырехдырочных состояний $S^z(1, 2, 3, 5)$, что соответствует появлению отталкивательных вершинных частей (со знаком «плюс»).

На диагонали имеется также матрица \hat{U} :

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (74)$$

Здесь попарно совпадают трехдырочные состояния $S^z(3, 4, 5)$, что соответствует появлению «притягательных» вершинных частей (со знаком «минус»).

Безразмерные недиагональные константы взаимодействия вычисляем по той же схеме, что и диагональные:

$$\lambda_{1,2} = \lambda_{2,1} = \frac{1}{b^2} \sum b_\alpha^2 b_\beta^2 S_{\alpha,\beta}^{(1,2)} = \frac{1}{16}. \quad (75)$$

Эффективная константа определяется через нормированные коэффициенты векторного сложения (68)

$$\Lambda_{1,2} = \frac{\mu}{f} \sum B_\alpha^2 B_\beta^2 S_{\alpha,\beta} = \frac{\mu}{160f}, \quad (76)$$

где μ — химический потенциал, отсчитываемый от минимального значения энергии квазичастиц.

Вычисление остальных 18 недиагональных матриц, соответствующих аномальным средним $\langle \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{n\downarrow} \rangle$ при $k \neq n$, приводит к тем же результатам (75) и (76).

Заметим, что в отличие от всех предыдущих случаев ($h_d < 3$) полученная вершинная часть $\lambda_{i \neq k}$ оказалась положительной.

10. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ СОЕДИНЕНИЙ МАРГАНЦА ($4 < h_d < 5$)

В этой области концентраций необходимо рассмотреть переходы между четырехдырочными состояниями со спином 2 и пятидырочными 6S -состояниями со спином 5/2. Эти состояния резонируют между двадцатью пятью четырехдырочными состояниями с полным спином $S = 2$ ($k > n > m > s$):

$$\hat{a}_{k\sigma}^\dagger \hat{a}_{n\sigma}^\dagger \hat{a}_{m\sigma}^\dagger \hat{a}_{s\sigma}^\dagger |0\rangle \quad (S^z = 2\sigma);$$

$$\frac{1}{2} \left(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (S^z = 1),$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}} \left(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger + \right. \\ \left. + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger + \right. \\ \left. + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (S^z = 0),$$

$$\frac{1}{2} \left(\hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\uparrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger + \right. \\ \left. + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n\uparrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n\downarrow}^\dagger \hat{a}_{m\downarrow}^\dagger \hat{a}_{s\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (S^z = -1)$$

и шестью состояниями со спином 5/2:

$$\hat{a}_{1\sigma}^\dagger \hat{a}_{2\sigma}^\dagger \hat{a}_{3\sigma}^\dagger \hat{a}_{4\sigma}^\dagger \hat{a}_{5\sigma}^\dagger |0\rangle \quad \left(S^z = \frac{5}{2}\sigma \right);$$

$$\frac{1}{\sqrt{5}} \left(\hat{a}_{1-\sigma}^\dagger \hat{a}_{2\sigma}^\dagger \hat{a}_{3\sigma}^\dagger \hat{a}_{4\sigma}^\dagger \hat{a}_{5\sigma}^\dagger |0\rangle + \hat{a}_{1\sigma}^\dagger \hat{a}_{2-\sigma}^\dagger \hat{a}_{3\sigma}^\dagger \hat{a}_{4\sigma}^\dagger \hat{a}_{5\sigma}^\dagger |0\rangle + \right. \\ \left. + \hat{a}_{1\sigma}^\dagger \hat{a}_{2\sigma}^\dagger \hat{a}_{3-\sigma}^\dagger \hat{a}_{4\sigma}^\dagger \hat{a}_{5\sigma}^\dagger |0\rangle + \hat{a}_{1\sigma}^\dagger \hat{a}_{2\sigma}^\dagger \hat{a}_{3-\sigma}^\dagger \hat{a}_{4-\sigma}^\dagger \hat{a}_{5\sigma}^\dagger |0\rangle + \right. \\ \left. + \hat{a}_{1\sigma}^\dagger \hat{a}_{2\sigma}^\dagger \hat{a}_{3\sigma}^\dagger \hat{a}_{4\sigma}^\dagger \hat{a}_{5-\sigma}^\dagger |0\rangle \right) \quad \left(S^z = \frac{3}{2}\sigma \right);$$

$$\frac{1}{\sqrt{10}} \left(\hat{a}_{1-\sigma}^\dagger \hat{a}_{2-\sigma}^\dagger \hat{a}_{3\sigma}^\dagger \hat{a}_{4\sigma}^\dagger \hat{a}_{5\sigma}^\dagger |0\rangle + \right. \\ \left. + \hat{a}_{1-\sigma}^\dagger \hat{a}_{2\sigma}^\dagger \hat{a}_{3-\sigma}^\dagger \hat{a}_{4\sigma}^\dagger \hat{a}_{5\sigma}^\dagger |0\rangle + \hat{a}_{1\sigma}^\dagger \hat{a}_{2\sigma}^\dagger \hat{a}_{3\sigma}^\dagger \hat{a}_{4-\sigma}^\dagger \hat{a}_{5-\sigma}^\dagger |0\rangle + \right. \\ \left. + \hat{a}_{1\sigma}^\dagger \hat{a}_{2\sigma}^\dagger \hat{a}_{3-\sigma}^\dagger \hat{a}_{4\sigma}^\dagger \hat{a}_{5-\sigma}^\dagger |0\rangle + \hat{a}_{1\sigma}^\dagger \hat{a}_{2-\sigma}^\dagger \hat{a}_{3\sigma}^\dagger \hat{a}_{4\sigma}^\dagger \hat{a}_{5-\sigma}^\dagger |0\rangle + \right. \\ \left. + \hat{a}_{1-\sigma}^\dagger \hat{a}_{2\sigma}^\dagger \hat{a}_{3\sigma}^\dagger \hat{a}_{4-\sigma}^\dagger \hat{a}_{5\sigma}^\dagger |0\rangle + \hat{a}_{1-\sigma}^\dagger \hat{a}_{2\sigma}^\dagger \hat{a}_{3\sigma}^\dagger \hat{a}_{4-\sigma}^\dagger \hat{a}_{5\sigma}^\dagger |0\rangle + \right. \\ \left. + \hat{a}_{1\sigma}^\dagger \hat{a}_{2-\sigma}^\dagger \hat{a}_{3-\sigma}^\dagger \hat{a}_{4\sigma}^\dagger \hat{a}_{5\sigma}^\dagger |0\rangle \right) \quad \left(S^z = \frac{1}{2}\sigma \right).$$

Для построения аномальной собственно-энергетической части каждому переходу необходимо поставить в соответствие обратный переход со всеми измененными знаками проекций спинов. Принцип построения матрицы аномальной собственно-энергетической части определяется знаками отличных от нуля вершинных частей, изображенных на рис. 1а, 2а:

$$\hat{S}_{\alpha,\beta}^{1,1} = \frac{1 \uparrow 1 \downarrow -}{(2, 3, 4, 5 | 1, 2, 3, 4, 5)} \Bigg| \frac{(1, 2, 3, 4, 5 | 2, 3, 4, 5)}{\hat{W}}. \quad (77)$$

Здесь на диагонали расположена матрица

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & - \\ 0 & 0 & 0 & - & + \\ 0 & 0 & - & + & 0 \\ 0 & - & + & 0 & 0 \\ - & + & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (78)$$

Здесь выписаны матричные элементы, отвечающие матрице $\langle \hat{a}_{1\uparrow} \hat{a}_{1\downarrow} \rangle$. Остальные четыре матрицы $\langle \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{n\downarrow} \rangle$ диагональные по нижним кристаллическим индексам, имеют аналогичный вид.

Отмеченные знаком «минус» значения матричных элементов возникают в случае, когда совпадают индексы четырехдырочных состояний, относящихся к номеру строки и номеру столбца. Отмеченные знаком «плюс» значения матричных элементов возникают в случае, когда совпадают индексы пятидырочных состояний. В случае отсутствия совпадений соответствующая вершинная часть обращается в нуль и поэтому матричный элемент следует считать равным нулю.

На основе этих соображений вычисляем безразмерную константу λ :

$$\lambda = \frac{1}{b^2} \sum b_\alpha^2 b_\beta^2 S_{\alpha,\beta} = -\frac{1}{5}, \quad b^2 = \sum_\alpha b_\alpha^2, \quad (79)$$

где использованы спиновые коэффициенты векторного сложения:

$$b_1 = 1, \quad b_2 = \frac{\sqrt{4}}{\sqrt{5}}, \quad b_3 = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{5}}, \quad (80) \\ b_4 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{5}}, \quad b_5 = \frac{1}{\sqrt{5}}.$$

Эффективная константа определяется через нормированные коэффициенты векторного сложения

$$\Lambda = \frac{\mu}{f} \sum B_\alpha^2 B_\beta^2 S_{\alpha,\beta} = -\frac{\mu}{15f}, \quad (81)$$

где μ — химический потенциал, отсчитываемый от минимального значения энергии квазичастиц, компоненты $B_k = b_k / \sqrt{3}$.

Концевой множитель f есть линейная функция дырочной концентрации h_d : $f = a + bh_d$, где коэффициенты a и b подбираются таким образом, чтобы для целых значений h_d величина f была равной обратной кратности вырождения.

В нашем случае, когда $3 < h_d < 4$, согласно этому определению,

$$f = \frac{h_d - 4}{6} + \frac{5 - h_d}{25}. \quad (82)$$

Как следует из уравнения состояния, записанного для интервала $4 < h_d < 5$,

$$h_d = 4 + 6f_d \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}), \quad \xi_{\mathbf{p}} = fb^2 t_{\mathbf{p}} - \mu, \quad (83) \\ b^2 = \sum_k b_k^2.$$

В точке перехода, где обращается в нуль химический потенциал μ , величина обратного значения концевоего множителя, $(f_c)^{-1} = 31/2$, равна среднеарифметической кратности вырождения между крайними точками выделенного интервала изменения концентрации дырок. Вычисление остальных четырех матриц, диагональных по кристаллическому индексу, приводит к тем же результатам (80), (81).

Определим вершинные части, соответствующие недиагональным гриновским функциям. Рассмотрим, например, таблицу, отвечающую матрицам $\langle \hat{a}_{2\uparrow} \hat{a}_{1\downarrow} \rangle$,

$$\hat{S}_{\alpha,\beta}^{1,2} = \frac{1 \uparrow 2 \downarrow -}{(2, 3, 4, 5 | 1, 2, 3, 4, 5)} \bigg| \begin{array}{c} (1, 2, 3, 4, 5 | 1, 3, 4, 5) \\ \hat{V} \end{array}. \quad (84)$$

В этой матрице наблюдаются совпадения только для пятидырочных состояний $S^z(1, 2, 3, 4, 5)$, что соответствует появлению отталкивательных вершинных частей (со знаком «плюс»). Таким образом, имеем матрицу \hat{V} ,

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (85)$$

Безразмерные недиагональные константы взаимодействия вычисляем по той же схеме, что и диагональные:

$$\lambda_{1,2} = \lambda_{2,1} = \frac{1}{b^2} \sum b_\alpha^2 b_\beta^2 S_{\alpha,\beta}^{(1,2)} = \frac{4}{15}. \quad (86)$$

Эффективная константа определяется через спиновые коэффициенты векторного сложения (80)

$$\Lambda_{1,2} = \frac{\mu}{f} \sum B_\alpha^2 B_\beta^2 S_{\alpha,\beta} = \frac{4\mu}{75f}, \quad (87)$$

где μ — химический потенциал, отсчитываемый от минимального значения энергии квазичастиц.

Заметим, что, как и для области $3 < h_d < 4$, полученная вершинная часть $\lambda_{i \neq k}$ оказалась положительной.

Вычисление остальных 18 недиагональных матриц, соответствующих аномальным средним $\langle \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{n\downarrow} \rangle$ при $k \neq n$, приводит к тем же результатам (86) и (87).

11. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Таким образом удается вычислить константы точечного взаимодействия, которые определяют температуру сверхпроводящего перехода. Записанные в рамках полюсного приближения, эти уравнения имеют вид

$$\bar{\Gamma}_{i=k} = -\lambda_{i=k} \frac{\mu}{f_c} \sum_{\mathbf{p}, n, s} e_\lambda^{(i)}(-\mathbf{p}) e_\lambda^{(i)}(\mathbf{p}) e_\lambda^{(n)}(\mathbf{p}) \times \\ \times e_\lambda^{(s)}(-\mathbf{p}) \frac{1}{\xi_\lambda(\mathbf{p})} \text{th} \left(\frac{\xi_\lambda(\mathbf{p})}{2T_c} \right) \bar{\Gamma}_{n,s}, \quad (88a)$$

$$\bar{\Gamma}_{i \neq k} = -\frac{\mu \lambda_{i \neq k}}{f_c} \times \\ \times \sum_{\mathbf{p}, n, s} \left[e_\lambda^{(i)}(-\mathbf{p}) e_\lambda^{(k)}(\mathbf{p}) + e_\lambda^{(k)}(-\mathbf{p}) e_\lambda^{(i)}(\mathbf{p}) \right] \times \\ \times e_\lambda^{(n)}(\mathbf{p}) e_\lambda^{(s)}(-\mathbf{p}) \frac{1}{\xi_\lambda(\mathbf{p})} \text{th} \left(\frac{\xi_\lambda(\mathbf{p})}{2T_c} \right) \bar{\Gamma}_{n,s}. \quad (88b)$$

Здесь $e_\lambda^{(i)}(\mathbf{p})$ — единичные векторы поляризации (19), соответствующие собственному значению $\epsilon_\lambda(\mathbf{p})$, которые определяют энергию возбуждений $\xi_\lambda(\mathbf{p}) = f b^2 \epsilon_\lambda(\mathbf{p}) - \mu$.

Остальные величины сведены в табл. 1.

В нижней строке таблицы указаны области существования сверхпроводящего упорядочения, которое возникает при положительных значениях химического потенциала, когда можно не учитывать недиагональных взаимодействий. При этих условиях получаем уравнения типа БКШ с известной константой $\lambda = \lambda_{i=k}$:

$$1 = -\lambda_{i=k} \sum_{\mathbf{p}} \frac{t_{\mathbf{p}}}{E_{\mathbf{p}}} \text{th} \left(\frac{E_{\mathbf{p}}}{2T_c} \right), \quad (89) \\ E_{\mathbf{p}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{p}}^2 + \Delta^2},$$

где $\xi_{\mathbf{p}} = b^2 f t_{\mathbf{p}} - \mu$, а величины f , b^2 и λ определены для каждого целочисленного интервала изменения дырочной концентрации h_d (см. табл. 1).

Если в общем уравнении (89) положить $\Delta = 0$, то получим уравнение для нахождения температуры перехода (78a):

$$1 = -\frac{\lambda \mu}{b^2 f} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\xi_{\mathbf{p}}} \text{th} \left(\frac{\xi_{\mathbf{p}}}{2T_c} \right). \quad (90)$$

Отсюда с помощью введения плотности состояний $\nu_0(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{p}})$ находим температуру сверхпроводящего перехода:

Таблица 1

$\downarrow \rightarrow$	$1 < h_d < 2$	$2 < h_d < 3$	$3 < h_d < 4$	$4 < h_d < 5$
f	$(5 - 2h_d)/30$	$(6 - h_d)/120$	$(3h_d - 4)/200$	$(17h_d - 65)/120$
b^2	$3/2$	2	$5/2$	3
$\lambda_{i=k} (= \lambda)$	$-1/2$	$-1/3$	$-1/4$	$-1/5$
$\lambda_{i \neq k}$	$-11/24$	$-1/6$	$1/16$	$4/15$
f_c^{-1}	20	35	$65/2$	$35/2$
$ \lambda_i /(b^2 f_c)$	$20/3$	$35/6$	$13/20$	$7/6$
Область	$1.75 < h_d < 2$	$18/7 < h_d < 3$	$44/13 < h_d < 4$	$130/31 < h_d < 5$

Таблица 2

$\downarrow \rightarrow$	$1 < n_t < 2$	$2 < n_t < 3$	$1 < n_e < 2$
f	$(4 - n_t)/18$	$(5 - n_t)/36$	$(2 - n_e)/12$
b^2	$3/2$	2	$3/2$
$\lambda_{i=k}$	$-1/2$	$-1/3$	$-1/2$
$\lambda_{i \neq k}$	$-1/4$	$2/9$	$1/6$
f_c^{-1}	$13/2$	$49/6$	$7/2$
$ \lambda_i /(b^2 f_c)$	$13/6$	$49/36$	$7/6$
Область	$16/13 < n_t < 2$	$102/49 < n_t < 3$	$10/7 < n_e < 2$

$$T_c = \bar{\epsilon} \exp\left(-\frac{1}{\Lambda_{BCS}}\right), \quad (91)$$

$$\Lambda_{BCS} = \frac{|\lambda\mu|}{b^2 f} \nu_0 \left(\frac{\mu}{fb^2}\right),$$

причем решение справедливо при условии $\lambda\mu < 0$.

В более сложном случае, когда поверхность Ферми пересекают ветви, принадлежащие нескольким состояниям, для нахождения температуры сверхпроводящего перехода необходимо рассматривать систему уравнений (88).

В случае двух перекрывающихся зон условие разрешимости этой системы имеет простой вид:

$$1 = -\frac{\mu}{fb^2} \left\{ \sum_{\mathbf{p}, \lambda=\pm} [\lambda_1 u_\lambda^4(\mathbf{p}) + \lambda_2 v_\lambda^4(\mathbf{p}) + 2\lambda_{1,2} u_\lambda^2(\mathbf{p}) v_\lambda^2(\mathbf{p})] \frac{1}{\xi_\lambda(\mathbf{p})} \text{th}\left(\frac{\xi_\lambda(\mathbf{p})}{2T_c}\right) \right\}, \quad (92)$$

где энергия возбуждений зависит от плотности через конечной множитель f :

$$\xi_\pm(\mathbf{p}) = \frac{fb^2}{2} \left[t_1(\mathbf{p}) + t_2(\mathbf{p}) \pm \sqrt{(t_1(\mathbf{p}) - t_2(\mathbf{p}))^2 + 4|t_{12}(\mathbf{p})|^2} \right] - \mu, \quad (93)$$

а векторы поляризации могут быть вычислены для «пустой» решетки:

$$u_\pm^2(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{t_1(\mathbf{p}) - t_2(\mathbf{p})}{\sqrt{(t_1(\mathbf{p}) - t_2(\mathbf{p}))^2 + 4|t_{12}(\mathbf{p})|^2}} \right], \quad (94)$$

$$v_\pm^2(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \left[1 \mp \frac{t_1(\mathbf{p}) - t_2(\mathbf{p})}{\sqrt{(t_1(\mathbf{p}) - t_2(\mathbf{p}))^2 + 4|t_{12}(\mathbf{p})|^2}} \right].$$

Рассмотрение низкоспиновых состояний, когда заполняются t_{2g} - или e_g -оболочки, приводит к каче-

ственно аналогичным результатам, которые собраны в табл. 2.

Предлагаемая модель инвариантна относительно частично-дырочного преобразования. Для высокоспиновых состояний необходимо использовать замену числа дырок h_d на число частиц $n_d = 10 - h_d$. Для низкоспиновых состояний следует произвести замену числа частиц n_t на число дырок $h_t = 6 - n_t$ (или замену n_e на $h_e = 4 - n_e$).

Основной результат настоящей работы состоит в возможности обнаружения сверхпроводимости в системах с отличным от нуля значением полного спинового момента. При этом число независимых компонент определяется количеством различных одночастичных переходов, различающихся разным значением проекции спина. Показано, что внутри каждого целочисленного интервала изменения среднего числа дырок происходит изменение знака амплитуды рассеяния для возбуждений с противоположным спином. При этом для каждого целочисленного интервала сверхпроводимость существует для ограниченного интервала концентраций.

В рамках полюсного приближения удастся доказать, что уравнения сверхпроводимости имеют обычный вид с безразмерными константами $\lambda_{i,k}$, которые были вычислены как для высокоспиновых, так и для низкоспиновых состояний (табл. 1, 2). При этом эффективная константа БКШ (Λ_{BCS}) определяется как произведение соответствующей константы λ на безразмерный химический потенциал и на плотность состояний, вычисленную на поверхности Ферми. Все полученные результаты основаны на возможности вычисления многокомпонентной амплитуды рассеяния и дальнейшего анализа уравнений Дайсона–Горькова.

Необходимо отметить, что в литературе имеются попытки получения уравнений сверхпроводимо-

сти на основе учета поляризационных эффектов в частично-дырочном канале [9–11] и использования энергии Хаббарда U в качестве подгоночного параметра. Однако можно показать, что при наличии сильного электрон-электронного отталкивания соответствующий вклад может быть оценен по теории возмущений и не дает новых качественных результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки (грант № РН ПВШ 2.1.1/13789).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. G. Bednoz and K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
2. F. Ma and Z. Y. Lu, *Phys. Rev. B* **78**, 033111 (2008).
3. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **276**, N1363, 238 (1963).
4. R. O. Zaitsev, *Phys. Lett. A* **134**, 199 (1988).
5. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **123**, 325 (2003).
6. Р. О. Зайцев, *Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма*, Изд-во УРСС, Москва (2004).
7. Р. О. Зайцев, *Письма в ЖЭТФ* **92**, 47 (2010).
8. Л. П. Горьков, *ЖЭТФ* **34**, 735 (1958).
9. Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев, *Высокотемпературные сверхпроводники на основе FeAs-соединений*, Изд-во R&C Dynamics, Ижевск–Москва (2010).
10. T. Takimoto, *Phys. Rev. B* **62**, 14641 (2000).
11. T. Takimoto, T. Hotta, and K. Ueda, *Phys. Rev. B* **69**, 104504 (2004).