

СПИНОВЫЕ ФЛУКТУАЦИИ И СВЕРХПРОВОДЯЩЕЕ СОСТОЯНИЕ В ЛЕГИРОВАННЫХ ДИЭЛЕКТРИКАХ

А. И. Агафонов, Э. А. Манькин*

*Институт сверхпроводимости и физики твердого тела
Российского научного центра «Курчатовский Институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 23 июля 1997 г.

Предложена модель спаривания электронов через спиновые флуктуации в легированных диэлектриках. Затравочные состояния для образующегося конденсата в сверхпроводящем состоянии соответствуют примесным зонам в исходной диэлектрической щели нелегированного материала. Получена замкнутая система уравнений для сверхпроводящего состояния. Показано, что возможно спаривание фермионов в примесных зонах пространственных состояний и, соответственно, возникновение сверхпроводимости, если имеет место образование локализованных бозонов со спином 0. Последнее обязательно сопровождается наличием локализованных бозонов со спином 1, что обуславливает взаимную связь между синглетным и триплетным каналами спаривания квазичастиц.

1. ВВЕДЕНИЕ

С момента открытия высокотемпературной сверхпроводимости и вплоть до настоящего времени ведутся чрезвычайно обширные экспериментальные и теоретические исследования этого явления. Однако до сих пор остаются невыясненными не только механизм спаривания в сверхпроводящем состоянии, но и происхождение носителей заряда в нормальном состоянии легированных купратов. Также остается неустановленным, являются ли идентичными механизмы сверхпроводимости в 3D-оксидах на основе Bi ($Ba_{1-x}K_xBiO_{3-y}$ и др.) и в слоистых оксидах на основе Cu (p -типа $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, $YBa_2Cu_3O_{7-x}$, др. и n -типа $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4-x}$).

Исходные купраты имеют, как правило, антиферромагнитное диэлектрическое состояние. Известно [1, 2], что при малых концентрациях примеси замещения магнитная фаза исчезает. При дальнейшем увеличении концентрации примеси материал переходит в металлическую фазу с относительно низкой проводимостью и высокой температурой сверхпроводящего перехода. Проведенные исследования показали, что ВТСП-материалы относятся к классу легированных диэлектриков и влияние примесей на фазовые переходы является определяющим [2, 3].

Купраты обладают необычными анизотропными свойствами в диэлектрической, металлической и сверхпроводящей фазах [1–4]. Полученные экспериментальные закономерности стимулировали развитие различных подходов в описании свойств этих материалов. Эти подходы можно разделить на две группы.

После того как было получено, что подвижности носителей заряда в купратах сравнимы с критерием Мотта–Июффе–Регеля (ea^2/\hbar), стало ясно, что эффекты локализации

*E-mail: aai@issph.kiae.ru

играют в этих системах важную роль [5]. Первая группа подходов использует тот факт, что, согласно экспериментальным данным, уровень Ферми расположен в электронных состояниях, которые создаются при легировании в диэлектрической щели материала, например, в щели, обусловленной переносом заряда, между $O2p$ - и $Cu3d$ -зонами в купратах [1, 4, 6–11]. Образование этих примесных состояний, известных как *in-gap states*, присуще всем допированным соединениям [1]. Характерные спектральные особенности наблюдались как в оптической проводимости [12, 13], так и в электронной спектроскопии [8–11, 14]. При использовании угловой фотоэлектронной спектроскопии было установлено, что локализованные и распространенные электронные состояния сосуществуют на уровне Ферми и могут давать вклад в формирование сверхпроводящей щели [15].

Если исходить из того, что в легированных купратах имеет место пиннинг уровня Ферми в примесных состояниях, то сверхпроводящая щель должна открываться внутри диэлектрической щели. Тогда обнаруженный пик проводимости при нулевом смещении в туннельных экспериментах [16] и отсутствие проявления сверхпроводящей щели в оптических спектрах при очень низких энергиях фотонов [17] (в противоположность БКШ сверхпроводникам) следует рассматривать как проявления этих состояний. В предположении того что природа этих состояний обусловлена поляронами [18, 19], примесными комплексами [20] или бистабильными примесными центрами захвата [21], построены теории, объясняющие свойства высокотемпературных сверхпроводников, основанные на теории ферми-жидкости, теории БКШ (не только с фононным механизмом спаривания квазичастиц) и квантовой перколяционной теории.

С другой стороны, многие исследователи, высказывая сомнение в возможности использования этих концепций для описания свойств купратов, связывают происхождение высокотемпературной сверхпроводимости с возможными сильными электронными корреляциями в материалах [1, 3, 22–27]. Этот второй подход основывается на наиболее распространенном предположении, что высокотемпературная сверхпроводимость обусловлена процессами, происходящими в CuO_2 -плоскостях. При этом остальные промежуточные слои купратов рассматриваются как резервуары носителей заряда для CuO_2 -плоскостей. Это предположение может оказаться справедливым, если только уровень Ферми в легированных купратах расположен в той части электронного спектра, плотность состояний которой определяется CuO_2 -плоскостью [1]. Поскольку известные экспериментальные результаты указывают на важность спиновых флуктуаций в легированных системах (см., например, [1, 23, 28]), нам представляется важным указать на результаты работ [29, 30] по изучению механизма спаривания, вызванного спин-спиновым взаимодействием носителей заряда в CuO_2 -плоскостях.

Отметим, что в моделях сильных электронных корреляций в CuO_2 -плоскостях хотя и может возникать спектральная электронная плотность в области диэлектрической щели, однако неизменным является движение уровня Ферми через диэлектрическую щель при переходе от дырочного легирования к электронному (см. [1] и ссылки в ней). В то же время экспериментальные данные показывают близость уровней Ферми в дырочном и электронном проводниках, хотя величина диэлектрической щели является большой (1.5–2 эВ) [4].

Мы считаем, что наряду с детальным исследованием механизма сверхпроводимости по CuO_2 -плоскостям в легированных купратах, следует проводить изучение разных возможностей образования сверхпроводящего состояния. Здесь мы, в первую очередь, имеем в виду известные исследования по поиску сверхпроводимости в полупроводни-

ках [31] и электронных механизмов сверхпроводимости в сплавах [32]. Еще в работе [33] не исключалась возможность сверхпроводимости в вырожденных легированных полупроводниках. Теперь представляется актуальным проанализировать эту возможность и, в частности, рассмотреть сверхпроводимость в примесных зонах в отсутствие трансляционной симметрии с учетом важной роли гибридизации и кулоновских корреляций на примесных орбиталях. Это изучение важно для поиска новых сверхпроводящих соединений не обязательно на основе $2D$ -проводимости в плоскостях.

В настоящей работе представлена модель сверхпроводимости по примесным зонам в легированном диэлектрике, обладающем изначально зонным электронным спектром. Мы предполагаем, что в легированных диэлектриках уровень Ферми может захватываться примесными состояниями глубоко в исходной диэлектрической щели нелегированного материала. Тогда сверхпроводящая щель должна открываться внутри диэлектрической щели. Состояния, которые являются затравочными для образующегося конденсата в сверхпроводящем состоянии, должны соответствовать примесным зонам. Этот подход не исключает возможности применить его и для ВТСП-материалов.

Ранее мы рассматривали модель образования примесных зон локализованных и делокализованных (распространенных) состояний в легированных диэлектриках, в которой электронные корреляции имели место только на примесных орбиталях [34, 35]. Было показано, что эти узкие примесные зоны распространенных состояний в исходной диэлектрической щели возникают из-за гибридизации, которая приводит к виртуальным одноэлектронным переходам по примесному ансамблю: исходный примесный узел \rightarrow зонное состояние \rightarrow другой узел \rightarrow зонное состояние и т. д. В самосогласованном приближении Хартри-Фока мы показали, что в такой системе имеет место квантовый переход диэлектрик \rightarrow металл при увеличении концентрации примеси. Однако в этом приближении не учитываются спиновые флуктуации в электронно-коррелированной системе.

Мы полагаем, что происхождение сверхпроводящего состояния может определяться спиновыми флуктуациями в легированной системе. Это коррелирует с известными экспериментальными результатами, указывающими на важность спиновых флуктуаций в легированных системах. В работе предлагается модельный гамильтониан для нормального и сверхпроводящего состояний. Будет получена замкнутая система уравнений для нормальных и аномальных функций Грина. Мы покажем, что эта система содержит несколько параметров порядка, которые определяют состояние легированного материала. Спиновым флуктуациям в системе отвечают два различных типа этих параметров. Один из них, связанный с нормальными функциями Грина для локализованных состояний, изначально проявляется в свойствах диэлектрического и металлического состояний легированного материала. В то же время другой тип параметров порядка, связанный с аномальными функциями Грина, недиагональными по спиновым переменным и диагональными по примесным узлам, может приводить к новому нефононному каналу спаривания квазичастиц глубоко в исходной диэлектрической щели.

2. МОДЕЛЬ

Возникновение примесных состояний, обусловленных примесью замещения, является типичным для легированных диэлектриков. При введении примеси замещения, например, в $Ba_{1-x}K_xBiO_3$ атомы Ba^{2+} в узлах кристаллической решетки случайным

образом замещаются атомами K^{1+} . Валентный электрон К идет на образование валентных связей и, следовательно, можно ожидать возникновения однократно заполненной примесной орбитали акцепторного типа.

Принимая во внимание кулоновские корреляции на исходных примесных орбиталях, гамильтониан для легированного диэлектрика представим в виде

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{j\sigma} \epsilon_0 a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{j\sigma} U n_{j\sigma} n_{j,-\sigma} + \sum_{j,\mathbf{k}\sigma} \{V_{\mathbf{k}j} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{j\sigma} + \text{H.c.}\}, \quad (1)$$

где $a_{\mathbf{k}\sigma}$ и $a_{j\sigma}$ — обычные операторы уничтожения соответственно для исходного зонного состояния диэлектрика и для примесной орбитали с номером j ; $\sigma = \pm(1/2)(\uparrow, \downarrow)$ — спиновый индекс; \mathbf{k} — трехмерный волновой вектор электрона в зонном состоянии с энергией $\epsilon_{\mathbf{k}}$; ϵ_0 — энергия примесной орбитали; $V_{\mathbf{k}j}$ — матричный элемент гибридизации; U — затравочный параметр внутрицентрового взаимодействия электронов на примесной орбитали.

Возможность применения (1) для легированных купратов связана со следующим. При введении примеси замещения, например, в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ атомы La^{3+} в слоях LaO случайным образом замещаются атомами Sr^{2+} . Оба валентных электрона Sr идут на образование валентных связей и, следовательно, можно ожидать возникновения однократно заполненной примесной орбитали акцепторного типа. Купратный слой CuO_2 в этом соединении находится между двумя промежуточными слоями состава $\text{La}_{1-x/2}\text{M}_{x/2}\text{O}$. Поскольку центры примесных орбиталей расположены вне CuO_2 -плоскости, взаимодействие примесных орбиталей с зонными состояниями CuO_2 -плоскости приведет к гибридизации между ними. Здесь, для простоты, ограничимся однозонным приближением для плотности состояний в CuO_2 -плоскости. При учете сильной анизотропии физических характеристик купратов гамильтониан для одной структурной ячейки, не связанной с другими ячейками переносом заряда вдоль оси $c(z)$, можно представить в виде (1) в двумерном пространстве для соответствующих волновых векторов.

Структура Nd_2CuO_4 является подобной La_2CuO_4 за исключением позиций атомов O вне CuO_2 -плоскостей. При «электронном легировании» замещение атомов Nd^{3+} атомами Ce^{4+} должно приводить к возникновению однократно заполненного донорного уровня в $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. В случае $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ избыточные атомы кислорода могут занимать междоузельные позиции вблизи CuO_2 -плоскостей. Тогда все валентные электроны атомов O могут принимать участие в формировании примесных зон.

Здесь отметим, что рассмотрение примесных центров, которые захватывают уровень Ферми и расположены между купратными плоскостями, но не в них, проводилось в [21] для легированных купратов.

Решение (1) в приближении Хартри–Фока дает довольно сложную структуру примесных зон локализованных и делокализованных (распространенных) электронных состояний в диэлектрической щели. Было показано, что динамика этой структуры примесных зон в зависимости от концентрации примеси определяет фазовый переход диэлектрик–металл. Причем для диэлектриков с более узкими разрешенными блоховскими зонами этот переход имеет место при меньших концентрациях примеси. Далее проводится решение гамильтониана (1), которое отвечает сверхпроводящему состоянию системы. Мы покажем, что именно спиновые флуктуации могут привести к образованию сверхпроводящей фазы в легированном материале. Здесь это делается при нулевой температуре.

3. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ГРИНОВСКИХ ФУНКЦИЙ

Введем нормальные функции Грина (ФГ):

$$G_{\eta\eta}^{\sigma\sigma_1}(t, t_1) = -i\langle N_{\sigma_1, -\sigma} | T \bar{a}_{\eta\sigma}(t) \bar{a}_{\eta\sigma_1}^+(t_1) | N_0 \rangle$$

и аномальные ФГ:

$$F_{\eta\eta}^{(+)\sigma\sigma_1}(t, t_1) = \exp(-2i\mu t) \langle (N+2)_{\sigma+\sigma_1} | T \bar{a}_{\eta\sigma}^+(t) \bar{a}_{\eta\sigma_1}^+(t_1) | N_0 \rangle,$$

$$F_{\eta\eta}^{\sigma\sigma_1}(t, t_1) = \exp(2i\mu t) \langle N_0 | T \bar{a}_{\eta\sigma}(t) \bar{a}_{\eta\sigma_1}(t_1) | (N+2)_{\sigma+\sigma_1} \rangle,$$

где использованы операторы в гайзенберговском представлении с гамильтонианом (1); η принимает значения k или j ; μ — химический потенциал системы. Усреднение проводится по основным состояниям системы с полными числами частиц N и $N+2$ [36]. Нижний индекс у основных состояний $|N_{\sigma_1, -\sigma}\rangle$ и $|(N+2)_{\sigma+\sigma_1}\rangle$ указывает на наличие избыточных спинов при заданном полном числе частиц по сравнению со спиновым состоянием в $|N_0\rangle$ и $|(N+2)_0\rangle$.

Здесь отметим следующее. Среди введенных выше ФГ имеется, например, аномальная гриновская функция $F_{jj}^{(+)\uparrow\uparrow}$. Возникновение этой ФГ для гамильтониана (1) не противоречит принципу Паули. Дело в том, что мы рассматриваем систему взаимодействующих ферми-частиц. Поэтому действие оператора $\bar{a}_{j\uparrow}^+(t)$ на $|N\rangle$ не приводит к изменению заполнения конкретного узельного состояния на единицу. Среднее число заполнения какого-либо локализованного (узельного) состояния может принимать значения существенно меньше единицы. Это принципиально отличается от любой системы невзаимодействующих частиц, когда числа заполнения могут принимать значения либо 0, либо 1.

Используя уравнения движения для гайзенберговских операторов с учетом (1), мы получаем систему уравнений для введенных ФГ:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_k\right) G_{k\eta}^{\sigma\sigma_1}(t, t_1) = \delta_{k\eta} \delta_{\sigma\sigma_1} \delta(t-t_1) + \sum_j V_{kj} G_{j\eta}^{\sigma\sigma_1}(t-t_1), \quad (2)$$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon_k - 2\mu\right) F_{k\eta}^{(+)\sigma\sigma_1}(t-t_1) = - \sum_j V_{jk} F_{j\eta}^{(+)\sigma\sigma_1}(t-t_1), \quad (3)$$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_0\right) G_{j\eta}^{\sigma\sigma_1}(t-t_1) = \delta_{j\eta} \delta_{\sigma\sigma_1} \delta(t-t_1) + \sum_k V_{jk} G_{k\eta}^{\sigma\sigma_1}(t-t_1) + K_{jj\eta}^{\sigma, -\sigma, -\sigma, \sigma_1}(t, t_1), \quad (4)$$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon_0 - 2\mu\right) F_{j\eta}^{(+)\sigma\sigma_1}(t-t_1) = - \sum_k V_{kj} F_{k\eta}^{(+)\sigma\sigma_1}(t-t_1) - H_{jj\eta}^{\sigma, -\sigma, -\sigma, \sigma_1}(t, t_1). \quad (5)$$

Здесь для возникающих двухчастичных ФГ использованы обозначения:

$$K_{jj\eta}^{\sigma, -\sigma, -\sigma, \sigma_1}(t, t_1) = -iU \langle N_{\sigma_1, -\sigma} | T \bar{a}_{j\sigma}(t) \bar{a}_{j, -\sigma}^+(t) \bar{a}_{j, -\sigma}(t) \bar{a}_{\eta\sigma_1}^+(t_1) | N_0 \rangle, \quad (6)$$

$$H_{jj\eta}^{\sigma, -\sigma, -\sigma, \sigma_1}(t, t_1) = U \exp(-2i\mu t) \langle (N+2)_{\sigma+\sigma_1} | T \bar{a}_{j\sigma}^+(t) \bar{a}_{j, -\sigma}^+(t) \bar{a}_{j, -\sigma}(t) \bar{a}_{\eta\sigma_1}^+(t_1) | N_0 \rangle. \quad (7)$$

В правых частях (6) и (7) перейдем к представлению взаимодействия с оператором взаимодействия

$$H_{int}(\tau) = H_{int}^c(\tau) + H_{int}^g(\tau),$$

где $H_{int}^c(\tau)$ и $H_{int}^g(\tau)$ задаются соответственно двумя последними членами в (1) с заменой операторов $a_{\eta\sigma}$ и $a_{\eta\sigma}^+$ в шредингеровском представлении на операторы $a_{\eta\sigma}(t)$ и $a_{\eta\sigma}^+(t)$ в представлении взаимодействия. Невозмущенный гамильтониан определяется двумя первыми членами в (1). В результате получим:

$$K_{jj\eta}^{\sigma,-\sigma,-\sigma,\sigma_1}(t, t_1) = -iU \langle N_{\sigma_1-\sigma} | T[S(\infty) a_{j\sigma}(t) a_{j,-\sigma}^+(t) a_{j,-\sigma}(t) a_{\eta\sigma_1}^+(t_1)] | N_0 \rangle_c, \quad (8)$$

и

$$H_{jj\eta}^{\sigma,-\sigma,-\sigma,\sigma_1}(t, t_1) = U \exp(-2i\mu t) \times \\ \times \langle (N+2)_{\sigma_1+\sigma} | T[S(\infty) a_{j\sigma}^+(t) a_{j,-\sigma}^+(t) a_{j,-\sigma}(t) a_{\eta\sigma_1}^+(t_1)] | N_0 \rangle_c, \quad (9)$$

где учитываются только связанные диаграммы, что отмечено индексом c .

Все связанные диаграммы в (8) и (9) можно разделить на две группы. К одной из них принадлежат диаграммы, которые соответствуют всевозможным спариваниям четырех операторов в гайзенберговском представлении в правых частях (6) и (7). Переходя в представление взаимодействия, для (6) получаем

$$\begin{aligned} & -iU \langle N_{\sigma_1-\sigma} | T[S(\infty) a_{j\sigma}(t) a_{j,-\sigma}^+(t)] | N_{\sigma_1+\sigma} \rangle_c \times \\ & \times \langle N_{\sigma_1+\sigma} | T[S(\infty) a_{j,-\sigma}(t) a_{\eta\sigma_1}^+(t_1)] | N_0 \rangle_c, + \\ & +iU \langle N_{\sigma_1-\sigma} | T[S(\infty) a_{j\sigma}(t) a_{j,-\sigma}(t)] | (N+2)_{\sigma_1-\sigma} \rangle_c \times \\ & \times \langle (N+2)_{\sigma_1-\sigma} | T[S(\infty) a_{j,-\sigma}^+(t) a_{\eta\sigma_1}^+(t_1)] | N_0 \rangle_c, - \\ & -iU \langle N_{\sigma_1-\sigma} | T[S(\infty) a_{j\sigma}(t) a_{\eta\sigma_1}^+(t_1)] | N_0 \rangle_c \times \\ & \times \langle N_0 | T[S(\infty) a_{j,-\sigma}^+(t) a_{j,-\sigma}(t)] | N_0 \rangle_c, \end{aligned}$$

что по определению есть

$$iUG_{jj}^{\sigma,-\sigma}(0^+)G_{j\eta}^{-\sigma,\sigma_1}(t, t_1) + iUF_{jj}^{\sigma,-\sigma}(0^+)F_{j\eta}^{(+)-\sigma,\sigma_1}(t, t_1) - iUG_{jj}^{-\sigma,-\sigma}(-0^+)G_{j\eta}^{\sigma,\sigma_1}(t, t_1). \quad (10)$$

Аналогично, для (7) получаем

$$\begin{aligned} & iUF_{jj}^{(+)\sigma,-\sigma}(0^+)G_{j\eta}^{-\sigma,\sigma_1}(t, t_1) + iUG_{jj}^{-\sigma,\sigma}(0^+)F_{j\eta}^{(+)-\sigma,\sigma_1}(t, t_1) - \\ & - iUG_{jj}^{-\sigma,-\sigma}(-0^+)F_{j\eta}^{(+)\sigma,\sigma_1}(t, t_1). \end{aligned} \quad (11)$$

Диаграммы для (10) и (11) показаны соответственно на рис. 1а и 1б. Здесь тонкая линия соответствует $G_{jj}^{(0)\sigma\sigma}$, волнистая линия отвечает iU . Первые две диаграммы для (10) и (11) связаны с внутриузельным взаимодействием, сопровождающимся переворотом спинов частиц, а последние петельные диаграммы имеют хартри-фокковское происхождение и приводят к перенормировке затравочного уровня энергии примесной орбитали ϵ_0 .

Другая группа представляет совокупность всех диаграмм, в которых при разложении S -матрицы по $H_{int}(\tau)$ и использовании теоремы Вика любой из четырех операторов, стоящих после S -матрицы в (8) и (9), спаривается только с операторами из этого

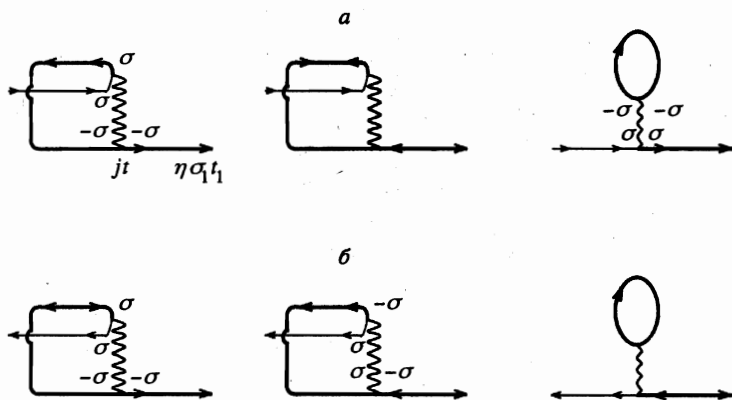


Рис. 1.

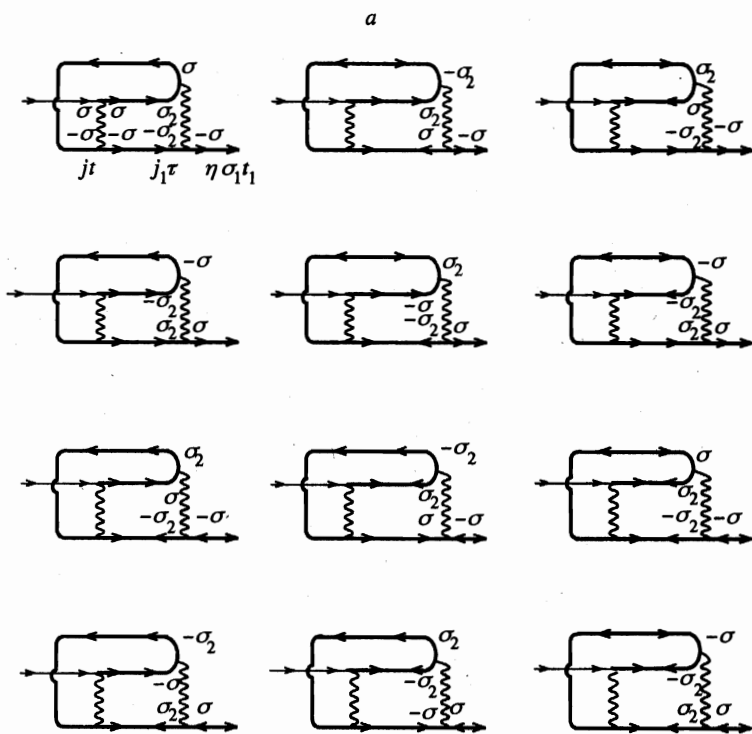


Рис. 2.

разложения S -матрицы. Поскольку резонансное рассеяние (гибридизация) $H_{int}^g(\tau)$ содержит только пару операторов, диаграммы, соответствующие первому порядку разложения S -матрицы по $H_{int}^g(\tau)$, уже учтены (10) и (11). Для (8) и (9) в первом порядке по $H_{int}^c(\tau)$ мы получаем по 24 простейших диаграммы из этой второй группы. Частичное суммирование более сложных диаграмм приводит к замене затравочных ФГ на полные. В результате для $K_{jjj\eta}^{\sigma, -\sigma, -\sigma, \sigma_1}(t, t_1)$ получаем диаграммы, показанные на рис. 2. Каждой волнистой линии соответствует iU . Проводится суммирование по j_1, σ_2 и интегрирование по τ . Перед получившимся выражением ставится множитель $(-1)^{\sigma-\sigma_2}$. Соответствующие диаграммы для $H_{jjj\eta}^{\sigma, -\sigma, -\sigma, \sigma_1}(t, t_1)$ мы здесь не приводим. Они имеют структуру, схожую с диаграммами на рис. 2. Однако входящую тонкую линию в узел j , $G_{jj}^{(0)\sigma\sigma}(t)$, следует заменить на выходящую, $G_{jj}^{(0)\sigma\sigma}(-t)$, и соединенные с ней средние линии, $G_{jj}(t, \tau)$ и $F_{jj}(t, \tau)$, следует заменить на полные ФГ, $G_{jj}(t, \tau)$ и $F_{jj}^{(+)}(t, \tau)$. Правила для вычисления диаграмм те же.

Во втором порядке разложения S -матрицы по $H_{int}(\tau)$ мы получим для (8) и (9) T -средние от операторов со вторым порядком по $H_{int}^g(\tau)$, с произведением $H_{int}^g(\tau_1)$ и $H_{int}^c(\tau_2)$, а также со вторым порядком по $H_{int}^c(\tau)$. Заметим, что T -среднее со вторым порядком по гибридации приводит к диаграммам, которые уже учтены в (10) и (11). Далее, T -среднее с произведением $H_{int}^g(\tau_1)$ и $H_{int}^c(\tau_2)$ приводит к диаграммам, часть которых учтена в (10) и (11) или в диаграммах на рис. 1, а другая часть учитывается при частичном суммировании для диаграмм на рис. 2. Эта ситуация имеет место и в более высоких порядках приближения. Только в T -среднем со вторым порядком по $H_{int}^c(\tau)$ появляются новые связанные и топологически различные диаграммы, содержащие три волнистые линии. После частичного суммирования более сложных диаграмм затравочные ФГ можно заменить на полные ФГ.

Легко видеть, что в уравнении (4), выписанном, например, для $G_{jk}^{\uparrow\uparrow}$, двухчастичной ФГ $K_{jjjk}^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}(t, t_1)$ будет соответствовать совокупность диаграмм, которые начинаются с тонкой линии $G_{jj}^{(0)\uparrow\uparrow}(t)$ и заканчиваются полными ФГ $G_{jk}^{\uparrow\uparrow}(\tau, t_1)$, $G_{jk}^{\downarrow\downarrow}(\tau, t_1)$, $F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow}(\tau, t_1)$, $F_{jk}^{(+)\downarrow\downarrow}(\tau, t_1)$ (по τ проводится интегрирование и суммирование по j_1). Это позволяет ввести вершинные части, с помощью которых двухчастичные ФГ представимы в виде

$$K_{jjj\eta}^{\sigma, -\sigma, -\sigma, \sigma_1}(t, t_1) = \sum_{j_1, \sigma_2} \int d\tau A_{jj_1}^{\sigma, \sigma_2}(t, \tau) G_{j_1\eta}^{\sigma_2, \sigma_1}(\tau, t_1) + \sum_{j_1, \sigma_2} \int d\tau B_{jj_1}^{\sigma, \sigma_2}(t, \tau) F_{j_1\eta}^{(+)\sigma_2, \sigma_1}(\tau, t_1) \quad (12)$$

и

$$H_{jjj\eta}^{\sigma, -\sigma, -\sigma, \sigma_1}(t, t_1) = \sum_{j_1, \sigma_2} \int d\tau C_{jj_1}^{\sigma, \sigma_2}(t, \tau) G_{j_1\eta}^{\sigma_2, \sigma_1}(\tau, t_1) + \sum_{j_1, \sigma_2} \int d\tau D_{jj_1}^{\sigma, \sigma_2}(t, \tau) F_{j_1\eta}^{(+)\sigma_2, \sigma_1}(\tau, t_1). \quad (13)$$

Вычисление A, B, C, D может быть осуществлено путем суммирования диаграмм. Примеры таких диаграмм приведены на рис. 1 и 2. Причем гибридизация учтена в полных ФГ, что непосредственно видно из (2)–(5).

Систему уравнений (2)–(5), (10)–(13) следует дополнить уравнением для химического потенциала системы μ :

$$N_t + N_{im} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\mu} d\omega \operatorname{Im} \operatorname{Tr} G(\omega), \quad (14)$$

где N_t — полное число электронов в исходной зоне диэлектрика (для определенности, в валентной зоне диэлектрика или CuO_2 -плоскости, легирование — дырочное); N_{im} — концентрация атомов замещения. Здесь принято, что примесный уровень является однократно заполненным.

Теперь обсудим параметры порядка, имеющиеся в рассматриваемой модели. Петельные части в последних членах (10) и (11) (см. рис. 1) представляют перенормировку узельных ФГ за счет внутриузельных кулоновских корреляций в приближении Хартри-Фока. Эта перенормировка определяется средними числами заполнения локализованных орбиталей, которые представимы в виде

$$G_{jj}^{\sigma\sigma}(-0^+) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \int \frac{d\omega}{2\pi} G_{jj}^{\sigma\sigma}(\omega) \exp(i\omega t) = i \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\mu} d\omega \operatorname{Im} G_{jj}^{\sigma\sigma}(\omega) = i A_{j,\sigma}. \quad (15)$$

Поскольку примесные атомы случайным образом занимают эквивалентные узлы кристаллической решетки материала, имеются только следующие возможности:

1) $A_{j,\sigma}$ не зависит от j и σ . Как было показано в [14], этот случай всегда соответствует парамагнитному металлическому состоянию системы в приближении Хартри-Фока.

2) $A_{j,\sigma}$ не зависит от j и $A_{j,\sigma} \neq A_{j,-\sigma}$. Такая ситуация приводит либо к магнитному диэлектрическому, либо магнитному металлическому состояниям системы в приближении Хартри-Фока [14].

3) Для конкретного j_0 реализуется $A_{j_0,\sigma} = A_1$, $A_{j_0,-\sigma} = A_2$ и $A_1 \neq A_2$. Но для ансамбля примеси $A_{j,\sigma}$ как функция j для заданного σ случайным образом принимает либо значение A_1 , либо значение A_2 . Т.е., например, для узла $j_1 \neq j_0$ $A_{j_1,\sigma} = A_2$ и $A_{j_1,-\sigma} = A_1$. Это всегда отвечает парамагнитному решению.

Отметим, что для парамагнитного состояния 3) представляется интересным исследовать фоновый механизм спаривания в узких примесных зонах с высокой плотностью состояний. В случае магнитного металлического состояния системы это было сделано в [35] для триплетного спаривания. Для парамагнитной фазы примесные зоны вырождены по спиновой переменной. Поэтому здесь открывается и синглетный канал спаривания квазичастиц, который важен для купратов.

Кроме того, в системе имеются два различных типа параметров порядка, связанные со спиновыми флуктуациями. Один из них определяется недиагональными по спиновым индексам нормальными функциями Грина для локализованных состояний:

$$G_{jj}^{\sigma-\sigma}(0^+) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \int \frac{d\omega}{2\pi} G_{jj}^{\sigma-\sigma}(\omega) \exp(-i\omega t) = i\lambda_j \quad (16)$$

и, соответственно,

$$G_{jj}^{-\sigma\sigma}(0^+) = -\left(G_{jj}^{\sigma-\sigma}(0^+)\right)^* = i\lambda_j^*.$$

Легко видеть, что для нормального состояния системы влияние спиновых флуктуаций описывается именно величиной λ .

Возможность сверхпроводящего состояния системы связана с аномальными ФГ. Здесь важен параметр порядка, который определяется недиагональными по спиновым переменным узельными ФГ $F_{jj}^{(+)\sigma, -\sigma}(\omega)$ и $F_{jj}^{\sigma, -\sigma}(\omega)$. Эти функции описывают коррелированное рождение или уничтожение пары локализованных квазичастиц на узле, которую можно рассматривать как локализованный бозон с нулевым спином. Введем обозначение:

$$F_{jj}^{\sigma, -\sigma}(0^+) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \int \frac{d\omega}{2\pi} F_{jj}^{\sigma, -\sigma}(\omega) \exp(-i\omega t) = i\beta_j. \quad (17)$$

Тогда имеем

$$F_{jj}^{-\sigma, \sigma}(0^+) = -i\beta_j, \quad F_{jj}^{(+)\sigma, -\sigma}(0^+) = i\beta_j^*, \quad F_{jj}^{(+)-\sigma, \sigma}(0^+) = -i\beta_j^*.$$

Система интегродифференциальных уравнений (2)–(5), (10)–(17) с учетом диаграмм для вершинных частей математически полностью задана. Эта система является сложной. В конечном счете, важно показать, что возможны решения, отвечающие сверхпроводимости в примесной зоне, когда отсутствует трансляционная симметрия в системе. Своеобразной предтечей этого является образование локализованных бозонов и, соответственно, реализация ненулевого решения (17). Однако затравочное внутриузельное взаимодействие является отталкивающим. Поэтому представляется важным проанализировать перенормировку внутриузельного взаимодействия за счет гибридизации и спиновых флуктуаций. Эта перенормировка определяется введенными выше вершинными частями A, B, C, D . Ниже мы это сделаем в приближении, когда для двухчастичных ФГ учитываются только диаграммы на рис. 1 и в случае 1), когда $A_{j,\sigma}$ не зависит от j и σ .

4. РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ В ПАРАМАГНИТНОМ СЛУЧАЕ

Заметим, что из величин λ (16) или β (17) одну можно выбрать вещественной. Это возможно, поскольку (1) не меняется в результате следующего преобразования в двух спиновых подпространствах:

$$a_{\eta, \uparrow} \rightarrow a_{\eta, \uparrow} \exp(i\phi), \quad a_{\eta, \downarrow} \rightarrow a_{\eta, \downarrow} \exp(-i\phi)$$

с постоянной фазой ϕ . Для определенности выберем вещественной λ .

Используя (16), (17) и $F_{jj}^{(+)\uparrow\uparrow}(0^+) = -i\beta^*$, систему (2)–(9) приведем к следующему виду для распространенных состояний:

$$G_{kk_1}^{\uparrow\uparrow}(\omega) = G_{kk}^{(0)}(\omega) \left(\delta_{kk_1} + \sum_j V_{kj} G_{jk_1}^{\uparrow\uparrow}(\omega) \right), \quad (18)$$

$$G_{jk}^{\uparrow\uparrow} = \tilde{G}_{ll} \left(\sum_{k_1} V_{jk_1} G_{k_1 k}^{\uparrow\uparrow} - \lambda U G_{jk}^{\uparrow\uparrow} - \beta U F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} \right), \quad (19)$$

$$G_{kk_1}^{\uparrow\uparrow}(\omega) = G_{kk}^{(0)}(\omega) \sum_j V_{kj} G_{jk_1}^{\uparrow\uparrow}(\omega), \quad (20)$$

$$G_{jk}^{\downarrow\uparrow} = \tilde{G}_{ll} \left(\sum_{k_1} V_{jk_1} G_{k_1 k}^{\downarrow\uparrow} - \lambda U G_{jk}^{\downarrow\uparrow} + \beta U F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} \right), \quad (21)$$

$$F_{kk_1}^{(+)\downarrow\uparrow} = -F_{kk}^{(0)} \sum_j V_{jk} F_{jk_1}^{(+)\downarrow\uparrow}, \quad (22)$$

$$F_{jk}^{(+)\downarrow\uparrow} = -\tilde{F}_{ll} \left(\sum_{k_1} V_{k_1 j} F_{k_1 k}^{(+)\downarrow\uparrow} + \beta^* U G_{jk}^{\downarrow\uparrow} - \lambda U F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} \right), \quad (23)$$

$$F_{kk_1}^{(+)\uparrow\uparrow} = -F_{kk}^{(0)} \sum_j V_{jk} F_{jk_1}^{(+)\uparrow\uparrow}, \quad (24)$$

$$F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} = -\tilde{F}_{ll} \left(\sum_{k_1} V_{k_1 j} F_{k_1 k}^{(+)\uparrow\uparrow} - \beta^* U G_{jk}^{\downarrow\uparrow} - \lambda U F_{jk}^{(+)\downarrow\uparrow} \right). \quad (25)$$

Аналогично, для локализованных состояний мы получим

$$G_{jj_1}^{\uparrow\uparrow} = \tilde{G}_{ll} \left(\delta_{jj_1} + \sum_k V_{jk} G_{kj_1}^{\uparrow\uparrow} - \lambda U G_{jj_1}^{\uparrow\uparrow} - \beta U F_{jj_1}^{(+)\downarrow\uparrow} \right), \quad (26)$$

$$G_{kj}^{\uparrow\uparrow} = G_{kk}^{(0)} \sum_{j_1} V_{kj_1} G_{j_1 j}^{\uparrow\uparrow}, \quad (27)$$

$$G_{jj_1}^{\downarrow\uparrow} = \tilde{G}_{ll} \left(\sum_k V_{jk} G_{kj_1}^{\downarrow\uparrow} - \lambda U G_{jj_1}^{\downarrow\uparrow} + \beta U F_{jj_1}^{(+)\uparrow\uparrow} \right), \quad (28)$$

$$G_{kj}^{\downarrow\uparrow} = G_{kk}^{(0)} \sum_{j_1} V_{kj_1} G_{j_1 j}^{\downarrow\uparrow}, \quad (29)$$

$$F_{jj_1}^{(+)\downarrow\uparrow} = -\tilde{F}_{ll} \left(\sum_k V_{kj} F_{kj_1}^{(+)\downarrow\uparrow} + \beta^* U G_{jj_1}^{\uparrow\uparrow} - \lambda U F_{jj_1}^{(+)\uparrow\uparrow} \right), \quad (30)$$

$$F_{kj}^{(+)\downarrow\uparrow} = -F_{kk}^{(0)} \sum_{j_1} V_{j_1 k} F_{j_1 j}^{(+)\downarrow\uparrow}, \quad (31)$$

$$F_{jj_1}^{(+)\uparrow\uparrow} = -\tilde{F}_{ll} \left(\sum_k V_{kj} F_{kj_1}^{(+)\uparrow\uparrow} - \beta^* U G_{jj_1}^{\downarrow\uparrow} - \lambda U F_{jj_1}^{(+)\downarrow\uparrow} \right), \quad (32)$$

$$F_{kj}^{(+)\uparrow\uparrow} = -F_{kk}^{(0)} \sum_{j_1} V_{j_1 k} F_{j_1 j}^{(+)\uparrow\uparrow}. \quad (33)$$

Здесь использованы обозначения:

$$G_{kk}^{(0)}(\omega) = (\omega - \varepsilon_k)^{-1},$$

$$F_{kk}^{(0)}(\omega) = (\omega + \varepsilon_k - 2\mu)^{-1},$$

$$\tilde{G}_{ll}(\omega) = (\omega - \varepsilon_0 + i U G_{jj}^{-\sigma-\sigma}(-0^+))^{-1},$$

$$\tilde{F}_{ll}(\omega) = (\omega + \varepsilon_0 - 2\mu - i U G_{jj}^{-\sigma-\sigma}(-0^+))^{-1}.$$

Поскольку $A_{j,\sigma}$ не зависит от j и σ , функции $\tilde{G}_{jj}^{\sigma\sigma}$ и $\tilde{F}_{jj}^{\sigma\sigma}$ не зависят от j , вместо которого использован индекс l , и от σ , который мы опустили. Ниже приводится решение системы уравнений (18)–(33).

4.1. Локализованные состояния

Рассмотрим уравнения (26) и (27). Подставляя недиагональный матричный элемент $G_{j,j}$ (26) в (27), получим

$$G_{kj}^{\uparrow\uparrow} \left(G_{kk}^{(0)-1} - N_{im} |V_{kl}|^2 \tilde{G}_{ll} \right) = V_{kj} G_{jj}^{\uparrow\uparrow} - \lambda U \tilde{G}_{ll} \sum_{j_1 \neq j} V_{kj_1} G_{j_1 j}^{\uparrow\uparrow} - \beta U \tilde{G}_{ll} \sum_{j_1 \neq j} V_{kj_1} F_{j_1 j}^{(+)\uparrow\uparrow} + \tilde{G}_{ll} \sum_{k_1 \neq k, j_1 \neq j} V_{kj_1} V_{j_1 k_1} G_{k_1 j}^{\uparrow\uparrow} \tag{34}$$

Для рассматриваемого примесного ансамбля матричный элемент гибридизации V_{kj} имеет вид

$$V_{kj} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} V_{kl} \exp(i\mathbf{kR}_j),$$

где \mathbf{R}_j — трехмерный радиус-вектор примесного j -атома, а Ω — объем диэлектрика. Для купратов следует заменить $\Omega \rightarrow S$, S — площадь CuO_2 -плоскости, и учесть, что \mathbf{R}_j — двумерный радиус-вектор примеси в промежуточных плоскостях, например, в плоскостях $\text{La}_{1-x/2}\text{M}_{x/2}\text{O}$ в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.

При суммировании по j_1 в последнем члене правой части уравнения (34) следует проводить усреднение полученного результата по случайному распределению примесных атомов. Для вычисления этих конфигурационно-усредненных величин использовался метод, развитый в [37]. После этого получим, что последний член в (34) пропорционален

$$\left\langle \sum_{k_1 \neq k, j_1 \neq j} \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)\mathbf{R}_{j_1}) \right\rangle_{av} = N_{im} \sum_{k_1 \neq k} \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) = 0,$$

где $\langle \dots \rangle_{av}$ обозначают усреднение по всем возможным конфигурациям примесного ансамбля. Выражения аналогичные последнему члену в (34) получаются и при использовании пар уравнений (28), (29); (30), (31) и (32), (33). С учетом сказанного выше в дальнейшем будем пренебрегать членами с подобными двойными суммами.

Подставляя выражение

$$\sum_{j_1 \neq j} V_{kj_1} G_{j_1 j}^{\uparrow\uparrow} = G_{kj}^{\uparrow\uparrow} G_{kk}^{(0)-1} - V_{kj} G_{jj}^{\uparrow\uparrow}$$

согласно (29) и выражение

$$\sum_{j_1 \neq j} V_{kj_1} F_{j_1 j}^{(+)\uparrow\uparrow} = -F_{-kj}^{(+)\uparrow\uparrow} F_{-k-k}^{(0)-1} - V_{kj} F_{jj}^{(+)\uparrow\uparrow}$$

согласно (31) в (34) мы получим выражение, представляющее связь недиагональных по нижним индексам гриновских функций $G_{kj}^{\uparrow\uparrow}$, $G_{kj}^{\uparrow\downarrow}$ и $F_{kj}^{(+)\uparrow\uparrow}$ с диагональными по j функциями $G_{jj}^{\uparrow\uparrow}$, $G_{jj}^{\uparrow\downarrow}$ и $F_{jj}^{(+)\uparrow\uparrow}$.

Используя этот подход также для пар уравнений (28), (29), (30), (31) и (32), (33), мы получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} & \left(G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} - N_{im} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^2 \bar{G}_{ll} \right) G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} + \lambda U \bar{G}_{ll} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} - \beta U \bar{G}_{ll} F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} = \\ & = V_{\mathbf{k}\mathbf{j}} \left(G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} + \lambda U \bar{G}_{ll} G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} + \beta U \bar{G}_{ll} F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} \right), \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} & \lambda U \bar{G}_{ll} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} + \left(G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} - N_{im} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^2 \bar{G}_{ll} \right) G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} + \beta U \bar{G}_{ll} F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} = \\ & = V_{\mathbf{k}\mathbf{j}} \left(G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} + \lambda U \bar{G}_{ll} G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} - \beta U \bar{G}_{ll} F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} \right), \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} & -\beta^* U \bar{F}_{ll} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} + \left(F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - N_{im} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^2 \bar{F}_{ll} \right) F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} - \lambda U \bar{F}_{ll} F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} = \\ & = -V_{\mathbf{k}\mathbf{j}} \left(F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} + \beta^* U \bar{F}_{ll} G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} - \lambda U \bar{F}_{ll} F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} \right), \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} & \beta^* U \bar{F}_{ll} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} + \left(F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - N_{im} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^2 \bar{F}_{ll} \right) F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} - \lambda U \bar{F}_{ll} F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} = \\ & = -V_{\mathbf{k}\mathbf{j}} \left(F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} - \beta^* U \bar{F}_{ll} G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} - \lambda U \bar{F}_{ll} F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} \right). \end{aligned} \quad (38)$$

Решение системы (35)–(38) дает выражения недиагональных по нижним индексам гриновских функций через диагональные. Подставляя эти выражения в (26), (28), (30) и (32), при $j = j_1$ можно получить систему четырех линейных алгебраических уравнений для диагональных по j гриновских функций. Этими последними функциями и определяются искомые три параметра и спектры локализованных состояний.

Однако удобнее поступить следующим образом. Найдем сумму и разность уравнений (35) и (36) и уравнений (37) и (38). Получим

$$\begin{aligned} & a_1(\lambda) \left(G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} + G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} \right) - c_3 F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} \left(F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} - F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) = \\ & = V_{\mathbf{k}\mathbf{j}} \left(c_1(\lambda) \left(G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} + G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} \right) + c_3 \left(F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} - F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) \right), \end{aligned} \quad (39)$$

$$\begin{aligned} & a_1(-\lambda) \left(G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} - G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} \right) - c_3 F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} \left(F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} + F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) = \\ & = V_{\mathbf{k}\mathbf{j}} \left(c_1(-\lambda) \left(G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} - G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} \right) + c_3 \left(F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} + F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) \right), \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned} & a_2(-\lambda) \left(F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} + F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) - c_4^* G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} \left(G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} - G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} \right) = \\ & = -V_{\mathbf{k}\mathbf{j}} \left(c_2(-\lambda) \left(F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} + F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) + c_4^* \left(G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} - G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} \right) \right), \end{aligned} \quad (41)$$

$$\begin{aligned} & a_2(\lambda) \left(F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} - F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) - c_4^* G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} \left(G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} + G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} \right) = \\ & = -V_{\mathbf{k}\mathbf{j}} \left(c_2(\lambda) \left(F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} - F_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) + c_4^* \left(G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} + G_{\mathbf{j}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow} \right) \right). \end{aligned} \quad (42)$$

Здесь использовано обозначение: $c_1(-\lambda) = 1 - \lambda U \bar{G}_{ll}$, $c_2(\lambda) = 1 + \lambda U \bar{F}_{ll}$, $a_1(\lambda) = c_1(\lambda) G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} - N_{im} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^2 \bar{G}_{ll}$, $a_2(-\lambda) = c_2(-\lambda) F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - N_{im} V_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^2 \bar{F}_{ll}$, $c_3 = \beta U \bar{G}_{ll}$, $c_4^* = \beta^* U \bar{F}_{ll}$.

Теперь, например, из пары уравнений (39) и (42) находим выражения $G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\uparrow\uparrow} + G_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^{\downarrow\downarrow}$ и $F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\downarrow\downarrow} - F_{-\mathbf{k}\mathbf{j}}^{(+)\uparrow\uparrow}$ только через диагональные по j гриновские функции. Первое выражение подставляем в сумму уравнений (26) и (28) для диагональных функций ($j = j_1$), а второе — в разность уравнений (30) и (32). В результате получаем:

$$\left(G_{jj}^{\uparrow\uparrow} + G_{jj}^{\downarrow\downarrow}\right)\left(\omega - \varepsilon_0 - S_1\right) + \beta U Z\left(F_{jj}^{(+)\uparrow\downarrow} - F_{jj}^{(+)\uparrow\uparrow}\right) = 1 \quad (43)$$

и

$$\left(F_{jj}^{(+)\downarrow\uparrow} - F_{jj}^{(+)\uparrow\uparrow}\right)\left(\omega + \varepsilon_0 - 2\mu - S_2\right) + \beta^* U Z\left(G_{jj}^{\uparrow\uparrow} + G_{jj}^{\downarrow\downarrow}\right) = 0. \quad (44)$$

Здесь мы ввели собственно-энергетические части, которые зависят от параметров A, μ, λ, β :

$$S_1(\omega; \lambda) = U(A - \lambda) + \sum_k \frac{V_{kl}^2 \left[(c_1(\lambda)a_2(\lambda) - c_3c_4^* F_{-k-k}^{(0)-1} \right]}{a_1(\lambda)a_2(\lambda) - c_3c_4^* G_{kk}^{(0)-1} F_{-k-k}^{(0)-1}}, \quad (45)$$

$$Z(\omega; \lambda) = 1 + N_{im} \tilde{G}_{il} \tilde{F}_{li} \sum_k \frac{V_{kl}^4}{a_1(\lambda)a_2(\lambda) - c_3c_4^* G_{kk}^{(0)-1} F_{-k-k}^{(0)-1}}, \quad (46)$$

$$S_2(\omega; \lambda) = -U(A + \lambda) + \sum_k \frac{V_{kl}^2 \left[(c_2(\lambda)a_1(\lambda) - c_3c_4^* G_{kk}^{(0)-1} \right]}{a_1(\lambda)a_2(\lambda) - c_3c_4^* G_{kk}^{(0)-1} F_{-k-k}^{(0)-1}}, \quad (47)$$

Решение (43), (44) имеет вид

$$G_{jj}^{\uparrow\uparrow} + G_{jj}^{\downarrow\downarrow} = G_{loc}(\omega; \mu, A, \lambda, \beta), \quad (48)$$

где

$$G_{loc} = \frac{\omega + \varepsilon_0 - 2\mu - S_2(\lambda)}{\left(\omega + \varepsilon_0 - 2\mu - S_2(\lambda)\right)\left(\omega - \varepsilon_0 - S_1(\lambda)\right) - |\beta|^2 U^2 Z(\lambda)^2} \quad (49)$$

и

$$F_{jj}^{(+)\downarrow\uparrow} - F_{jj}^{(+)\uparrow\uparrow} = -F_{loc}(\omega; \mu, A, \lambda, \beta), \quad (50)$$

где

$$F_{loc} = \frac{\beta^* U Z(\omega; A, \mu, \lambda; \beta)}{\left(\omega + \varepsilon_0 - 2\mu - S_2(\lambda)\right)\left(\omega - \varepsilon_0 - S_1(\lambda)\right) - |\beta|^2 U^2 Z^2(\lambda)}. \quad (51)$$

Легко убедиться, что использованная выше процедура для уравнений (40) и (41), которая приводит к определению величин $G_{jj}^{\uparrow\uparrow} - G_{jj}^{\downarrow\downarrow}$ и $F_{jj}^{(+)\downarrow\uparrow} + F_{jj}^{(+)\uparrow\uparrow}$, дает для них выражения подобные (48), (49) и (50), (51) с заменой $\lambda \rightarrow -\lambda$. В результате получим

$$G_{jj}^{\uparrow\uparrow} - G_{jj}^{\downarrow\downarrow} = G_{loc}(\omega; \mu, A, -\lambda, \beta) \quad (52)$$

и

$$F_{jj}^{(+)\downarrow\uparrow} + F_{jj}^{(+)\uparrow\uparrow} = -F_{loc}(\omega; \mu, A, -\lambda, \beta). \quad (53)$$

Окончательно, из (48)–(53) для узельных функций получаем

$$G_{jj}^{\uparrow\uparrow} = \frac{1}{2} G_{loc}(\omega; \mu, A, \lambda, \beta) + \frac{1}{2} G_{loc}(\omega; \mu, A, -\lambda, \beta), \quad (54)$$

$$G_{jj}^{\downarrow\downarrow} = \frac{1}{2} G_{loc}(\omega; \mu, A, \lambda, \beta) - \frac{1}{2} G_{loc}(\omega; \mu, A, -\lambda, \beta), \quad (55)$$

$$F_{jj}^{(+)\downarrow\uparrow} = -\frac{1}{2} F_{loc}(\omega; \mu, A, \lambda, \beta) - \frac{1}{2} F_{loc}(\omega; \mu, A, -\lambda, \beta), \quad (56)$$

$$F_{jj}^{(+)\uparrow\uparrow} = \frac{1}{2} F_{loc}(\omega; \mu, A, \lambda, \beta) - \frac{1}{2} F_{loc}(\omega; \mu, A, -\lambda, \beta). \quad (57)$$

4.2. Распространенные состояния

Рассмотрим, например, пару уравнений (18) и (19). Подставляя недиагональный по k матричный элемент G_{kk} , (18) в (19), получим

$$\begin{aligned} G_{jk}^{\uparrow\uparrow}(\omega) \left(\tilde{G}_{ll}^{-1} - \sum_{k_1 \neq k} |V_{k_1 l}|^2 G_{k_1 k_1}^{(0)} \right) + \lambda U G_{jk}^{\downarrow\uparrow} + \beta U F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} &= \\ = V_{jk} G_{kk}^{\uparrow\uparrow} + \sum_{k_1 \neq k, j_1 \neq j} V_{jk_1} G_{k_1 k_1}^{(0)} V_{k_1 j_1} G_{j_1 k}^{\uparrow\uparrow}. \end{aligned} \quad (58)$$

В соответствии с (35)–(38) гриновская функция $G_{jk}^{\uparrow\uparrow} \propto V_{jk}$. С учетом сказанного выше пренебрегаем членами подобными последнему в (58). В результате из системы (18)–(25) получаем

$$G_{jk}^{\uparrow\uparrow}(\omega) \left(\tilde{G}_{ll}^{-1} - \sum_{k_1 \neq k} V_{k_1 l}^2 G_{k_1 k_1}^{(0)} \right) + \lambda U G_{jk}^{\downarrow\uparrow} + \beta U F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} = V_{jk} G_{kk}^{\uparrow\uparrow}, \quad (59)$$

$$G_{jk}^{\downarrow\uparrow}(\omega) \left(\tilde{G}_{ll}^{-1} - \sum_{k_1 \neq k} V_{k_1 l}^2 G_{k_1 k_1}^{(0)} \right) + \lambda U G_{jk}^{\uparrow\uparrow} - \beta U F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} = V_{jk} G_{kk}^{\downarrow\uparrow}, \quad (60)$$

$$F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow}(\omega) \left(\tilde{F}_{ll}^{-1} - \sum_{k_1 \neq -k} V_{k_1 l}^2 F_{k_1 k_1}^{(0)} \right) + \beta^* U G_{jk}^{\uparrow\uparrow} - \lambda U F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} = -V_{jk} F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow}, \quad (61)$$

$$F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow}(\omega) \left(\tilde{F}_{ll}^{-1} - \sum_{k_1 \neq -k} V_{k_1 l}^2 F_{k_1 k_1}^{(0)} \right) - \beta^* U G_{jk}^{\downarrow\uparrow} - \lambda U F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} = -V_{jk} F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow}. \quad (62)$$

Система (59)–(62) позволяет получить выражения для недиагональных по нижним индексам функций через диагональные. Для пар уравнений (59), (60) и (61), (62) сложим их и вычтем одно из другого. В результате имеем:

$$b_1(\lambda) \left(G_{jk}^{\uparrow\uparrow} + G_{jk}^{\downarrow\uparrow} \right) + \beta U \left(F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} - F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) = V_{jk} \left(G_{kk}^{\uparrow\uparrow} + G_{kk}^{\downarrow\uparrow} \right), \quad (63)$$

$$b_2(\lambda) \left(F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} - F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) + \beta^* U \left(G_{jk}^{\uparrow\uparrow} + G_{jk}^{\downarrow\uparrow} \right) = -V_{jk} \left(F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow} - F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow} \right), \quad (64)$$

$$b_1(-\lambda) \left(G_{jk}^{\uparrow\uparrow} - G_{jk}^{\downarrow\uparrow} \right) + \beta U \left(F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} + F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) = V_{jk} \left(G_{kk}^{\uparrow\uparrow} - G_{kk}^{\downarrow\uparrow} \right), \quad (65)$$

$$b_2(-\lambda) \left(F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} + F_{jk}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) + \beta^* U \left(G_{jk}^{\uparrow\uparrow} - G_{jk}^{\downarrow\uparrow} \right) = -V_{jk} \left(F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow} + F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow} \right). \quad (66)$$

Здесь введено

$$b_1(\lambda) = \tilde{G}_{ll}^{-1} - \sum_{k_1 \neq k} V_{k_1 l}^2 G_{k_1 k_1}^{(0)} + \lambda U, \quad b_2(-\lambda) = \tilde{F}_{ll}^{-1} - \sum_{k_1 \neq -k} V_{k_1 l}^2 F_{k_1 k_1}^{(0)} - \lambda U.$$

Используя (63)–(66) и (18), (20), (22), (24), получаем первую пару уравнений:

$$\left(G_{kk}^{\uparrow\uparrow} + G_{kk}^{\downarrow\uparrow} \right) \left(G_{kk}^{(0)-1} - \frac{N_{im} V_{k_1 l}^2}{b_1(\lambda)} \right) - \frac{\beta U}{b_1(\lambda)} F_{-k-k}^{(0)-1} \left(F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow} - F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow} \right) = 1, \quad (67)$$

$$\left(F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow} - F_{-kk}^{(+)\uparrow\downarrow}\right) \left(F_{-k-k}^{(0)-1} - \frac{N_{im}V_{kl}^2}{b_2(\lambda)}\right) - \frac{\beta^*U}{b_2(\lambda)}G_{kk}^{(0)-1} \left(G_{kk}^{\uparrow\uparrow} + G_{kk}^{\downarrow\uparrow}\right) = -\frac{\beta^*U}{b_2(\lambda)} \quad (68)$$

и вторую пару уравнений:

$$\left(G_{kk}^{\uparrow\uparrow} - G_{kk}^{\downarrow\uparrow}\right) \left(G_{kk}^{(0)-1} - \frac{N_{im}V_{kl}^2}{b_1(-\lambda)}\right) - \frac{\beta U}{b_1(-\lambda)}F_{-k-k}^{(0)-1} \left(F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow} + F_{-kk}^{(+)\uparrow\downarrow}\right) = 1, \quad (69)$$

$$\left(F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow} + F_{-kk}^{(+)\uparrow\downarrow}\right) \left(F_{-k-k}^{(0)-1} - \frac{N_{im}V_{kl}^2}{b_2(-\lambda)}\right) - \frac{\beta^*U}{b_2(-\lambda)}G_{kk}^{(0)-1} \left(G_{kk}^{\uparrow\uparrow} - G_{kk}^{\downarrow\uparrow}\right) = -\frac{\beta^*U}{b_2(-\lambda)}. \quad (70)$$

Решение системы уравнений (67)–(70) имеет вид

$$G_{kk}^{\uparrow\uparrow} + G_{kk}^{\downarrow\uparrow} = G_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, \lambda, \beta), \quad (71)$$

где

$$G_{ext} = \frac{F_{-k-k}^{(0)-1} - b_1(\lambda)W(\lambda)}{\left(G_{kk}^{(0)-1} - b_2(\lambda)W(\lambda)\right)\left(F_{-k-k}^{(0)-1} - b_1(\lambda)W(\lambda)\right) - |\beta|^2U^2W^2(\lambda)}, \quad (72)$$

и

$$F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow} - F_{-kk}^{(+)\uparrow\downarrow} = F_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, \lambda, \beta), \quad (73)$$

где

$$F_{ext} = \frac{\beta^*UW(\lambda)}{\left(G_{kk}^{(0)-1} - b_2(\lambda)W(\lambda)\right)\left(F_{-k-k}^{(0)-1} - b_1(\lambda)W(\lambda)\right) - |\beta|^2U^2W^2(\lambda)}. \quad (74)$$

Здесь использовано обозначение:

$$W(\lambda) = \frac{N_{im}V_{kl}^2}{b_1(\lambda)b_2(\lambda) - |\beta|^2U^2}. \quad (75)$$

Выражения для $G_{kk}^{\uparrow\uparrow} - G_{kk}^{\downarrow\uparrow}$ и $F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow} + F_{-kk}^{(+)\uparrow\downarrow}$ равны соответственно правым частям (71) и (73) с заменой $\lambda \rightarrow -\lambda$ в (72) и (74).

Окончательно, для гриновских функций получаем

$$G_{kk}^{\uparrow\uparrow} = \frac{1}{2}G_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, \lambda, \beta) + \frac{1}{2}G_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, -\lambda, \beta), \quad (76)$$

$$G_{kk}^{\downarrow\uparrow} = \frac{1}{2}G_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, \lambda, \beta) - \frac{1}{2}G_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, -\lambda, \beta), \quad (77)$$

$$F_{-kk}^{(+)\uparrow\uparrow} = \frac{1}{2}F_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, \lambda, \beta) + \frac{1}{2}F_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, -\lambda, \beta), \quad (78)$$

$$F_{-kk}^{(+)\uparrow\downarrow} = -\frac{1}{2}F_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, \lambda, \beta) + \frac{1}{2}F_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, -\lambda, \beta). \quad (79)$$

5. ОБСУЖДЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Получено решение (1), отвечающее сверхпроводящему состоянию легированного диэлектрика за счет спиновых флуктуаций. В использованном приближении для вершинных частей (10) и (11) учитывались процессы рассеяния электронов с переворотом спина. Это привело к возникновению двух последних слагаемых в правых частях в каждом из уравнений (19), (21), (23), (25), (26), (28), (30) и (32). Амплитуды этих процессов рассеяния определяются двумя спин-флуктуационными параметрами порядка. Один из этих параметров, λ , определяется из уравнения (16) через нормальную недиагональную по спиновому индексу ФГ $G_{jj}^{-\sigma\sigma}$ (55). Ясно, что ненулевые решения для λ могут быть получены как для нормального (металлического или диэлектрического), так и для сверхпроводящего состояний системы.

С другой стороны, ненулевое решение для второго параметра, β , который определяется из уравнения (17) через аномальную ФГ $F_{jj}^{(+)-\sigma\sigma}$ (56), означает образование в системе локализованных бозонов со спином 0. Кроме них в системе должны также присутствовать и локализованные бозоны со спином 1, как это видно из (51) и (57). И именно параметр β задает функцию (74), через которую определяется сверхпроводящий конденсат как в синглетном (78), так и в триплетном (79) каналах спаривания квазичастиц.

Возможность нетривиального решения (17) определяется вкладом от полюсов или их областей аномальной ФГ (56), расположенных вблизи уровня Ферми на полуоси $\text{Re } \omega \geq \mu$ в нижней части комплексной плоскости ($\text{Im } \omega < 0$). Эта ФГ зависит от функции Z , которая представляет перенормировку энергии электронных корреляций спиновыми флуктуациями и гибридизацией (46). Если второй член в правой части (46) меньше единицы, возникшей здесь от затравочной корреляционной энергии, то, как легко видеть, уравнение (17) будет иметь только тривиальное решение $\beta = 0$ и, соответственно, состояние системы — нормальное (либо металлическое, либо диэлектрическое). Решение $\beta \neq 0$ может существовать, если существует по крайней мере область вблизи уровня Ферми, где $\text{Re } Z < 0$. Это означало бы, что в этой области спектра корреляционная энергия UZ изменила свой затравочный положительный знак и стала соответствовать притяжению.

Функция Z зависит от μ , A , λ и β , которые являются самосогласованными параметрами и определяются (14)–(17). Для того чтобы показать возможность $\text{Re } Z < 0$, мы рассмотрим Z в приближении Хартри–Фока ($\lambda = 0$ и $\beta = 0$). Полагая $V_{\mathbf{k}i}$ независимым от \mathbf{k} и рассматривая, для определенности, валентную зону исходного диэлектрика, из (46) получаем

$$Z = 1 + \frac{0.5N_{im}V_{\mathbf{k}i}^4}{\omega^2 - (\mu - \varepsilon_0 - UA)^2 - N_{im}V_{\mathbf{k}i}^2} R(\omega), \quad (80)$$

где ω отсчитывается от μ ,

$$R(\omega) = \frac{1}{\omega} \left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\xi(\omega) - \varepsilon_{\mathbf{k}} - i0^+} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\xi(-\omega) - \varepsilon_{\mathbf{k}} - i0^+} \right] \quad (81)$$

и

$$\xi(\omega) = \omega + \mu - \frac{N_{im}V_{\mathbf{k}i}^2}{\omega - \varepsilon_0 - UA + \mu}. \quad (82)$$

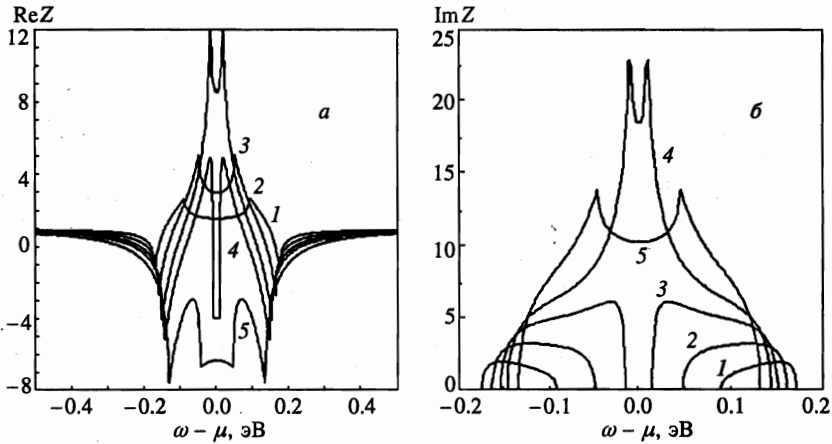


Рис. 3. Зависимости $\text{Re } Z(\omega)$ (а) и $\text{Im } Z(\omega)$ (б), рассчитанные по (80)–(83) при $N_t = 0.1 \text{ \AA}^{-d}$ ($d = 2, 3$), $D_b = 1.5 \text{ эВ}$, $N_{im} = 0.1N_t$, $\epsilon_0 = D_b + 0.5 \text{ эВ}$, $U = 0.5 \text{ эВ}$, $\mu = 2.5 \text{ эВ}$ и $\mu - \epsilon_0 - UA = 0.2 \text{ эВ}$. Кривые 1 соответствуют $V_h = 1.0 \text{ эВ}$; 2 — 1.2 эВ; 3 — 1.35 эВ; 4 — 1.45 эВ; 5 — 1.6 эВ

Из (80)–(82) следует, что эффективная корреляционная энергия UZ является комплексной и четной функцией ω . Для того чтобы вычислить сумму по k , мы выберем следующую модель валентной зоны:

$$\rho^{(0)}(\epsilon) = \begin{cases} \frac{N_t}{\pi D_b^2} [D_b^2 - \epsilon^2]^{1/2}, & |\epsilon| \leq D_b \\ 0, & |\epsilon| > D_b \end{cases} \quad (83)$$

На рис. 3 показаны зависимости $\text{Re } Z$ и $\text{Im } Z$ от ω для различных параметров гибридизации $V_h = V_{kl} N_t^{1/2}$. Зависимость $Z(\omega)$ весьма чувствительна к соотношению между μ и $\epsilon_0 + UA$, но в любом случае $\mu \geq \epsilon_0 + UA$, как это следует из (15). Для заданного $\mu - \epsilon_0 - UA = 0.2 \text{ эВ}$ и при относительно малых V_h существуют лишь узкие области вдали от уровня Ферми, где $\text{Re } Z < 0$, см. кривую 1 на рис. 3а. Функция $\text{Im } Z$ также является относительно малой и расположена далеко от уровня Ферми (кривая 1 на рис. 3б). По мере увеличения V_h области с $\text{Re } Z < 0$ увеличиваются и перекрываются на уровне Ферми, как это представлено зависимостями 2, 3, 4 и 5 на рис. 3а. Схожее поведение имеет и $\text{Im } Z$ (зависимости 2, 3, 4, 5 на рис. 3б). При значении гибридизации, соответствующем кривым 5 на рис. 3, но при увеличении отстройки $\mu - \epsilon_0 - UA = 0.3 \text{ эВ}$ зависимость $Z(\omega)$ оказывается подобной кривым 1 на рис. 3. Однако увеличение параметра гибридизации до $V_h = 1.9 \text{ эВ}$ восстанавливает зависимости $\text{Re } Z(\omega)$ и $\text{Im } Z(\omega)$ подобно кривым 5 на рис. 3.

В заключение отметим следующее. Мы показали, что в приближении Хартри–Фока перенормированная гибридизацией корреляционная энергия на примесных орбиталях может быть отрицательной вблизи уровня Ферми. Но в этом приближении речь всегда идет только об одночастичных состояниях и, соответственно, только о нормальных состояниях системы. Для того чтобы этот эффект отрицательной корреляционной энергии на примесных орбиталях мог бы привести к сверхпроводимости в легированном диэлектрике, мы вынуждены были учесть спиновые флуктуации в системе. В этом случае бы-

ла получена система уравнений, которая включает аномальные ФГ для локализованных бозонов и сверхпроводящего конденсата. Теперь эффективная корреляционная энергия становится зависящей и от спин-флуктуационных параметров порядка.

В этой теории спин-флуктуационной сверхпроводимости в примесных зонах в легированных диэлектриках энергетическая щель не описывается уравнением БКШ. Вместо него ключевым для сверхпроводящего состояния является уравнение (17), описывающее локализованные бозоны со спином 0. Механизм образования сверхпроводящего конденсата вблизи уровня Ферми в исходной диэлектрической щели обусловлен виртуальными двухквазичастичными переходами по примесному ансамблю: локализованный бозон на каком-либо примесном узле \rightarrow пара квазичастиц $(-k\mathbf{k})$ в примесной зоне распространенных состояний \rightarrow локализованный бозон на другом примесном узле и т.д. При этом синглетный и триплетные каналы спаривания квазичастиц являются взаимосвязанными.

Литература

1. E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 673 (1994).
2. Ю. А. Изюмов, Н. М. Плакида, Ю. Н. Скрябин, *УФН* **159**, 621 (1989).
3. V. Batlogg et al., *Physica C* **135-140** 130 (1994); C. Y. Chen et al., *Phys. Rev. B* **51**, 3671 (1995).
4. Г. М. Элиашберг, в кн. *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*, под ред. Д. М. Гинзберга, Мир, Москва (1990), с. 505.
5. М. В. Садовский, *СФХТ* **3** 337 (1995).
6. K. Tamazaki and S. Uchida, *Physica C* **235-24**, 1321 (1994); K. Kitazawa, *Physica C* **235-24** xxiii (1994).
7. S. Uchida, T. Ido, H. Takagi, T. Arima, Y. Tokura, and S. Tajima, *Phys. Rev. B* **43** 7942 (1991).
8. Z.-X. Shen, J. W. Allen, J. J. Yen, J.-S. Kang, W. Ellis, W. Spicer, I. Lindau, M. B. Maple, Y. D. Dalichaouch, M. S. Torikachvili, J. Z. Sun, and T. H. Geballe, *Phys. Rev. B* **36**, 8414 (1987).
9. H. Matsuyama, T. Takahashi, H. Katayama-Yoshida, T. Kashiwakura, Y. Okabe, and S. Sato, *Physica C* **160**, 567 (1989).
10. J. W. Allen, C. G. Olson, M. B. Maple, J.-S. Kang, L. Z. Liu, J.-H. Park, R. O. Anderson, W. P. Ellis, J. T. Markert, Y. Dalichaouch, and R. Liu, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 595 (1990).
11. T. Takahashi, H. Matsuyama, H. Katayama-Yoshida, K. Seki, K. Kamiya, and H. Inokuchi, *Physica C* **170**, 416 (1990).
12. C. C. Homes and T. Timusk, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1645 (1993); A. V. Puchkov, D. N. Basov, and T. Timusk, *J. Phys.: Condens. Matt.* **8**, 10049 (1996).
13. Y. Kim, A. Heeger, L. Acedo, G. Stucky, and F. Wudl, *Phys. Rev. B* **36**, 14034 (1987); G. Yu, C. Lee, A. Heeger, and S.-W. Cheong, *Physica C* **203**, 419 (1992).
14. R. O. Anderson, R. Claessen, J. W. Allen, C. G. Olson, C. Janowitz, L. Z. Liu, J.-H. Park, M. B. Maple, Y. Dalichaouch, M. C. de Andrade, R. F. Jardim, E. A. Early, S.-J. Oh, and W. P. Ellis, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3163 (1993).
15. C. Quitmann, J. Ma, R. J. Kelly et al., *Physica C* **235-24**, 1019 (1994).
16. A. Yurgens, D. Winhler, N. V. Zavaritsky, and T. Claeson, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5122 (1997).
17. H. S. Somal, B. J. Feenstra, J. Schützmann, J. Hoon Kim, Z. H. Barber, V. H. M. Duijn, N. T. Hien, A. A. Menovsky, M. Palumbo, and D. van der Marel, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1525 (1996).
18. A. S. Alexandrov, V. V. Kabanov, and N. F. Mott, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4796 (1996).
19. A. S. Alexandrov, *Physica C* **274** 237 (1997).
20. H. A. Blackstead, J. D. Dow, and D. B. Pulling, *Physica C* **265**, 143 (1996).
21. J. C. Phillips, *Physica C* **221**, 327 (1994).
22. P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987); *J. Phys.: Cond. Matt.* **8**, 10083 (1996).

23. Ю. А. Изюмов, УФН **161**, 2 (1991); УФН **165**, 403 (1995).
24. N. M. Plakida, *High T_c Superconductivity*, Springer, Berlin (1995).
25. V. J. Emery and S. A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. **74**, 3253 (1995).
26. Q. Si, J. Phys.: Cond. Matt. **8**, 9953 (1996).
27. L. A. Openov, V. F. Elesin, A. V. Krasheninnikov, Physica C **257**, 53 (1996).
28. J. M. Tranquada, W. J. L. Buyers, H. Chou, T. E. Mason, M. Sato, S. Shamoto, and G. Shirane, Phys. Rev. Lett. **64**, 800 (1990).
29. P. Monthoux and D. Pines, Phys. Rev. B **49**, 4261 (1994).
30. B. P. Stojkovic and D. Pines, Phys. Rev. B **56**, 11931 (1997).
31. М. Коэн, Г. Глэдстоун, И. Йенсен, Дж. Шриффер, *Сверхпроводимость полупроводников и переходных металлов*, Мир, Москва (1972).
32. Б. Т. Гейликман, УФН **88**, 327 (1966).
33. D. Pines, Phys. Rev. **109**, 280 (1958).
34. А. И. Агафонов и Е. А. Манькин, Phys. Rev. B **52**, 14571 (1995); ЖЭТФ **109**, 1405 (1996).
35. А. И. Агафонов и Е. А. Манькин, Pis'ma v ZhETF. **65**, 419 (1997).
36. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).
37. F. Yonezawa and T. Matsubara, Prog. Theor. Phys. **35**, 357 (1966).