

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ЭЛЕКТРОННОГО МЕХАНИЗМА СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

*Р. О. Зайцев**

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

Поступила в редакцию 2 октября 2003 г.

В рамках модели Хаббарда проведено вычисление двухчастичной амплитуды рассеяния, с помощью которой получена область существования куперовской неустойчивости. Определена зависимость температуры T_c сверхпроводящего перехода от электронной концентрации. Учтено влияние спиновых флуктуаций и определена температурная зависимость времени релаксации с перевертыванием электронного спина. Установлены причины возрастания величины $2\Delta_0/T_c$ по сравнению ее классическим значением.

PACS: 74.20.-z, 74.20.Mn, 74.25.Dw

1. ВВЕДЕНИЕ

Теория идеальных сверхпроводников содержит всего две независимые и невычисленные величины: константу БКШ и предэкспоненциальный множитель $\bar{\epsilon}$. В теории сверхпроводимости, основанной на гамильтониане электрон-фононного взаимодействия, величина $\bar{\epsilon}$ имеет порядок дебаевской частоты, в то время как константа БКШ может быть выражена через температурный наклон удельного сопротивления при температурах выше дебаевской. Записанная таким образом температура сверхпроводящего перехода обратно пропорциональна квадратному корню из суммарной массы атомов элементарной ячейки и поэтому уменьшается с увеличением массы вводимого изотопа. Существует большая группа простых металлов, которые имеют правильный знак и порядок величины изотопического эффекта: Hg, Pb, Sn, Tl, Zn. Однако в сложных соединениях, которые имеют весьма высокую температуру перехода (выше 20 К), показатель изотопического эффекта всегда меньше 0.4 и уменьшается с повышением температуры перехода. Таким образом, возникает предположение о нефононном механизме куперовского спаривания в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП).

Туннельные эксперименты на ВТСП показывают, что отношение $2\Delta_0/T_c$ для этих сверхпроводников почти в два раза выше, чем в теории БКШ. Однако наиболее поразительной особенностью является чрезвычайно резкая зависимость их температуры перехода от концентрации допирующей примеси. Так, в соединении $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ сверхпроводимость существует в интервале $0.05 < x < 0.34$, T_c максимальна при $x = 0.15$ – 0.16 . В соединении $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ сверхпроводимость существует в весьма узком интервале $0.14 < x < 0.18$, T_c максимальна при $x = 0.15$. В соединении $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ температура перехода максимальна при $\delta = 0$, однако уже при $\delta = 1/2$ сверхпроводимость отсутствует.

В настоящей работе изучается так называемый кинематический механизм сверхпроводимости, с помощью которого удастся объяснить упомянутые выше особенности высокотемпературных сверхпроводников.

Следует заметить, что возможность появления сверхпроводимости в модели Хаббарда с сильным отталкиванием была подвергнута критике на том основании, что аномальные средние Горькова [1], которые появляются ниже точки куперовской неустойчивости, должны удовлетворять дополнительному правилу сумм, существование которого непосредственным образом связано с бесконечно большой энергией Хаббарда. Авторы, которым принадлежит

*E-mail: adydel@veernet.iol.ru

это соображение (Н. М. Плакида, Ю. А. Изюмов, В. Ю. Юшанхай и др.), не подвергали сомнению ни существование кинематического взаимодействия, открытого Дайсоном [2], ни правильность написания уравнения для нахождения температуры сверхпроводящего перехода, полученного в работе автора [3]. Возражение, которое было высказано по поводу аномальных средних, основывалось на интуитивных, так называемых физических, соображениях и до последнего времени не было подтверждено какими-либо строгими математическими вычислениями.

Решение этой проблемы было предложено в работе Валькова и др. [4]. Было показано, что учет сингулярного вклада в спектральную интенсивность для аномальной корреляционной функции приводит к выполнению правила сумм и снимает необоснованный запрет на реализацию *s*-типа симметрии параметра порядка в сверхпроводниках с сильными корреляциями.

Вторая серия критических замечаний касалась возможности возникновения ферромагнитного упорядочения именно в той области, где появляется сверхпроводимость. В настоящей работе показано, что тенденция к ферромагнетизму проявляется только в области малых концентраций, где сверхпроводимость невозможна. Будет показано, что в сверхпроводящей области влияние парамагнитных флуктуаций приводит к появлению конечного времени релаксации с переворотом спина, зависящего от температуры. В области предельно низкой температуры влияние парамагнитных флуктуаций несущественно, в то время как при конечной температуре происходит существенное уменьшение эффективной константы БКШ, что приводит к понижению температуры T_c сверхпроводящего перехода и соответствующему увеличению $2\Delta_0/T_c$.

Третья спорная проблема касается поведения концентрационной зависимости $T_c(n)$ в пределе $n \rightarrow 1$. В настоящей работе показано, что при любой конечной энергии Хаббарда температура перехода в этом пределе обращается в нуль. Если же учесть конечную величину кулоновского взаимодействия V , относящегося к соседним ячейкам, то, начиная с некоторого значения $V = V_c$, сверхпроводимость исчезает уже на конечном интервале концентраций, примыкающих к $n = 1$.

Несмотря на то что полученные интегральные уравнения допускают решения с различной симметрией, в настоящей работе фазовые диаграммы получены для решений *s*-типа, не имеющих узлов, которые приводят к фазовой диаграмме с максимальной высокой температурой сверхпроводящего перехода.

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ АМПЛИТУДЫ РАССЕЙНИЯ ПРИ БЕСКОНЕЧНОЙ ЭНЕРГИИ ХАББАРДА

Наша задача будет состоять в том, чтобы непосредственно вычислить константу БКШ в зависимости от концентрации допирующей примеси. Рассмотрим для определенности нижнюю подзону Хаббарда $n_d < 1$ и для простоты предположим, что энергия Хаббарда $U \rightarrow \infty$. При этом спектр возбуждений выражается через произведение компоненты Фурье от интеграла перескока $t_{\mathbf{p}}$ на так называемый конечный множитель f , равный сумме чисел заполнения начального и конечного состояний:

$$\xi_{\mathbf{p}} = ft_{\mathbf{p}} - \mu, \quad f = n_0 + n_{\sigma} = 1 - n_{-\sigma}. \quad (1)$$

В качестве уравнения состояния при нулевом внешнем поле имеем

$$n_d = 2f \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}), \quad f = 1 - \frac{n_d}{2}. \quad (2)$$

Одночастичная функция Грина обычным образом определяется через спектр возбуждений:

$$G_{\omega_n}(\mathbf{p}) = \frac{1}{i\omega - \xi_{\mathbf{p}}}, \quad \omega_n = \pi T(2n + 1). \quad (3)$$

Куперовская неустойчивость возникает, когда двухчастичная вершинная часть приобретает особенность при нулевых суммарном импульсе, спине и энергии. Условие появления сингулярности может быть получено как условие разрешимости соответствующей однородной системы [1]. Для изучаемой модели, где взаимодействуют только электроны с противоположными спинами, получаем следующее лестничное уравнение:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{s}}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 | \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) &= \Gamma_{\mathbf{s}}^{(0)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 | \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) - \\ &- T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Gamma_{\mathbf{s}}^{(0)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 | \mathbf{p}, \mathbf{s} - \mathbf{p}) G_{\omega}(\mathbf{p}) \times \\ &\times G_{\Omega - \omega}(\mathbf{s} - \mathbf{p}) \Gamma_{\mathbf{s}}(\mathbf{p}, \mathbf{s} - \mathbf{p} | \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4). \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{s} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4$, $\Gamma_{\mathbf{s}}^{(0)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 | \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4)$ — вершинная часть, неприводимая относительно разрезания по импульсам одинакового направления. Для ее вычисления воспользуемся методом Дайсона [2], который он использовал для вычисления амплитуды рассеяния спиновых волн.

В предельном случае бесконечно большой энергии Хаббарда достаточно использовать гамильтониан, относящийся только к нижней подзоне Хаббарда:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}' (\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'), \sigma} t(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{X}_{\mathbf{r}}^{\sigma, 0} \hat{X}_{\mathbf{r}'}^{0, \sigma}. \quad (5)$$

Входящие в гамильтониан X -операторы удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$\begin{aligned} \{X_{\mathbf{r}}^{+,0}, X_{\mathbf{r}'}^{0,-}\} &= X_{\mathbf{r}}^{+,-} \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}, \\ \{X_{\mathbf{r}}^{\sigma,0}, X_{\mathbf{r}'}^{0,\sigma}\} &= (X_{\mathbf{r}}^{0,0} + X^{\sigma,\sigma}) \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}. \end{aligned} \quad (6)$$

Остальные антикоммутируют равны нулю.

Определим основное, $|0\rangle$, одночастичное, $X_{\mathbf{r}}^{\sigma,0}|0\rangle$, и двухчастичное, $X_{\mathbf{r}}^{+,0}X_{\mathbf{r}'}^{-,0}|0\rangle$, состояния и найдем их энергии.

Обозначим через E_0 энергию основного состояния: $\hat{H}|0\rangle = E_0|0\rangle$. Энергия одночастичных возбуждений, отсчитанная от энергии основного состояния, определяется через коммутатор $[\hat{H}, X_{\mathbf{r}}^{\sigma,0}]$:

$$\begin{aligned} \hat{H}X_{\mathbf{r}}^{\sigma,0}|0\rangle - X_{\mathbf{r}}^{\sigma,0}\hat{H}|0\rangle &= (E_1 - E_0)X_{\mathbf{r}}^{\sigma,0}|0\rangle = \\ &= \epsilon_{\mathbf{p}}^{(\sigma)} X_{\mathbf{r}}^{\sigma,0}|0\rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Точно так же энергию двухчастичных возбуждений находим через коммутатор $[\hat{H}, X_{\mathbf{r}}^{+,0}X_{\mathbf{r}'}^{-,0}]$:

$$\begin{aligned} \hat{H}X_{\mathbf{r}}^{+,0}X_{\mathbf{r}'}^{-,0}|0\rangle - X_{\mathbf{r}}^{+,0}X_{\mathbf{r}'}^{-,0}\hat{H}|0\rangle &= \\ &= (E_2 - E_0)X_{\mathbf{r}}^{+,0}X_{\mathbf{r}'}^{-,0}|0\rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

Двухчастичный коммутатор $[\hat{H}, X_{\mathbf{r}}^{+,0}X_{\mathbf{r}'}^{-,0}]$ вычисляем с помощью операторного тождества:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, X_{\mathbf{r}}^{+,0}X_{\mathbf{r}'}^{-,0}] &= X_{\mathbf{r}}^{+,0}[\hat{H}, X_{\mathbf{r}'}^{-,0}] - \\ &- X_{\mathbf{r}'}^{-,0}[\hat{H}, X_{\mathbf{r}}^{+,0}] + \{[\hat{H}, X_{\mathbf{r}}^{+,0}]X_{\mathbf{r}'}^{-,0}\}. \end{aligned} \quad (9)$$

Два первых слагаемых преобразуем с помощью определения (7):

$$\begin{aligned} X_{\mathbf{r}}^{+,0}[\hat{H}, X_{\mathbf{r}'}^{-,0}] &= \hat{\epsilon}_{\mathbf{p}}^{(-)} X_{\mathbf{r}}^{+,0}X_{\mathbf{r}'}^{-,0}, \\ X_{\mathbf{r}'}^{-,0}[\hat{H}, X_{\mathbf{r}}^{+,0}] &= \hat{\epsilon}_{\mathbf{p}}^{(+)} X_{\mathbf{r}'}^{-,0}X_{\mathbf{r}}^{+,0}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь и выше \mathbf{p} и \mathbf{p}' — операторы импульса, действующие на \mathbf{r} и \mathbf{r}' .

Третье слагаемое вычисляем непосредственно:

$$\begin{aligned} \{[\hat{H}, X_{\mathbf{r}}^{+,0}]X_{\mathbf{r}'}^{-,0}\} &= \\ &= -\sum_{\mathbf{r}_1} t(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) (X_{\mathbf{r}_1}^{+,0}X_{\mathbf{r}'}^{-,0} + X_{\mathbf{r}}^{+,0}X_{\mathbf{r}_1}^{-,0}) \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}. \end{aligned} \quad (11)$$

В результате действия двухчастичного коммутатора на основное состояние получаем следующее уравнение:

$$\begin{aligned} (E_2 - E_0)X_{\mathbf{r}}^{+,0}X_{\mathbf{r}'}^{-,0}|0\rangle &= \\ &= [\hat{\epsilon}_{\mathbf{p}}^{(+)} + \hat{\epsilon}_{\mathbf{p}}^{(-)}] X_{\mathbf{r}}^{+,0}X_{\mathbf{r}'}^{-,0}|0\rangle + \\ &+ \{[\hat{H}, X_{\mathbf{r}}^{+,0}]X_{\mathbf{r}'}^{-,0}\}|0\rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

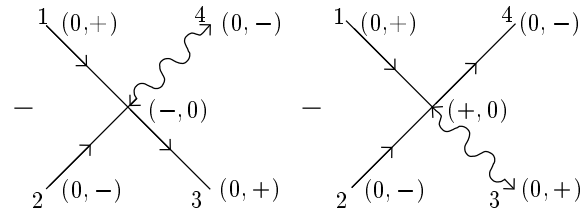


Рис. 1. Борновские амплитуды кинематического взаимодействия (14)

Приближенное выражение оператора одночастичной энергии $\hat{\epsilon}(\mathbf{p})$ нам уже известно из (1). Двойной коммутатор (11) определяет искомый эффект рассеяния.

Переходя в уравнениях (11) и (12) к импульсному представлению

$$X_{\mathbf{r}}^{+,0}X_{\mathbf{r}'}^{-,0}|0\rangle = \sum_{\mathbf{p},\mathbf{q}} \psi(\mathbf{p},\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'),$$

находим явное выражение для двухчастичной энергии взаимодействия:

$$\begin{aligned} (E_2 - E_0)\psi(\mathbf{p},\mathbf{q}) &= [\hat{\epsilon}_{\mathbf{p}}^{(+)} + \hat{\epsilon}_{\mathbf{p}}^{(-)}] \psi(\mathbf{p},\mathbf{q}) - \\ &- \sum_{\mathbf{k}} (t(-\mathbf{k}) + t(\mathbf{k} - \mathbf{p} - \mathbf{q})) \psi(\mathbf{k}, \mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (13)$$

Таким образом, в борновском приближении амплитуда рассеяния зависит только от импульсов рассеянных частиц [2, 3]:

$$\Gamma^{(0)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 | \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) = -t(\mathbf{p}_3) - t(\mathbf{p}_4). \quad (14)$$

На рис. 1 изображены борновские амплитуды, соответствующие формуле (14).

3. ТЕМПЕРАТУРА СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПЕРЕХОДА

Подставляя это выражение в однородную часть уравнения (4), получим уравнение для нахождения точки куперовской неустойчивости:

$$\Gamma_{\mathbf{s}} = T \sum_{\omega, \mathbf{p}} [t_{\mathbf{p}} + t_{\mathbf{s}-\mathbf{p}}] G_{\omega}(\mathbf{p}) G_{-\omega}(\mathbf{s} - \mathbf{p}) \Gamma_{\mathbf{s}}. \quad (15)$$

Подставляя сюда функции Грина из (3) и суммируя по частотам $\omega = \pi T(2n + 1)$, при $\mathbf{s} = 0$ получаем уравнение для нахождения температуры сверхпроводящего перехода T_c :

$$\sum_{\mathbf{p}} \frac{t(\mathbf{p})}{\xi_{\mathbf{p}}} \text{th} \left(\frac{\xi_{\mathbf{p}}}{2T_c} \right) = 1. \quad (16)$$

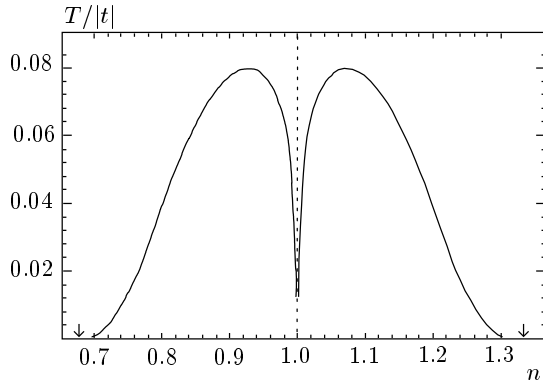


Рис. 2. Кривая концентрационной зависимости $T_c(n)$, вычисленная согласно (16). Стрелками обозначены критические концентрации

Энергия возбуждений ξ_p определена в (1).

Это уравнение вместе с уравнением состояния (2) и условием электронейтральности определяет зависимость температуры сверхпроводящего перехода от концентрации допирующей примеси. На рис. 2 приведена кривая зависимости температуры сверхпроводящего перехода от электронной концентрации (см. [3–5]).

Можно заметить, что интегрирование в (16) происходит в основном вблизи поверхности Ферми, где $\xi_p = 0$, или $t_p \approx \mu/f$. Отсюда сразу заключаем, что для отрицательных значений химического потенциала куперовская неустойчивость не возникает. Этот результат представляется естественным, так как малым значениям химического потенциала соответствуют малые числа заполнения. При этом амплитуда рассеяния должна иметь тот же знак, что и амплитуда рассеяния двух частиц, имеющих малую относительную скорость и бесконечно сильное отталкивание на малых расстояниях.

С повышением энергии относительного движения амплитуда рассеяния убывает и меняет знак при волновом векторе порядка обратного радиуса действия потенциала. Именно такие свойства имеет амплитуда рассеяния (14) при нулевом суммарном импульсе: $\mathbf{s} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4 = 0$.

Как следует из уравнения (16), амплитуда рассеяния, вычисленная на поверхности Ферми, меняет знак при нулевом значении химического потенциала. Используя уравнение состояния при $T = 0$, найдем, что критическое значение $n_d = 2/3$. Начиная с этой концентрации, амплитуда рассеяния оказывается отрицательной, а температура перехода оказывается конечной для $2/3 < n_d < 1$.

Рассмотрение заполнения верхней подзоны Хаббарда приводит к результатам, которые симметричны относительно преобразования частично-дырочной симметрии: $n_d \rightarrow 2 - n_d$. Поэтому оказывается, что эффект куперовского спаривания в данной простейшей модели существует также и в области $1 < n_d < 4/3$.

Таким образом, уже борновское приближение приводит к возможности изменения знака амплитуды рассеяния сразу на всей поверхности Ферми. В результате удается объяснить явление быстрого изменения температуры сверхпроводящего перехода и существования узких областей ВТСП при изменении концентрации допирующей примеси.

С повышением концентрации электронов, когда $n \rightarrow 1$ и происходит полное заполнение нижней хаббардовской подзоны, система переходит в полупроводниковое состояние. При этом радиус экранирования кулоновского потенциала быстро увеличивается и при $n = 1$ и нулевой температуре становится равным бесконечности.

Отсюда заключаем, что при $n \approx 1$ необходимо произвести учет прямого кулоновского межъядерного взаимодействия:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}' (\mathbf{r} \neq \mathbf{r}')} \hat{n}_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}'} \varphi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (17)$$

$$\hat{n}_{\mathbf{r}} = \hat{X}_{\mathbf{r}}^{+,+} + \hat{X}_{\mathbf{r}}^{-,-} + 2\hat{X}_{\mathbf{r}}^{2,2}.$$

Здесь $\hat{n}_{\mathbf{r}}$ — оператор электронной плотности, выраженный через X -операторы Хаббарда.

Учитывая перестановочные соотношения

$$[\hat{X}^{0,\sigma}, \hat{n}] = \hat{X}^{0,\sigma}, \quad \hat{n} = \hat{X}^{+,+} + \hat{X}^{-,-} + 2\hat{X}^{2,2},$$

можно получить выражение для борновской амплитуды рассеяния, обобщающее (14):

$$\Gamma^{(0)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 | \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) = -t(\mathbf{p}_3) - t(\mathbf{p}_4) + \varphi(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_1). \quad (18)$$

На рис. 3 изображены борновские амплитуды кулоновского рассеяния. Здесь используется только первое слагаемое, отвечающее рассеянию в нижней хаббардовской зоне.

Для нахождения температуры сверхпроводящего перехода ограничимся простейшей моделью, когда влияние прямого кулоновского потенциала ограничивается заданным потенциалом взаимодействия V между ближайшими соседями:

$$\varphi(\mathbf{q}) = V \sum_{n.n.} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}).$$

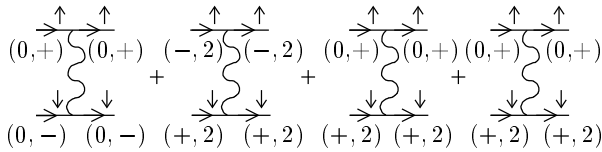


Рис. 3. Амплитуды рассеяния на кулоновском потенциале, записанные через X -операторы

Записанный в таком виде кулоновский потенциал позволяет решать однородное уравнение для нахождения T_c в разделяющихся переменных.

Допустим сразу, что суммарный импульс равен нулю, тогда решение однородного уравнения $\psi(\mathbf{p})$ оказывается зависящим только от относительного импульса налетающих частиц $\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2$:

$$\psi(\mathbf{p}) = -T \sum_{\omega, \mathbf{q}} \Gamma^{(0)}(\mathbf{p}|\mathbf{q}) G_{\omega}(\mathbf{q}) G_{-\omega}(-\mathbf{q}) \psi(\mathbf{q}), \quad (19)$$

где теперь в случае простой кубической или квадратной решетки

$$\begin{aligned} \Gamma^{(0)}(\mathbf{p}|\mathbf{q}) &= -2t_{\mathbf{q}} + \sum_k 2V \cos(p_k - q_k) = \\ &= -2t_{\mathbf{q}} + \sum_k 2V \cos p_k \cos q_k + \\ &\quad + \sum_k 2V \sin p_k \sin q_k. \end{aligned} \quad (20)$$

Если предположить, что неизвестная функция $\psi(\mathbf{p})$ является четной по отношению к изменению знака импульса, то при интегрировании сумма синусов обращается в нуль. Что же касается суммы косинусов, то в силу предполагаемой кубической симметрии интегрирование каждого из слагаемых дает одно и то же число. Поэтому можно утверждать, что в смысле интегрирования по $\cos q_k$ входящая в уравнение вершинная часть вполне эквивалентна следующей:

$$\tilde{\Gamma}^{(0)}(\mathbf{p}|\mathbf{q}) = -2t_{\mathbf{q}} + \beta t_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{q}}, \quad \text{где } \beta = V/Dt^2. \quad (21)$$

В случае ОЦК-решетки для β находим аналогичное выражение, но без множителя $1/D$, который представляет собой обратное число измерений.

Таким образом, мы получили следующее уравнение для определения T_c :

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{p}) &= 2T \sum_{\omega, \mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} G_{\omega}(\mathbf{q}) G_{-\omega}(-\mathbf{q}) \psi(\mathbf{q}) - \\ &\quad - \beta t_{\mathbf{p}} T \sum_{\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{q}} G_{\omega}(\mathbf{q}) G_{-\omega}(-\mathbf{q}) \psi(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (22)$$

Это уравнение без труда решается в разделяющихся переменных: $\psi(\mathbf{p}) = A + Bt_{\mathbf{p}}$. В результате находим условие разрешимости, которое обобщает соотношение (16):

$$\sum_{\mathbf{p}} \frac{t(\mathbf{p})}{\xi_{\mathbf{p}}} \text{th} \left(\frac{\xi_{\mathbf{p}}}{2T_c} \right) = 1 + \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{p}} \frac{t^2(\mathbf{p})}{\xi_{\mathbf{p}}} \text{th} \left(\frac{\xi_{\mathbf{p}}}{2T_c} \right). \quad (23)$$

Здесь $\xi_{\mathbf{p}} = ft_{\mathbf{p}} - \mu$, так что в пределе $T_c = 0$ интеграл остается конечным при выполнении одного из двух условий:

$$\mu = 0 \quad \text{или} \quad ft_{\mathbf{p}} - \mu \equiv C \left(1 - \frac{\beta}{2} t_{\mathbf{p}} \right). \quad (24)$$

Первое не зависит от кулоновского потенциала и определяет меньшую критическую концентрацию (равную $2/3$), начиная с которой появляется сверхпроводимость.

Второе условие сводится к соотношению $\beta = (2 - n)/\mu$, которое определяет большую критическую концентрацию, зависящую от отношения $\beta w \sim V/w$ кулоновского потенциала V к затравочной ширине w электронной подзоны.

При $T = 0$ и $n = 1$ максимальное значение химического потенциала равно $1/2$, так что при $\beta < 2$ вторая критическая концентрация остается равной единице. Иными словами, при $\beta < 2$ сверхпроводимость существует внутри фиксированного интервала концентраций $2/3 < n < 1$. При этом сама температура перехода существенно уменьшается с возрастанием величины β от нуля до двух. Однако при дальнейшем повышении кулоновского потенциала появляется вторая критическая концентрация, которую определяем из системы уравнений

$$\beta = \frac{2f}{\mu}, \quad n = 2f \int_{-1}^{\mu/f} \rho_0(\epsilon) d\epsilon. \quad (25)$$

Поскольку $f = 1 - n/2$, зависимость $n_{c2}(\beta)$ удастся задать в параметрической форме:

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{2}{\zeta}, \quad n_{c2}(\zeta) = \frac{2K(\zeta)}{1 + K(\zeta)}, \\ K(\zeta) &= \int_{-1}^{\zeta} \rho_0(\epsilon) d\epsilon, \quad \zeta = \frac{\mu}{f}, \quad 0 < \zeta < 1. \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь $\rho_0(\epsilon)$ — безразмерная затравочная плотность состояний.

В случае постоянной плотности состояний: $n_{c2} = 2(2 + \beta)/(2 + 3\beta)$. С возрастанием параметра β происходит уменьшение n_{c2} . Наконец, в пределе $\beta \rightarrow \infty$,

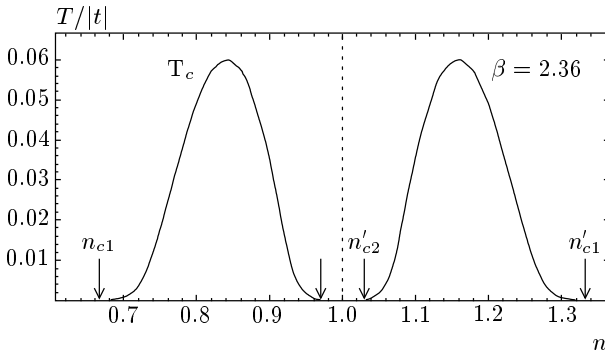


Рис. 4. Кривая концентрационной зависимости $T_c(n)$, вычисленная согласно формуле (23) при $n_{c1} = 2/3$, $n_{c2} = 0.96$, $n'_{c1} = 4/3$, $n'_{c2} = 1.04$

$n_{c2} \rightarrow 2/3$, так что область существования сверхпроводящего состояния исчезает.

Можно проверить, что эти закономерности оказываются справедливыми и в общем случае произвольной затравочной плотности состояний.

На рис. 4 изображена кривая зависимости температуры сверхпроводящего перехода, вычисленная для постоянной плотности состояний. Величина $\beta = 2.36$ соответствует критической концентрации $n'_{c2} = 1.04$, которая наблюдается экспериментально. Сравнение зависимостей $T_c(n)$, представленных на рис. 2 и рис. 4, показывает, что при учете прямого кулоновского взаимодействия происходит заметный сдвиг положения максимума в сторону меньших (и больших) электронных концентраций: от $n_m = 0.93$ к $n_m = 0.84$ (от $n'_m = 1.07$ к $n'_m = 1.16$).

Таким образом, с помощью подбора интенсивности прямого кулоновского отталкивания удастся подогнать критическую концентрацию исчезновения сверхпроводимости. Однако при этом сама температура перехода имеет завышенное значение, поскольку при ее вычислении было использовано борновское приближение для амплитуды рассеяния. Ниже показано, что рассеяние на спиновых флуктуациях приводит к понижению T_c .

4. УЧЕТ ПРОЦЕССОВ РЕЛАКСАЦИИ

Как известно еще из первых работ Хаббарда, электронные возбуждения в нормальной фазе имеют конечную длину свободного пробега, обусловленную рассеянием на зарядовых и спиновых флуктуациях. В предельном случае бесконечной энергии Хаббарда флуктуации одночастичных зарядовых и спиновых состояний определяются продольной и по-

перечной частями спиновых корреляторов, вычисленных в одной и той же элементарной ячейке:

$$K_{\parallel} = \left\langle \Delta \left\{ \hat{X}^{+,0}, \hat{X}^{0,+} \right\}_{\mathbf{r}} \Delta \left\{ \hat{X}^{+,0}, \hat{X}^{0,+} \right\}_{\mathbf{r}} \right\rangle, \quad (27)$$

$$K_{\perp} = \frac{1}{2} \left\langle \left\{ \hat{X}_{\mathbf{r}}^{+,-}, \hat{X}_{\mathbf{r}}^{-,+} \right\} \right\rangle,$$

где

$$\Delta \left\{ \hat{X}^{+,0}, \hat{X}^{0,+} \right\}_{\mathbf{r}} = \hat{X}_{\mathbf{r}}^{+,+} + \hat{X}_{\mathbf{r}}^{0,0} - \left\langle \left(\hat{X}_{\mathbf{r}}^{+,+} + \hat{X}_{\mathbf{r}}^{0,0} \right) \right\rangle.$$

В однопетлевом приближении

$$\left[G_{\omega}^{(\sigma)}(\mathbf{p}) \right]^{-1} = \left[G_{\omega}^{(\sigma),(0)}(\mathbf{p}) \right]^{-1} - \Sigma_{\omega}^{(\sigma)}(\mathbf{p}),$$

$$\Sigma_{\omega}^{(\sigma)}(\mathbf{p}) = K_{\parallel} t(\mathbf{p}) \sum_{\mathbf{p}'} G_{\omega}^{(\sigma)}(\mathbf{p}') t(\mathbf{p}') + K_{\perp} t(\mathbf{p}) \sum_{\mathbf{p}'} G_{\omega}^{(-\sigma)}(\mathbf{p}') t(\mathbf{p}'). \quad (28)$$

Для нормальной парамагнитной фазы уравнения (28) переписываются следующим образом:

$$\left[G_{\omega}^{(\sigma)}(\mathbf{p}) \right]^{(-1)} = i\omega - (f + K_1 \sigma_{\omega}) t_{\mathbf{p}} + \mu, \quad (29)$$

где

$$f = \frac{1+x}{2}, \quad \sigma_{\omega} = \sum_{\mathbf{p}} G_{\omega}(\mathbf{p}) t(\mathbf{p}), \quad (30)$$

$$x = 1 - n, \quad K_1 = K_{\parallel} + K_{\perp}.$$

Уравнения для температуры сверхпроводящего перехода с рассеянием на флуктуациях спиновой и зарядовой плотностей имеют графический вид (рис. 5) и могут быть представлены в аналитической форме:

$$\Gamma_{\omega}(\mathbf{p}) + K_2 \sum_{\mathbf{p}'} G_{\omega}(\mathbf{p}') G_{-\omega}(-\mathbf{p}') t_{\mathbf{p}}^2 \Gamma_{\omega}(\mathbf{p}') = 2T \sum_{\omega', \mathbf{p}'} \Gamma_{\omega'}(\mathbf{p}') G_{\omega'}(\mathbf{p}') G_{-\omega'}(-\mathbf{p}') t_{\mathbf{p}}. \quad (31)$$

Здесь

$$K_2 = K_{\perp} - \left\langle \Delta \left\{ \hat{X}^{+,0}, \hat{X}^{0,+} \right\}_{\mathbf{r}} \Delta \left\{ \hat{X}^{-,0}, \hat{X}^{0,-} \right\}_{\mathbf{r}} \right\rangle.$$

После разделения переменных условия разрешимости уравнений (31) представляются следующим образом:

$$2T \sum_{\omega} \frac{S_{\omega}^{(1)}}{1 + K_2 S_{\omega}^{(2)}} = 1. \quad (32)$$

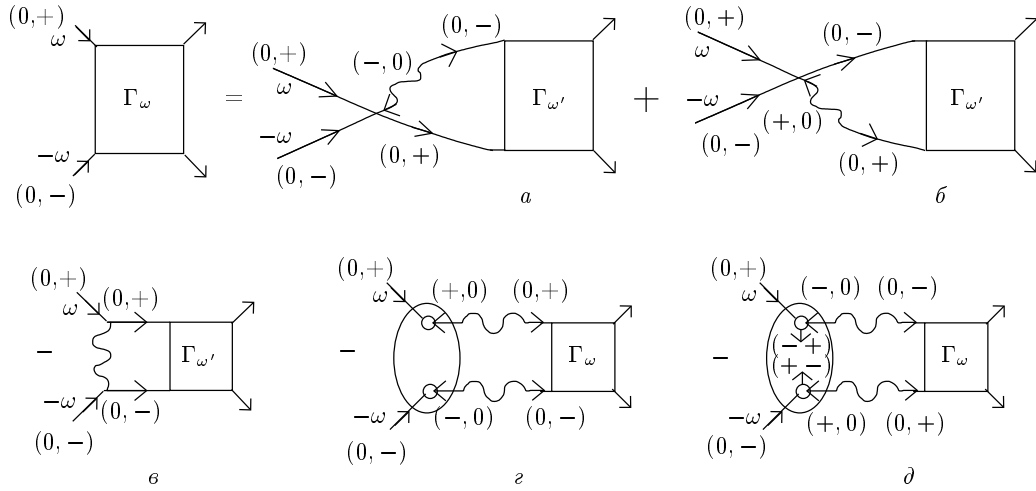


Рис. 5. Однородное уравнение для вершинной части с учетом кинематического (а, б) и кулоновского (в) вкладов, а также рассеяния на продольных (е) и поперечных (д) флуктуациях спина

Суммы по импульсам выражаются через функцию σ_ω , возникающую из условия самосогласования (30):

$$\begin{aligned}
 S_\omega^{(1)} &= \sum_{\mathbf{p}} t(\mathbf{p}) G_\omega(\mathbf{p}) G_{-\omega}(-\mathbf{p}) = \\
 &= \frac{\sigma_r [K_1 \sigma_s + f]}{\mu K_1 \sigma_r - 2i\omega f - i\omega K_1 \sigma_s}, \\
 S_\omega^{(2)} &= \sum_{\mathbf{p}} t^2(\mathbf{p}) G_\omega(\mathbf{p}) G_{-\omega}(-\mathbf{p}) = \\
 &= \frac{\mu \sigma_r + i\omega \sigma_s}{\mu K_1 \sigma_r - 2i\omega f - i\omega K_1 \sigma_s}.
 \end{aligned} \tag{33}$$

Здесь введены обозначения $\sigma_{s,r} = \sigma_\omega \pm \sigma_{-\omega}$. Подстановка этих соотношений в (32) приводит к следующему уравнению:

$$2T \sum_{\omega} \frac{\sigma_r (f + K_s \sigma_s)}{\mu K_s \sigma_r - 2i\omega f - i\omega K_r \sigma_s} = 1, \tag{34}$$

где $K_{s,r} = K_1 \pm K_2$, а в низкотемпературном пределе, когда $K_{1,2} \rightarrow 0$, получаем уравнение (16) для температуры сверхпроводящего перехода в идеальной модели.

Величины $\sigma_{r,s}$ можно выразить через плотность состояний на поверхности Ферми $\rho = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\xi_{\mathbf{p}})$:

$$\begin{aligned}
 \sigma_s &= \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{p}}} + \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} \frac{1}{-i\omega_n - \xi_{\mathbf{p}}} = \\
 &= - \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} \frac{2\xi_{\mathbf{p}}}{\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2} = \\
 &= -2t^* \rho \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{2\xi}{\omega_n^2 + \xi^2} = 0,
 \end{aligned} \tag{35a}$$

$$\begin{aligned}
 \sigma_r &= -2 \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} \frac{i\omega}{\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2} = -2i\omega t^* \rho \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{\omega_n^2 + \xi^2} = \\
 &= -2i\omega t^* \rho \frac{\pi}{|\omega_n|} = -2it^* \pi \rho \text{sign}(\omega_n).
 \end{aligned} \tag{35б}$$

Значение t^* определяется из условия $\xi(t^*) = 0$, а плотность состояний на поверхности Ферми выражается через затравочную плотность состояний $\rho_0(\epsilon) = \sum \delta(\epsilon - t_{\mathbf{p}})$:

$$\begin{aligned}
 \xi(t^*) &= ft^* - \mu = 0, \quad \rho = \sum_{\mathbf{p}} \delta(ft_{\mathbf{p}} - \mu) = \\
 &= \int \rho_0(\epsilon) \delta(f\epsilon - \mu) d\epsilon = \frac{1}{f} \rho_0 \left(\frac{\mu}{f} \right).
 \end{aligned} \tag{36}$$

Таким образом, фактически в уравнение (34) входит только комбинация μK_s , которая имеет смысл обратного времени релаксации с переворотом спина.

Для установления температурной зависимости времени релаксации с переворотом спина выразим величину K_s через среднеквадратичные флуктуации спина.

Преобразуем исходное выражение K_s следующим образом:

$$\begin{aligned}
 K_s &= 2K_{\perp} + \left\langle \Delta \left\{ \hat{X}^{+,0}, \hat{X}^{0,+} \right\}_{\mathbf{r}} \Delta \left\{ \hat{X}^{+,0}, \hat{X}^{0,+} \right\}_{\mathbf{r}} \right\rangle - \\
 &- \left\langle \Delta \left\{ \hat{X}^{+,0}, \hat{X}^{0,+} \right\}_{\mathbf{r}} \Delta \left\{ \hat{X}^{-,0}, \hat{X}^{0,-} \right\}_{\mathbf{r}} \right\rangle = \\
 &= 2K_{\perp} + \frac{1}{2} \left\langle \left(\Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{+,+} + \Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{0,0} \right) \times \right. \\
 &\quad \times \left(\Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{+,+} - \Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{-,-} \right) \rangle + \\
 &\quad + \frac{1}{2} \left\langle \left(\Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{-,-} + \Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{0,0} \right) \times \right. \\
 &\quad \times \left(\Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{-,-} - \Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{+,+} \right) \rangle = \\
 &= 2K_{\perp} + \frac{1}{2} \left\langle \left(\Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{+,+} - \Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{-,-} \right) \times \right. \\
 &\quad \times \left(\hat{X}_{\mathbf{r}}^{+,+} - \Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{-,-} \right) \rangle = \\
 &= 2K_{\perp} + \frac{1}{2} \left\langle \left(\Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{+,+} - \Delta \hat{X}_{\mathbf{r}}^{-,-} \right)^2 \right\rangle. \quad (37)
 \end{aligned}$$

Удобно ввести операторы электронного спина

$$\begin{aligned}
 \hat{S}^z &= \frac{1}{2} \left(\hat{X}^{+,+} - \hat{X}^{-,-} \right), \\
 \hat{S}^+ &= \hat{S}^x + i\hat{S}^y = \hat{X}^{+,-}, \\
 \hat{S}^- &= \hat{S}^x - i\hat{S}^y = \hat{X}^{-,+}.
 \end{aligned} \quad (38)$$

Тогда величина K_s выражается через сумму среднеквадратичных спиновых флуктуаций:

$$\begin{aligned}
 K_s &= 2\langle \hat{S}_{\mathbf{r}}^+ \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \rangle + 2 \left\langle \left(\Delta \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \right)^2 \right\rangle = \\
 &= 2 \sum_{k=x,y,z} \left\langle \left(\Delta \hat{S}_{\mathbf{r}}^k \right)^2 \right\rangle. \quad (39)
 \end{aligned}$$

Из соображений изотропии эта сумма выражается через среднеквадратичную флуктуацию $\langle (\Delta S_{\mathbf{r}}^z)^2 \rangle$, которая, в свою очередь, выражается через статическую спиновую восприимчивость:

$$K_s = 6 \langle (\Delta \hat{S}_{\mathbf{r}}^z)^2 \rangle = 6T \frac{\partial \langle S^z \rangle}{\partial H} = 6T \chi(T). \quad (40)$$

Здесь $\chi(T)$ — статическая восприимчивость нормальной фазы.

В работе автора [6] показано, что спиновая магнитная восприимчивость в модели Хаббарда с бесконечным отталкиванием определяется следующим выражением:

$$\begin{aligned}
 \chi(n, T) &= 2 \frac{\partial n^{\sigma}}{\partial h} = \\
 &= \frac{-2fD_0}{1-K-fD_1-(1-K)D_1-f(D_0D_2-D_1^2)}. \quad (41)
 \end{aligned}$$

В силу уравнения состояния величина K выражается через электронную плотность, а остальные коэф-

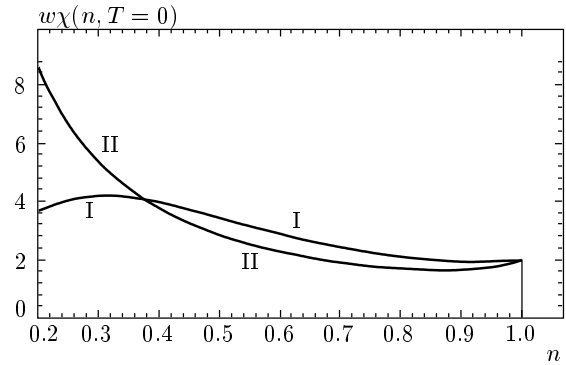


Рис. 6. Концентрационная зависимость магнитной восприимчивости при $T = 0$ для полуэллиптической плотности состояний (I) и для модели плоской зоны (II)

фициенты выражаются через интегралы от производной функции Ферми:

$$\begin{aligned}
 1 - K &= \frac{2(1-n)}{(2-n)}, \quad f = 1 - \frac{n}{2}, \\
 D_k &= \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^k n'_F(\xi_{\mathbf{p}}).
 \end{aligned} \quad (42)$$

При $T \rightarrow 0$ эти коэффициенты, в свою очередь, выражаются через затравочную плотность состояний $\rho_0(\epsilon)$, а затем через плотность состояний на поверхности Ферми:

$$\begin{aligned}
 \rho_0(\epsilon) &= \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{p}}), \quad K = \int \rho_0(\epsilon) \theta(\mu - f\epsilon) d\epsilon, \\
 D_s &= - \int \epsilon^s \rho_0(\epsilon) \delta(f\epsilon - \mu) d\epsilon.
 \end{aligned} \quad (43)$$

В пределе $T = 0$ выполняется соотношение $D_0 D_2 = D_1^2$, так что концентрационная зависимость восприимчивости определяется через два коэффициента D_0 и D_1 :

$$\begin{aligned}
 \chi(n, 0) &= \frac{-2fD_0}{1-K-(1-K+f)D_1} = \\
 &= \frac{2\rho_0(\mu/f)}{1-K+(1-K+f)(\mu/f^2)\rho_0(\mu/f)}. \quad (44)
 \end{aligned}$$

Поскольку плотность состояний $\rho_0(\epsilon)$, а также множитель $1-K+f$ всегда положительны, можно утверждать, что для малых концентраций (при $\mu < 0$) наша система обнаруживает тенденцию к ферромагнетизму.

В случае постоянной затравочной плотности состояний $\rho_0(\epsilon) = \theta(1 - \epsilon^2)/2w$ при $T = 0$ восприимчи-

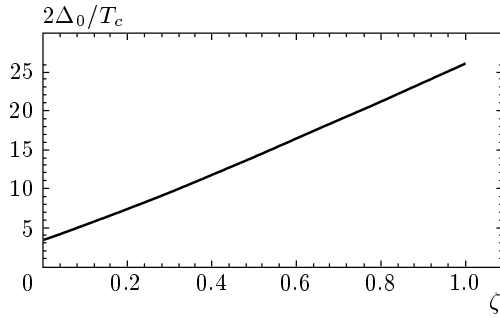


Рис. 7. Безразмерное отношение $2\Delta_0/T_c$, построенное согласно соотношению (50)

вость обращается в бесконечность только при $n = 0$ (см. рис. 6):

$$\chi(n, T = 0) = \frac{1}{w} \frac{2(2 - n)^3}{n(8 - 6n - n^2)}, \quad (45)$$

где n — электронная плотность, а w — энергетическая полуширина нижней хаббардовской подзоны.

Для квадратной и ОЦК-решеток плотность состояний логарифмическим образом обращается в бесконечность на нулевом энергетическом уровне. Однако влияние особенности знаменателя компенсируется энергетическим множителем μ/f , так что магнитная восприимчивость остается положительной при всех концентрациях.

При конечной температуре для постоянной плотности состояний все интегралы вычисляются в явной форме, удается определить химический потенциал, а затем и саму магнитную восприимчивость (см. рис. 6).

При малой концентрации получаем закон Кюри–Вейсса, соответствующий газовой фазе, так что в этом пределе среднеквадратичный коррелятор не зависит от температуры и равен своему классическому значению $S(S + 1) = 3/4$.

При промежуточных концентрациях закон Кюри–Вейсса справедлив только при достаточно высокой температуре, в то время как при низкой температуре ($T \ll t$) наблюдается паулиевская спиновая восприимчивость с фактором Стонера, существенно превышающим единицу (см. рис. 6). При этом сама восприимчивость нигде не обращается в бесконечность, так что при всех концентрациях система остается парамагнитной (см. работы [7, 8]).

Таким образом, можно утверждать, что при $T \ll t$ и при $n \gg T/t$ величина $K_s \rightarrow 0$ по линейному температурному закону с коэффициентом пропорциональности, равным предельному значению восприимчивости при $T = 0$.

Отсюда заключаем, что спиновые корреляторы линейно зависят от температуры и существенно зависят от степени допирования $x = 1 - n$.

Если провести вычисления с нулевыми значениями флуктуации спина, а затем вычестить из полученного уравнения соответствующую сумму по частотам из левой стороны соотношения (34), то удастся получить более простое уравнение для нахождения температуры сверхпроводящего перехода T_c . (Аналогичные вычисления см. в [9].)

Можно заметить, что после вычитания суммы по частотам берутся в области $|\omega_n| \approx T_c$, поэтому вместо функции $\sigma_r(\omega)$ достаточно взять предел $\text{sign}(\omega)\sigma_r(0+)$. После этого вычисляем правую сторону с логарифмической точностью, в то время как разностная сумма в левой стороне может быть выражена через дигамма-функцию $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{g} + \psi \left[\frac{1}{2} + \frac{\mu\sigma^* K_s}{4\pi f T_c} \right] - \psi \left(\frac{1}{2} \right) = \\ = \int_0^{\bar{\omega}} \frac{\text{th}(\xi/2T_c)}{\xi} d\xi = \ln \frac{2\gamma\bar{\omega}}{\pi T_c}. \end{aligned} \quad (46)$$

Здесь все величины вычислены на уровне Ферми $\epsilon^* = \mu/f$ и выражаются через затравочную плотность состояний $\rho_0(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{p}})$:

$$\sigma^* = 2\pi\epsilon^* \rho_0(\epsilon^*)/f, \quad g = 2\epsilon^* \rho_0(\epsilon^*)/f. \quad (47)$$

Корреляционная функция K_s обращается в нуль в пределе $T \rightarrow 0$ и является линейной функцией температуры при $T \gg w$. По этой последней причине роль спиновых флуктуаций сводится к перенормировке константы БКШ:

$$\begin{aligned} \frac{1}{g} \rightarrow \frac{1}{g^*} = \frac{1}{g} + \psi \left[\frac{1}{2} + \frac{\mu\sigma^* K_s}{4\pi f T_c} \right] - \psi \left(\frac{1}{2} \right), \\ \pi T_c \approx \gamma\bar{\omega} \exp \left(-\frac{1}{g^*} \right). \end{aligned} \quad (48)$$

К этому соотношению добавляем уравнение для нахождения энергетической щели при $T = 0$:

$$\frac{1}{g} = \ln \frac{2\bar{\omega}}{\Delta_0}. \quad (49)$$

Таким образом, отношение $2\Delta_0/T_c$ зависит от параметра $\zeta = \mu\sigma^* K_s/4\pi f T$, вычисленного при $T = T_c$:

$$\frac{2\Delta_0}{T_c} = 8\pi \exp \left[\psi \left(\frac{1}{2} + \zeta \right) \right]. \quad (50)$$

Поскольку величина K_s пропорциональна отношению температуры к абсолютному значению интеграла перескока, в конечном счете параметр ζ оказывается порядка единицы. Соответственно этому, величина $2\Delta_0/T_c$ принимает завышенное значение по сравнению с известным числом, примерно равным 3.53, которое оно должно было бы иметь согласно классической теории БКШ. Это явление можно наблюдать у большей части высокотемпературных сверхпроводников.

Измеренные значения величины $2\Delta_0/3.53T_c$ для различных ВТСП лежат в интервале от 1.27 до 3.12. Как видно на рис. 7, этим величинам соответствуют значения параметра $\zeta \approx 0.05-0.55$. Так, для $YBa_2Cu_3O_7$, у которого в экспериментах $2\Delta_0/3.53T_c \approx 1.98-2.27$, находим $\zeta \approx 0.2$.

5. КОНЕЧНАЯ ЭНЕРГИЯ ХАББАРДА

Для написания уравнения состояния запишем обратную функцию Грина, ограничиваясь простейшим нульпетлевым приближением. При нулевом внешнем магнитном поле и для заданной проекции спина обратная функция Грина представляется следующей матрицей:

$$G_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} i\omega - \epsilon_1 - f_1 t_{\mathbf{p}}, & -\sigma f_1 t_{\mathbf{p}} \\ -\sigma f_2 t_{\mathbf{p}}, & i\omega - \epsilon_2 - f_2 t_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}. \quad (51)$$

Здесь $\epsilon_1 = -\mu$ и $\epsilon_2 = U - \mu$ — соответственно энергии перехода между пустым и одночастичным, а также между одночастичным и двухчастичным уровнями, которые различаются на энергию Хаббарда U ; $f_1 = 1 - n/2$, $f_2 = n/2$ — концевые множители, выраженные через электронную плотность n .

В рамках нульпетлевого приближения уравнение состояния записывается через сумму всевозможных произведений компонент одночастичной функции Грина на соответствующие концевые множители:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_{\mathbf{r}}^{\sigma} + \hat{a}_{\mathbf{r}}^{\bar{\sigma}} \rangle &= \\ &= \left\langle \left(\hat{X}_{\mathbf{r}}^{\sigma,0} + \sigma \hat{X}_{\mathbf{r}}^{2,-\sigma} \right) \left(\hat{X}_{\mathbf{r}}^{0,\sigma} + \sigma \hat{X}_{\mathbf{r}}^{-\sigma,2} \right) \right\rangle = \\ &= T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \exp(i\omega\delta) \left\{ \left(G_{\omega}^{11}(\mathbf{p}) + \sigma G_{\omega}^{21}(\mathbf{p}) \right) f_1 + \right. \\ &\quad \left. + \left(G_{\omega}^{22}(\mathbf{p}) + \sigma G_{\omega}^{12}(\mathbf{p}) \right) f_2 \right\}. \quad (52) \end{aligned}$$

В результате вычисления и подстановки матричных

элементов, а также суммирования по проекции спина получаем следующее соотношение:

$$n = 2T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \exp(i\omega\delta) \left\{ \frac{(i\omega - \epsilon_2)f_1 + (i\omega - \epsilon_1)f_2}{(i\omega - \xi_{\mathbf{p}}^+)(i\omega - \xi_{\mathbf{p}}^-)} \right\}. \quad (53)$$

Здесь

$$\xi_{\mathbf{p}}^{\pm} = \frac{U}{2} + \frac{t_{\mathbf{p}}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2 - 2U(1-n)t_{\mathbf{p}}} - \mu$$

— две ветви энергетического спектра одночастичных возбуждений.

Разложим выражение, стоящее под знаком суммы, на простые множители:

$$\begin{aligned} n &= 2T \sum_{\mathbf{p}, \lambda=\pm} A^{\lambda}(\mathbf{p}) n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{\lambda}), \\ A^{\pm} &= \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{t_{\mathbf{p}} - U(1-n)}{\sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2 - 2U(1-n)t_{\mathbf{p}}}} \right]. \quad (54) \end{aligned}$$

Условия возникновения куперовской неустойчивости при конечной энергии Хаббарда содержат две пары уравнений для двух типов возбуждений $(0, \sigma)$ и $(-\sigma, 2)$, которые различаются направлением проекции спинов и знаком энергии переходов $\epsilon_1 = \epsilon_{\sigma} - \epsilon_0$ и $\epsilon_2 = \epsilon_2 - \epsilon_{-\sigma}$ (см. рис. 8).

Учитывая перестановочные соотношения для операторов электронной плотности,

$$\begin{aligned} [\hat{X}^{0,\sigma}, \hat{n}] &= \hat{X}^{0,\sigma}, \quad [\hat{X}^{-\sigma,2}, \hat{n}] = \hat{X}^{-\sigma,2}, \\ \hat{n} &= \hat{X}^{+,+} + \hat{X}^{-,-} + 2\hat{X}^{2,2}, \end{aligned} \quad (55)$$

нетрудно получить кулоновские поправки к четырем амплитудам рассеяния (см. рис. 3).

Если также использовать двойные перестановочные соотношения между четырьмя X -операторами, $\hat{X}^{0,\sigma}$, $\hat{X}^{-\sigma,2}$ и $\hat{X}^{\sigma,0}$, $\hat{X}^{2,-\sigma}$, тогда находим систему однородных уравнений для четырех вершинных частей:

$$\Gamma_{11} = \Gamma(0 + |0-), \quad \Gamma_{22} = \Gamma(-2 | +2),$$

$$\Gamma_{12} = \Gamma(0 + | +2), \quad \Gamma_{21} = \Gamma(-2 | 0-),$$

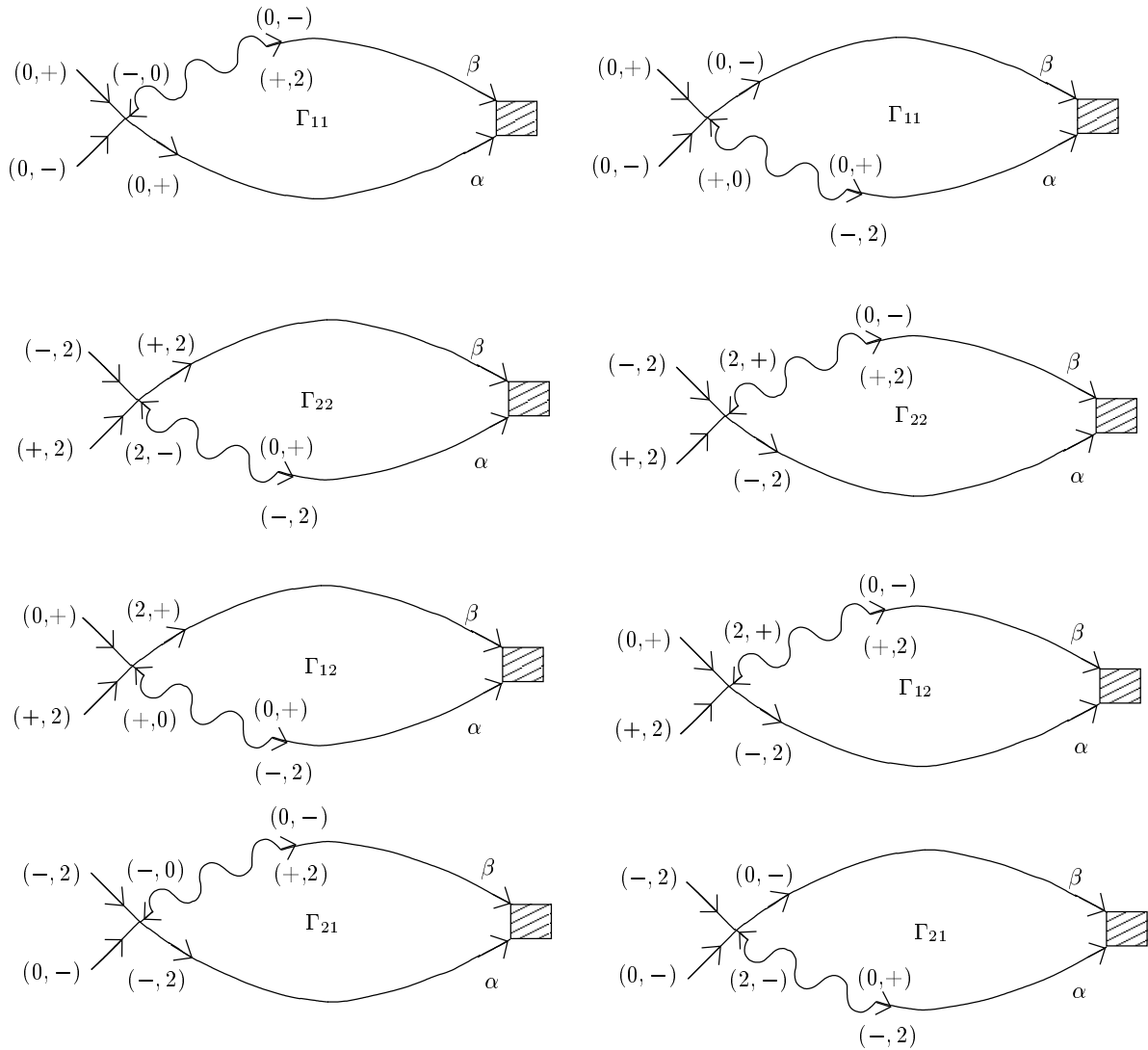


Рис. 8. Правая сторона однородной системы уравнений для четырех вершинных частей $\Gamma_{i,k}$. Заштрихованные квадраты изображают вершинные части $\Gamma_{\alpha,\beta}$. Индексы « α » и « β » нумеруют соответствующие переходы $(0,+)$, $(-,2)$ и $(0,-)$, $(+,2)$

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{11} &= A_{\alpha',\beta'} \Gamma_{\alpha',\beta'} - \beta t(\mathbf{p}) T \times \\
 &\times \sum_{\omega, \mathbf{p}'} G_{\omega}^{0+|\alpha'}(\mathbf{p}') G_{-\omega}^{0-|\beta'}(-\mathbf{p}') t(\mathbf{p}') \Gamma_{\alpha',\beta'}, \\
 \Gamma_{22} &= B_{\alpha',\beta'} \Gamma_{\alpha',\beta'} - \beta t(\mathbf{p}) T \times \\
 &\times \sum_{\omega, \mathbf{p}'} G_{\omega}^{-2|\alpha'}(\mathbf{p}') G_{-\omega}^{+2|\beta'}(-\mathbf{p}') t(\mathbf{p}') \Gamma_{\alpha',\beta'}, \\
 \Gamma_{12} &= \frac{1}{2} (A_{\alpha',\beta'} - B_{\alpha',\beta'}) \Gamma_{\alpha',\beta'} - \beta t(\mathbf{p}) T \times \\
 &\times \sum_{\omega, \mathbf{p}'} G_{\omega}^{0+|\alpha'}(\mathbf{p}') G_{-\omega}^{+2|\beta'}(-\mathbf{p}') t(\mathbf{p}') \Gamma_{\alpha',\beta'}, \\
 \Gamma_{21} &= \frac{1}{2} (B_{\alpha',\beta'} - A_{\alpha',\beta'}) \Gamma_{\alpha',\beta'} - \beta t(\mathbf{p}) T \times \\
 &\times \sum_{\omega, \mathbf{p}'} G_{\omega}^{-2|\alpha'}(\mathbf{p}') G_{-\omega}^{0+|\beta'}(-\mathbf{p}') t(\mathbf{p}') \Gamma_{\alpha',\beta'}.
 \end{aligned} \tag{56}$$

Здесь индексы « α' » и « β' » пробегают независимо по два значения: $(0,+)$, $(-,2)$ и соответственно $(0,-)$, $(+,2)$. Непосредственное вычисление матричных элементов $A_{\alpha,\beta}$ и $B_{\alpha,\beta}$ приводит к следующей системе соотношений:

$$\begin{aligned}
 A_{11} &= T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}} \{ (i\omega_1 - \epsilon_2) (i\omega_2 - \epsilon_2 - f_2 t_{\mathbf{p}}) + \\
 &\quad + (i\omega_1 - \epsilon_2) (i\omega_2 - \epsilon_2 - f_2 t_{\mathbf{p}}) \}, \\
 A_{22} &= -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}}^2 f_1 \{ (i\omega_1 - \epsilon_1) + (i\omega_2 - \epsilon_1) \},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_{12} &= -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}} \{ (i\omega_1 - \epsilon_2) f_1 t_{\mathbf{p}} + \\
 &\quad + (i\omega_1 - \epsilon_2 - f_2 t_{\mathbf{p}}) (i\omega_2 - \epsilon_1) \}, \\
 A_{21} &= T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}} \{ (i\omega_1 - \epsilon_1) (i\omega_2 - \epsilon_2 - f_2 t_{\mathbf{p}}) + \\
 &\quad + (i\omega_2 - \epsilon_2) f_1 t_{\mathbf{p}} \}, \\
 B_{11} &= T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}}^2 f_2 \{ (i\omega_1 - \epsilon_2) + (i\omega_2 - \epsilon_2) \}, \\
 B_{22} &= \\
 &= -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}} \{ (i\omega_1 - \epsilon_1) (i\omega_2 - \epsilon_1 - f_1 t_{\mathbf{p}}) + \\
 &\quad + (i\omega_1 - \epsilon_1) (i\omega_2 - \epsilon_1 - f_1 t_{\mathbf{p}}) \}, \\
 B_{12} &= -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}} \{ (i\omega_1 - \epsilon_2) (i\omega_2 - \epsilon_1 - f_1 t_{\mathbf{p}}) + \\
 &\quad + (i\omega_2 - \epsilon_1) f_2 t_{\mathbf{p}} \}, \\
 B_{21} &= T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}} \{ (i\omega_2 - \epsilon_2) (i\omega_1 - \epsilon_1 - f_1 t_{\mathbf{p}}) + \\
 &\quad + (i\omega_2 - \epsilon_1) f_2 t_{\mathbf{p}} \},
 \end{aligned} \tag{57}$$

$$\begin{aligned}
 \Phi &= \left[\left(\omega_n^2 + \xi_{(+)}^2 \right) \left(\omega_n^2 + \xi_{(-)}^2 \right) \right]^{-1}, \\
 \xi_{\pm} &= \frac{U}{2} + \frac{t_{\mathbf{p}}}{2} - \mu \pm \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2 - 2U(1-n)t_{\mathbf{p}}}.
 \end{aligned} \tag{58}$$

Здесь

$$\begin{aligned}
 i\omega_1 &= -i\omega_2 = i\omega_n = i\pi T(2n+1), \\
 \epsilon_1 &= -\mu, \quad \epsilon_2 = U - \mu, \\
 f_1 &= f(\sigma, 0) = \left\langle \left(\hat{X}^{(\sigma, \sigma)} + \hat{X}^{(0, 0)} \right) \right\rangle, \\
 f_2 &= f(2, -\sigma) = \left\langle \left(\hat{X}^{(-\sigma, -\sigma)} + \hat{X}^{(2, 2)} \right) \right\rangle.
 \end{aligned}$$

Коэффициенты обладают симметрией: при замене $\epsilon_1 \leftrightarrow \epsilon_2$, $f_1 \leftrightarrow f_2$ происходит замена $A_{11} \leftrightarrow -B_{22}$, $B_{11} \leftrightarrow -A_{22}$, $A_{12} \leftrightarrow -B_{21}$, $A_{21} \leftrightarrow -B_{12}$.

После разделения переменных получаем следующие уравнения:

$$\begin{aligned}
 x_i &= A_{ik}^{(1)} x_k + A_{ik}^{(2)} y_k, \quad A_{ik}^{(\alpha)} = -A_{ki}^{(\alpha)}, \\
 y_i &= B_{ik}^{(1)} x_k + B_{ik}^{(2)} y_k, \quad i, k = 1, 2, 3.
 \end{aligned} \tag{59}$$

Первый индекс соответствует рассеянию $(0, +)$ на $(0, -)$ -возбуждению; второй индекс отвечает рассеянию $(-, 2)$ на $(+, 2)$ -возбуждению; третий индекс — рассеянию смешанного типа: $(0, +)$ на $(-, 2)$. Четвертый индекс отсутствует, поскольку можно заметить, что $x_4 = -x_3$, $y_4 = -y_3$. Можно также заметить, что $x_3 = (x_1 - x_2)/2$. Это соотношение находим, исходя из явного вида матриц $A^{(\alpha)}$. После суммирования по частотам оказывается, что выражения, стоящие под знаком суммы, зависят от импульса только через функцию $t_{\mathbf{p}}$, так что удобно ввести затравочную функцию плотности состояний: $\rho_0(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{p}})$.

Кроме того, для нахождения полюсной части сингулярных интегралов можно заметить, что интегрирование проводится вблизи поверхности Ферми, которая определяется с помощью соотношения $\xi_{\mathbf{p}}^- = 0$. Использование этого условия позволяет вместо химического потенциала μ фиксировать величину интеграла перескока $t_{\mathbf{p}} = t^*$, которую находим из условия

$$\mu = \frac{U}{2} + \frac{t^*}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + (t^*)^2 - 2U(1-n)t^*}. \tag{60}$$

В результате удается выразить все интегралы через t^* , $\epsilon_1 = -\mu$ и $\epsilon_2 = -\mu + U$,

$$\begin{aligned}
 \hat{A}^{(1)} &= L \begin{pmatrix} -2t_*^2 f_1 \epsilon_2^2 \epsilon_1^{-1} & 2t_*^2 \epsilon_1 f_1 & 2t_*^2 \epsilon_2 f_1 \\ -2t_*^2 f_2 \epsilon_2 & 2t_*^2 \epsilon_1^2 f_2 \epsilon_2^{-1} & 2t_*^2 \epsilon_1 f_2 \\ -t_*^2 \epsilon_2 \epsilon_1^{-1} (f_1 \epsilon_2 - f_2 \epsilon_1) & t_*^2 \epsilon_1 \epsilon_2^{-1} (f_1 \epsilon_2 - f_2 \epsilon_1) & t_*^2 (f_1 \epsilon_2 - f_2 \epsilon_1) \end{pmatrix}, \\
 \hat{A}^{(2)} &= t_* \hat{A}^{(1)}, \quad t_* = -\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{f_1 \epsilon_2 + f_2 \epsilon_1}, \quad L = T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \frac{1}{\left(\omega_n^2 + \xi_{(+)}^2 \right) \left(\omega_n^2 + \xi_{(-)}^2 \right)}.
 \end{aligned} \tag{61}$$

Матрицы $B^{(2)} = t_* B^{(1)}$ также имеют сильное вырождение:

$$\hat{B}^{(2)} = -\beta L \begin{pmatrix} t_*^4 f_1^2 \epsilon_2^2 \epsilon_1^{-2} & -t_*^4 f_1^2 & -t_*^4 \epsilon_2 \epsilon_1^{-1} f_1^2 \\ -t_*^4 f_2^2 & t_*^4 \epsilon_1^2 f_2^2 \epsilon_2^{-2} & t_*^4 \epsilon_1 f_2^2 \epsilon_2^{-1} \\ -t_*^4 f_1 f_2 \epsilon_2 \epsilon_1^{-1} & t_*^4 f_1 f_2 \epsilon_1 \epsilon_2^{-1} & t_*^4 f_1 f_2 \end{pmatrix}. \tag{62}$$

Переменные $x_{1,2}$ и $y_{1,2,3,4}$ выражаются друг через друга с помощью соотношений, которые следуют из вида матриц A и B :

$$\begin{aligned} x_1 &= x_2 \frac{f_1 \epsilon_2}{f_2 \epsilon_1}, & x_3 &= -x_4 = \frac{(x_1 - x_2)}{2}, \\ y_1 &= -y_2 \frac{f_1^2 \epsilon_2^2}{f_2^2 \epsilon_1^2}, & y_3 &= -y_4 = -y_1 \frac{f_2 \epsilon_1}{f_1 \epsilon_2}. \end{aligned} \quad (63)$$

В результате подстановки этих соотношений в уравнения (59) получаем следующие условия их разрешимости:

$$\begin{aligned} \Lambda \int_0^{\bar{\omega}} \frac{\text{th}(\xi/2T)}{\xi} d\xi &= 1, \\ \Lambda &= - \left[\frac{2U\epsilon_1\epsilon_2}{f_2\epsilon_1^2 + f_1\epsilon_2^2} + \beta t_*^2 \right] \rho_0(t_*) \left| \frac{\partial \xi^{(-)}(\mathbf{p})}{\partial t_{\mathbf{p}}} \right|^{-1}. \end{aligned} \quad (64)$$

Здесь вычисления проделаны для нижней подзоны Хаббарда, так что частная производная вычисляется при условии $\xi^{(-)}(\mathbf{p}) = 0$ или при $t(\mathbf{p}) = t^*$.

Сверхпроводимость реализуется для положительных значений Λ , которая имеет смысл эффективной константы БКШ. Коэффициенты, входящие в уравнение (64), выражаются через степень недозаполнения $x = 1 - n$ и химический потенциал $\bar{\mu} = \mu - U/2$. В результате имеем

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= -\bar{\mu} - \frac{U}{2}, & \epsilon_2 &= -\bar{\mu} + \frac{U}{2}, \\ f_1 &= \frac{1+x}{2}, & f_2 &= \frac{1-x}{2}, & t_* &= \frac{U^2 - 4\bar{\mu}^2}{2(Ux - 2\bar{\mu})}, \\ - \frac{2U\epsilon_1\epsilon_2}{f_2\epsilon_1^2 + f_1\epsilon_2^2} - \beta t_*^2 &= (U^2 - 4\bar{\mu}^2) \times \\ &\times \left\{ \frac{2U}{U^2 + 4\bar{\mu}^2 + 4xU\bar{\mu}} - \beta \frac{(U^2 - 4\bar{\mu}^2)}{4(Ux - 2\bar{\mu})^2} \right\}. \end{aligned} \quad (65)$$

После подстановки этих выражений в (64) становится ясно, что при заданном конечном значении межзельного кулоновского отталкивания электронов (параметр β) фазовая диаграмма оказывается симметричной относительно одновременной замены $\bar{\mu} \rightarrow -\bar{\mu}$, $x \rightarrow -x$. Удаётся показать, что в случае четной затравочной плотности состояний $\rho_0(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon - t(\mathbf{p}))$ зависимость $\bar{\mu}(x)$ является антисимметричной. По этой причине фазовая диаграмма существования сверхпроводящего состояния в переменных $(x, t/U)$ является симметричной относительно частично-дырочного преобразования $x \rightarrow -x$.

Для иллюстрации проведем дальнейшие вычисления для постоянной затравочной плотности состояний с единичной полушириной. В этом случае уравнение состояния (53) можно представить в виде полной производной:

$$\begin{aligned} n &= 2 \sum_{\mathbf{p}} \frac{\delta \xi^{(-)}(t_{\mathbf{p}})}{\delta t_{\mathbf{p}}} \theta(-\xi^{(-)}(t_{\mathbf{p}})) = \\ &= \xi^{(-)}(t^*) - \xi^{(-)}(-1). \end{aligned} \quad (66)$$

В результате при $T = 0$ получаем явную зависимость $t^*(n)$:

$$\begin{aligned} t^* &= \left[2n^2 + u(1-n) - 2n + 1 + \right. \\ &\quad \left. + (1-2n)\sqrt{(1+u)^2 - 2nu} \right] \times \\ &\times \left[2n - u(1-n) - 1 - \sqrt{(1+u)^2 - 2nu} \right]^{-1}, & u &= \frac{U}{t}, \\ \epsilon_{1,2} &= \mp \frac{u}{2} - n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(1+u)^2 - 2nu}. \end{aligned} \quad (67)$$

Вместе с определением эффективной константы БКШ эти соотношения дают возможность построить фазовую диаграмму существования сверхпроводящего состояния при всех значениях безразмерной энергии Хаббарда U/t , кулоновского параметра β , а также электронной концентрации n .

При любой интенсивности кулоновского взаимодействия существует критическая электронная концентрация, соответствующая нулевому химическому потенциалу, начиная с которой возникает куперовская неустойчивость. В модели плоской зоны соответствующее значение находим из условия $\epsilon_1(n, u) = 0$:

$$n_{c1} = \frac{1}{2} - \frac{3u}{4} + \frac{1}{4}\sqrt{9u^2 + 4u + 4}. \quad (68)$$

С увеличением межзельного кулоновского отталкивания уменьшается константа БКШ и происходит уменьшение области существования сверхпроводящего состояния. Начиная с некоторого критического $\beta_c = 2$, при произвольно большом хаббардовском отталкивании сверхпроводимость наступает при конечном недозаполнении подзоны n_{c2} . Это видно из сравнения рис. 9 и 10. При этом температура перехода в сверхпроводящее состояние дважды обращается в нуль — один раз при концентрации n_{c1} , а другой раз при концентрации n_{c2} . Именно такой вид фазовой диаграммы наблюдается у высокотемпературных сверхпроводников.

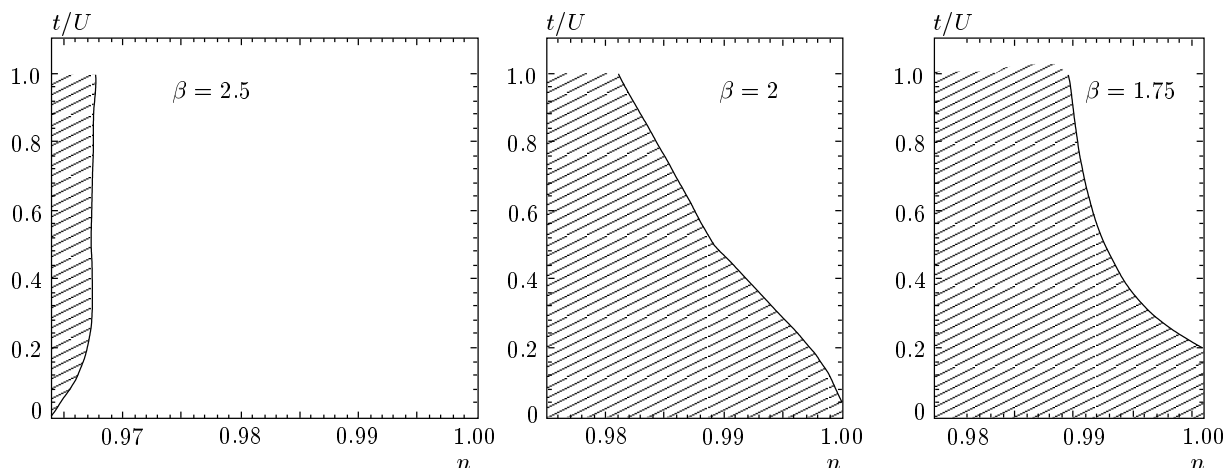


Рис. 9. Области существования сверхпроводящей фазы при $T = 0$ для различных значений кулоновского потенциала β и для прямоугольной плотности состояний

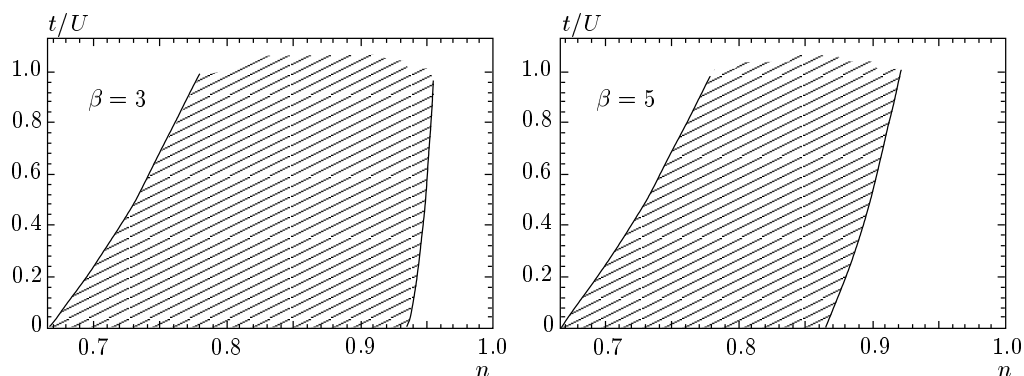


Рис. 10. Области существования сверхпроводящей фазы при $T = 0$ для различных значений кулоновского потенциала β и для прямоугольной плотности состояний

6. ВЫВОДЫ

Было показано, что для модели Хаббарда с сильным отталкиванием существует конечная область в фазовом пространстве, внутри которой амплитуда рассеяния имеет отрицательный знак. Удалось также обнаружить, что уровень Ферми может целиком находиться в той области, где амплитуда рассеяния соответствует куперовскому спариванию. При этом сверхпроводимость может существовать только в ограниченном интервале электронной концентрации.

В настоящей работе всевозможные фазовые диаграммы были получены для наиболее симметричной сверхпроводимости куперовского типа за счет s -спаривания. Что же касается проблемы построения фазовой диаграммы d -спаривания, то она может быть получена на основе тех же исходных урав-

нений (56)–(59), относящихся к конечной энергии Хаббарда. В пределе бесконечной энергии Хаббарда остается только область s -спаривания.

В несверхпроводящей части фазовой диаграммы влияние магнитных флуктуаций сводится к появлению скорости релаксации с переворотом спина, пропорциональной первой степени температуры, что приводит к уменьшению температуры сверхпроводящего перехода. В сверхпроводящей части фазовой диаграммы возникает дополнительное уменьшение скорости релаксации по причине быстрого возрастания сверхпроводящей щели и соответствующего уменьшения плотности состояний на уровне Ферми. Соответственно этому можно наблюдать возрастание значения $2\Delta_0/T_c$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Научного совета направления «Сверхпроводимости».

мость» ГНТП «Актуальные направления физики конденсированных сред».

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. П. Горьков, ЖЭТФ **34**, 735 (1958).
2. F. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217, 1230 (1956).
3. R. O. Zaitsev, Phys. Lett. A **134**, 199 (1988).
4. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, А. С. Кравцов, Письма в ЖЭТФ **77**, 604 (2003).
5. J. Zelinski, M. Matlak, and P. Entel, Phys. Lett. A **136**, 441 (1989).
6. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **123**, 325 (2003).
7. J. Hubbard and K. P. Jain, J. Phys. C **1**, 1650 (1968).
8. J. W. Schweitzer, Phys. Rev. B **3**, 2357 (1971).
9. Л. П. Горьков, А. И. Русинов, ЖЭТФ **46**, 1361 (1964).