

СПЕКТР ВОЗБУЖДЕНИЙ И СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В СОЕДИНЕНИЯХ СО СТРУКТУРОЙ АЛМАЗА

*Р. О. Зайцев**

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

Поступила в редакцию 11 июня 2013 г.

Изучается проблема возникновения сверхпроводимости в решетке типа алмаза. Для каждого целочисленного интервала электронных концентраций n_p обнаружены узкие области концентраций, где имеется максимально возможная температура сверхпроводящего перехода. Рассмотрение ведется на основе предположения о том, что энергия сильных электрон-электронных корреляций является наибольшим энергетическим параметром. Полученные результаты обнаруживают качественное согласие с экспериментом.

DOI: 10.7868/S004445101312016X

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача изучения возможности возникновения сверхпроводимости в соединениях с частично заполненной p -оболочкой непосредственно связана с наличием сильного кулоновского взаимодействия электронов, принадлежащих одному и тому же атому. Вычисления этого взаимодействия, относящиеся к u -электронам, приводят к величинам от $U_p^* = 8.0$ эВ до 17 эВ [1, 2], что значительно превышает значения интегралов перескока к ближайшим соседям¹⁾. В силу этого можно считать, что модель Хаббарда применима ко всем соединениям, содержащим недозаполненную $2p$ -оболочку, а соответствующие значения кулоновских матричных элементов положить равными бесконечности.

Хорошо известно, что в соединениях углерода уровни энергии $2s$ -электронов расположены значительно ниже, чем уровни $2p$ -электронов [1]. По этой причине мы будем считать, что $2s$ -состояния заполнены и будем изучать заполнение трехкратно вырожденной $2p$ -оболочки в решетке типа алмаза.

Рассмотрение ведется на основе общих результатов автора, полученных в работе [3]. Показано, что сверхпроводящее состояние для каждого целочисленного интервала концентраций сверхпроводимость может существовать только при заполнении

одной низшей зоны антисвязывающих состояний, что соответствует весьма малому интервалу электронных концентраций. В этом смысле результаты настоящей работы подобны тому, что было получено для плоских соединений в решетке типа «пчелиных сот» [4].

2. ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

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

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

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

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

Для низших высокоспиновых состояний коэффициенты $g_{\alpha}^{k,\sigma}$ выражаются через произведения спиновых и орбитальных коэффициентов векторного сложения, соответствующие отделению одной частицы

*E-mail: Zaitsev_rogdai@mail.ru

¹⁾ По эмпирическим оценкам [1], интеграл перескока для алмаза составляет $|t| \approx 1.4$ –2.0 эВ.

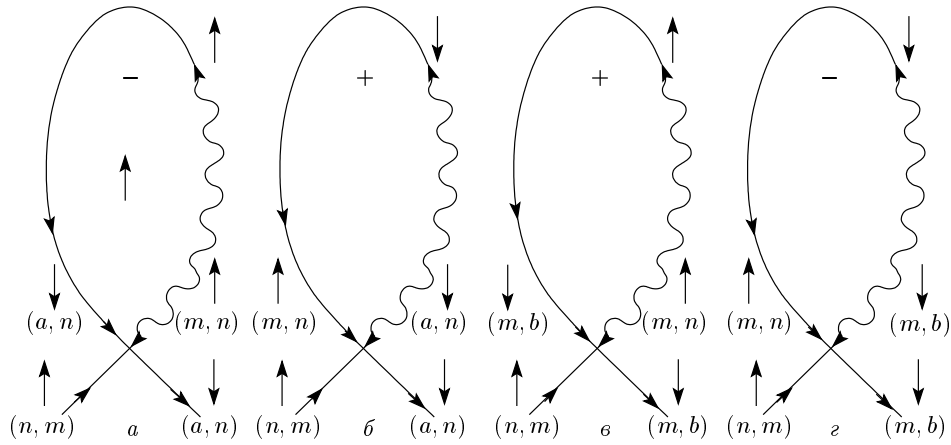


Рис. 1. Аномальные однопетлевые собственно-энергетические части

(см. ниже), $X_{\mathbf{r}}^{\alpha}$ — X -операторы ферми-типа, удовлетворяющие нефермижидкостным перестановочным соотношениям

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

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

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

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

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

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

При заданных номерах одночастичного перехода $\beta(m, s)$ каждый концевой множитель f_{β} равен сумме средних чисел заполнения начального и конечного состояния. В нашем приближении собственно-энергетическая часть есть сумма произведений

концевого множителя на обобщенную матрицу перескоков, а также однопетлевой поправки:

$$f_{\alpha(s,m)} = n_s + n_m, \quad \Sigma^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) = f_{\alpha} t_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{p}) + \Sigma^{\alpha,\beta}, \quad t_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{p}) = g_{\alpha}^{k,\sigma} t_s^k(\mathbf{p}) g_{\beta}^{s,\sigma}. \quad (6)$$

Амплитуды двухчастичного рассеяния $\Gamma_{\alpha,\beta;\lambda,\nu}^0(\mathbf{p})$ определяются как коэффициенты при произведениях операторов $\hat{X}_{\lambda} \hat{X}_{\nu}$, полученных в результате вычисления двойных коммутаторов $\{\hat{X}_{\alpha}, [\hat{X}_{\beta}, \hat{H}]\}$, где \hat{H} — оператор Гамильтона (8), выраженный через X -операторы.

В работе автора [3] было показано, что при заданном значении проекции спина и проекции момента дело сводится к нахождению четырех независимых вершин. В соответствии с этим в однопетлевом приближении достаточно вычислить четыре собственно-энергетические части, изображенные на рис. 1.

3. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ОБЛАСТИ $0 < n_p < 1$

3.1. Спектр одночастичных возбуждений

Учитывая переходы между пустыми и одночастичными состояниями, можно выразить операторы уничтожения и рождения через X -операторы Хаббарда:

$$\hat{a}_{k\sigma,\mathbf{r}} = \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|k\sigma)}, \quad \hat{a}_{k\sigma,\mathbf{r}}^{\dagger} = \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(k\sigma|0)}, \quad \hat{b}_{k\sigma,\mathbf{r}} = \hat{Y}_{\mathbf{r}}^{(0|k\sigma)}, \quad \hat{b}_{k\sigma,\mathbf{r}}^{\dagger} = \hat{Y}_{\mathbf{r}}^{(k\sigma|0)}, \quad (7)$$

где $k\sigma$ — одночастичные k -состояния с проекцией спина ($S^z = \sigma/2$), операторы \hat{X}, \hat{Y} относятся к различным подрешеткам.

Спектр возбуждений находим на основе уравнений сильной связи, где учитываются перескоки между ближайшими соседями в решетке типа ZnS (рис. 2).

Энергетический спектр определяется через условие равенства нулю определителя обратной гринвской функции, соответствующей решетке алмаза (см. рис. 3):

$$\left(\hat{G}_E^{(0)}(\mathbf{p})\right)^{-1} = \begin{pmatrix} E + \mu & 0 & 0 & -ftP & -ftP_{xy} & -ftP_{xz} \\ 0 & E + \mu & 0 & -ftP_{xy} & -ftP & -ftP_{yz} \\ 0 & 0 & E + \mu & -ftP_{xz} & -ftP_{yz} & -ftP \\ -ftQ & -ftQ_{xy} & -ftQ_{xz} & E + \mu & 0 & 0 \\ -ftQ_{xy} & -ftQ & -ftQ_{yz} & 0 & E + \mu & 0 \\ -ftQ_{xz} & -ftQ_{yz} & -ftQ & 0 & 0 & E + \mu \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Здесь t — интеграл перескока к ближайшим соседям, для области $0 < n_p < 1$ конечной множитель зависит от электронной плотности n_p как $f_p = 1 - 5n_p/6$;

$$\begin{aligned} P &= Q^* = 1 + e^{ip_x} + e^{ip_y} + e^{ip_z}, \\ P_{xy} &= Q_{xy}^* = 1 - e^{ip_x} - e^{ip_y} + e^{ip_z}, \\ P_{xz} &= Q_{xz}^* = 1 - e^{ip_x} + e^{ip_y} - e^{ip_z}, \\ P_{yz} &= Q_{yz}^* = 1 + e^{ip_x} - e^{ip_y} - e^{ip_z}. \end{aligned} \quad (9)$$

Для нормальной фазы имеем три пары ветвей спектра:

$$E_1^{(\pm)}(\mathbf{p}) = \pm ft\sqrt{4+2\epsilon_{\mathbf{p}}}-\mu, \quad E_{2,3}^{\pm} = \pm 4ft-\mu, \quad (10a)$$

где

$$\begin{aligned} \epsilon_{\mathbf{p}} &= \cos p_x + \cos p_y + \cos p_z + \\ &+ \cos(p_x - p_y) + \cos(p_y - p_z) + \cos(p_z - p_y). \end{aligned} \quad (10b)$$

Ниже будем использовать преобразование $p_x = v + w$, $p_y = w + u$, $p_z = u + v$. В результате спектр коллективизованных возбуждений (10b) преобразуется к более простому виду:

$$\begin{aligned} E_1^{\pm}(\mathbf{q}) &= \pm 2ft\sqrt{1 + \epsilon(\mathbf{q})} - \mu, \\ \epsilon(\mathbf{q}) &= \cos u \cos v + \cos v \cos w + \cos w \cos u. \end{aligned} \quad (10c)$$

3.2. Уравнения Горькова

Для построения аномальной собственно-энергетической части каждому переходу необходимо поставить в соответствие обратный переход со всеми измененными знаками проекций спинов [5]:

$$S^{i,k}(\alpha, \beta) = \frac{i \uparrow k \downarrow -}{(0 | i \uparrow)} \Bigg| \frac{(k \downarrow | 0)}{-1}. \quad (11)$$

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

Амплитуда рассеяния двух возбуждений с противоположными знаками проекции спинов определяется следующим образом:

$$\left\{ \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|k\downarrow)}, \left[\hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|i\uparrow)}, \sum_{k_1, m, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma} \hat{X}_{\mathbf{r}_1}^{(k_1\sigma|0)} t_{k_1, m}^{ab}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{Y}_{\mathbf{r}_2}^{(0|m\sigma)} \right] \right\}.$$

Используя антикоммутативность $\hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|i\uparrow)}$ и $\hat{Y}_{\mathbf{r}_2}^{(0|m\sigma)}$, переписываем это выражение через два антикоммутатора:

$$\begin{aligned} &\left\{ \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|k\downarrow)}, \sum_{k_1, m, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma} \left\{ \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|i\uparrow)}, \hat{X}_{\mathbf{r}_1}^{(k_1\sigma|0)} \right\} \times \right. \\ &\quad \left. \times t_{k_1, m}^{ab}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{Y}_{\mathbf{r}_2}^{(0|m\sigma)} \right\} = \\ &= \left\{ \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|k\downarrow)}, \sum_{m\mathbf{r}_2} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|0)} t_{i, m}^{ab}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) \hat{Y}_{\mathbf{r}_2}^{(0|m\uparrow)} \right\} + \\ &+ \left\{ \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|k\downarrow)}, \sum_{k_1, m, \mathbf{r}_2, \sigma} \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(k_1\sigma|i\uparrow)} \times \right. \\ &\quad \left. \times t_{k_1, m}^{ab}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{Y}_{\mathbf{r}_2}^{(0|m\sigma)} \right\}. \end{aligned}$$

Далее используем антикоммутативность $\hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|k\downarrow)}$ и $\hat{Y}_{\mathbf{r}_2}^{(0|m\downarrow)}$, после чего дело сводится к вычислению суммы двух коммутаторов:

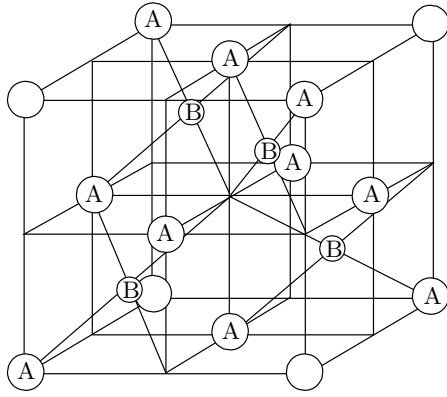


Рис. 2. Расширенный базис решетки со структурой ZnS: $A = \text{Zn}$, $B = \text{S}$. Для углерода $A = B = \text{C}$

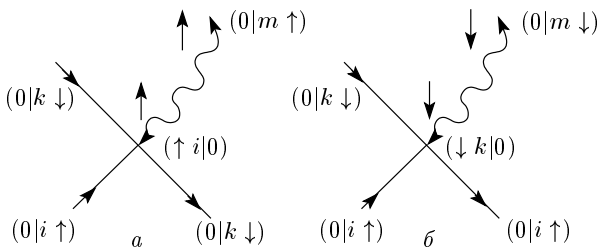


Рис. 3. Вершинные части кинематического взаимодействия ($i \uparrow, k \downarrow$)

$$\begin{aligned} & \sum_{m\mathbf{r}_2} \left[\hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|k\downarrow)}, \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|0)} \right] t_{i,m}^{ab}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) \hat{Y}_{\mathbf{r}_2}^{(0|m\uparrow)} + \\ & + \sum_{k_1, m, \mathbf{r}_2, \sigma} \left[\hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|k\downarrow)}, \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(k_1\sigma|i\uparrow)} \right] t_{k_1, m}^{ab}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{Y}_{\mathbf{r}_2}^{(0|m\sigma)} = \\ & = -\hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|k\downarrow)} \sum_{m\mathbf{r}_2} t_{i,m}^{ab}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) \hat{Y}_{\mathbf{r}_2}^{(0|m\uparrow)} + \\ & + \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|i\uparrow)} \sum_{m, \mathbf{r}_2} t_{k,m}^{ab}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) \hat{Y}_{\mathbf{r}_2}^{(0|m\downarrow)}. \quad (12) \end{aligned}$$

Таким образом, можно записать следующее обобщенное уравнение Горькова:

$$\begin{aligned} (\hat{G}_{i\omega}(\mathbf{p}))^{-1} &= \\ &= \begin{pmatrix} (\hat{G}_{i\omega}^{(0)}(\mathbf{p}))^{-1} & -\check{\Sigma}_{an} \\ -\check{\Sigma}_{an}^\dagger & -(\hat{G}_{-i\omega}^{(0)}(-\mathbf{p}))^{-1} \end{pmatrix}, \quad (13) \end{aligned}$$

где

$$\check{\Sigma}_{an} = \delta_{a,b} \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix},$$

а символ $\delta_{a,b}$ означает равенство нулю для различных подрешеток, относящихся к структуре алмаза.

Уравнения для Σ_{an} существенно упрощаются, поскольку при суммировании по всем импульсам

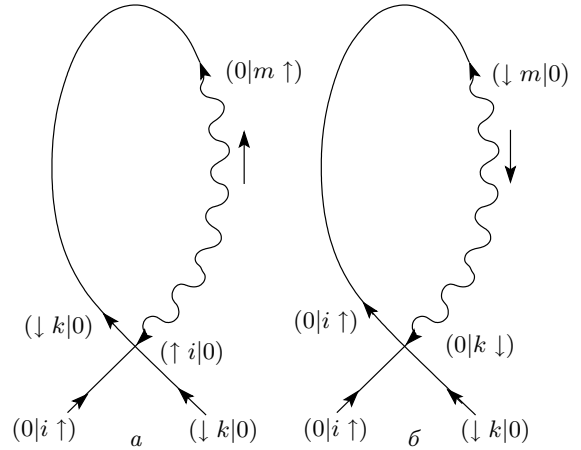


Рис. 4. Аномальные собственно-энергетические части $\Sigma_{an}^{i,k}$. Волнистая линия изображает матрицу интегралов перескока, $(i, k) = x, y, z$

становятся равными нулю недиагональные по кристаллическим индексам компоненты матрицы аномальной собственно-энергетической части. Если же система имеет кубическую симметрию, то матрица $\check{\Sigma}_{im}^{ab} = \delta_{im} \delta_{a,b} \Delta$, т. е. аномальная собственно-энергетическая часть пропорциональна произведению единичной матрицы на величину Δ .

Таким образом, в нашем случае полная обратная функция Грина записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} (\hat{G}_{i\omega}(\mathbf{p}))^{-1} &= \\ &= \begin{pmatrix} (\hat{G}_{i\omega}^{(0)}(\mathbf{p}))^{-1} & \Delta \hat{\mathbf{I}} \\ \Delta^* \hat{\mathbf{I}} & -(\hat{G}_{-i\omega}^{(0)}(-\mathbf{p}))^{-1} \end{pmatrix}. \quad (14) \end{aligned}$$

Уравнение для определения Δ выразим через кинематическую амплитуду рассеяния, записанную в согласии с рис. 4a и формулой (12):

$$\begin{aligned} \Delta &= T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \{ tQ(\mathbf{p}) G_{\omega}^{4,7}(\mathbf{p}) + tQ_{xy}(\mathbf{p}) G_{\omega}^{5,7}(\mathbf{p}) + \\ & + tQ_{xz}(\mathbf{p}) G_{\omega}^{6,7}(\mathbf{p}) \}. \quad (15) \end{aligned}$$

3.3. Вычисление температуры сверхпроводящего перехода

Разложение правой части уравнения (15) по степеням Δ позволяет получить уравнение для нахождения температуры сверхпроводящего перехода:

$$1 = \frac{2\mu f}{3} T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \frac{R_{\omega}(\mu, \mathbf{p})}{\Pi_{\nu} [\omega_{\nu}^2 + (\xi^{(\nu)})^2]}. \quad (16)$$

Выражение $R_\omega(\mu, \mathbf{p})$ имеет вид полинома по степеням ω_n и μ , однако в квазиклассическом приближении достаточно использовать его значение при $\omega_n = 0$.

В результате уравнение для определения температуры сверхпроводящего перехода имеет вид

$$1 = 2 \frac{\mu f^{5t6}}{3} T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \frac{\tilde{R}_0(\mu, \mathbf{p})}{\det_{\omega_n}(\mathbf{p})}. \quad (17a)$$

Здесь лишняя двойка соответствует двум диаграммам на рис. 3 и 4,

$$\det_{\omega_n}(\mathbf{p}) = \left[\omega_n^2 + (E_2^{(+)})^2 \right] \left[\omega_n^2 + (E_2^{(-)})^2 \right] \times \left[\omega_n^2 + (E_p^{(+)})^2 \right] \left[\omega_n^2 + (E_p^{(-)})^2 \right]. \quad (17b)$$

Выражение $\tilde{R}_0(\mu, \mathbf{p})$ есть квадратичная функция безразмерного химического потенциала $z = (\mu/ft)^2$ с коэффициентами, которые зависят от трех переменных $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$.

Будет показано, что усреднение $\tilde{R}_0(\mu, \mathbf{p})$ по импульсам дает положительный результат, откуда следует, что сверхпроводимость может существовать только для положительных значений химического потенциала μ . По этой причине будем рассматривать заполнение верхней коллективизованной подзоны.

После перехода к переменным $p_x = v + w$, $p_y = w + u$, $p_z = u + v$ введем безразмерный параметр $\zeta = (\mu/ft)^2$, так что на поверхности Ферми $\zeta = 4(1 + \epsilon)$.

Запишем $\tilde{R}_0(\mu, \mathbf{p})$ в переменных (u, v, w) :

$$\tilde{R}_0(\mathbf{q}, \zeta) = \zeta^2 V_{44}(\mathbf{q}) + \zeta V_{22}(\mathbf{q}) + V_{00}(\mathbf{q}), \quad (18)$$

где $\mathbf{q} = (u, v, w)$.

Величины V_{nn} выражаются через 16 линейно независимых функций:

$$V_{00}(\mathbf{q}) = \frac{32}{3} [72 + 54A_1(\mathbf{q}) + 54A_2(\mathbf{q}) + 14A_3(\mathbf{q}) + 18A_4(\mathbf{q}) + 14A_5(\mathbf{q}) + 7A_6(\mathbf{q}) + 7A_7(\mathbf{q}) + 9A_8(\mathbf{q}) + 6A_9(\mathbf{q}) + 11A_{10}(\mathbf{q}) + 6A_{11}(\mathbf{q}) + 2A_{12}(\mathbf{q}) + 4A_{13}(\mathbf{q}) + A_{14}(\mathbf{q}) + A_{15}(\mathbf{q}) + 2A_{16}(\mathbf{q})], \quad (19a)$$

$$V_{22}(u, v, w) = -\frac{16}{3} [36 + 14A_1(\mathbf{q}) + 14A_2(\mathbf{q}) + 5A_3(\mathbf{q}) + 5A_4(\mathbf{q}) + 2A_6(\mathbf{q}) + 2A_7(\mathbf{q}) + A_8(\mathbf{q}) - A_9(\mathbf{q}) + 3A_{10}(\mathbf{q})], \quad (19b)$$

$$V_{44}(u, v, w) = 15 + \frac{4}{3}A_1(\mathbf{q}) + \frac{2}{3}A_2(\mathbf{q}) + 3A_3(\mathbf{q}) + \frac{2}{3}A_4(\mathbf{q}). \quad (19c)$$

Каждая функция инвариантна относительно преобразования ГЦК-симметрии:

$$\begin{aligned} A_1(\mathbf{q}) &= \cos(u + v) + \text{c.t.}, \\ A_2(\mathbf{q}) &= \cos(u - v) + \text{c.t.}, \\ A_3(\mathbf{q}) &= \cos(2u + 2v) + \text{c.t.}, \\ A_4(\mathbf{q}) &= \cos(u + v + 2w) + \text{c.t.}, \\ A_5(\mathbf{q}) &= \cos(2u) + \text{c.t.}, \\ A_6(\mathbf{q}) &= \cos(2u + 3v + w) + \cos(2v + 3u + w) + \text{c.t.}, \\ A_7(\mathbf{q}) &= \cos(u + 3v) + \cos(v + 3u) + \text{c.t.}, \\ A_8(\mathbf{q}) &= \cos(u + v - 2w) + \text{c.t.}, \\ A_9(\mathbf{q}) &= \cos(2u - 2v) + \text{c.t.}, \\ A_{10}(\mathbf{q}) &= \cos(2u + v - w) + \cos(2v + u - w) + \text{c.t.}, \\ A_{11}(\mathbf{q}) &= \cos(2u + 2v + 2w), \\ A_{12}(\mathbf{q}) &= \cos(4u) + \text{c.t.}, \\ A_{13}(\mathbf{q}) &= \cos(u + v + 4w) + \text{c.t.}, \\ A_{14}(\mathbf{q}) &= \cos(3u + 3v + 2w) + \text{c.t.}, \\ A_{15}(\mathbf{q}) &= \cos(3u - v) + \cos(3v - u) + \text{c.t.}, \\ A_{16}(\mathbf{q}) &= \cos(2u + 2v + 4w) + \text{c.t.}, \end{aligned} \quad (20)$$

где символ c.t. обозначает операцию циклической перестановки переменных (u, v, w) . Усреднение проводится с помощью интегрирования при заданном ϵ :

$$\langle A_k(\mathbf{q}) \rangle = \overline{A_k}(\epsilon) = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} A_k(\mathbf{q}) \delta(\epsilon - \epsilon(\mathbf{q})) \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}. \quad (21)$$

Исходя из определения функции $\epsilon(\mathbf{q})$ (см. (10с), находим

$$\begin{aligned} \cos(w) &= \frac{\epsilon - \cos(u) \cos(v)}{\cos(u) + \cos(v)}, \\ \frac{dw}{d\epsilon} &= \left\{ (\cos(u) + \cos(v))^2 - (\epsilon - \cos(u) \cos(v))^2 \right\}^{-1/2}. \end{aligned} \quad (22)$$

В результате все величины $A_k(u, v, w)$ оказываются зависящими от ϵ , а также от u и v . Таким образом, дело сводится к вычислению суммы двойных интегралов:

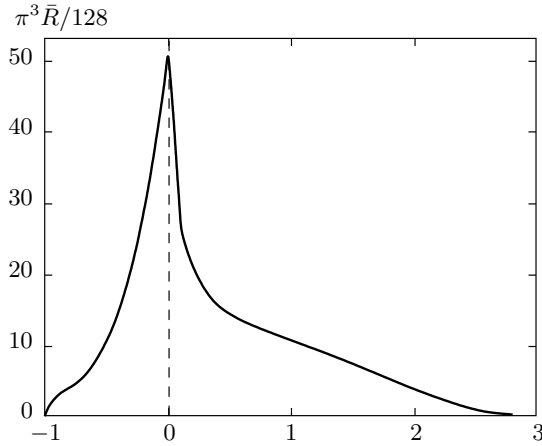


Рис. 5. Амплитуда рассеяния, усредненная на поверхности Ферми

$$\langle R(u, v, w) \rangle / 3 = g(\epsilon) = \frac{64}{3\pi^3} \times \int_0^\pi \int_0^\pi (\cos(u) + \cos(v))^{-4} \times \{ (\cos(u) + \cos(v))^2 - (\epsilon - \cos(u)\cos(v))^2 \}^{-1/2} \times \sum_{k=0}^4 \epsilon^k C_k(u, v) du dv. \quad (23)$$

Здесь $C_k(u, v)$ — тригонометрические полиномы, зависящие от произведений $\cos^n(u)\cos^m(v)$ с коэффициентами, которые вычислены в Приложении А. Интегрирование проводится по тем значениям (u, v) , для которых выражение в степени « $-1/2$ » принимает положительные значения. Окончательная кривая приведена на рис. 5.

В пределе $\epsilon \rightarrow -1$ функция $g(\epsilon)$ линейно зависит от $\epsilon + 1$, в то время как при $\epsilon \rightarrow 3$ она обращается в нуль по закону $(3 - \epsilon)^{5/2}$. Приведем также отдельные значения функции $g(\epsilon)$: $g(0) = 70.84$, $g(1) = 14.7$, $g(2) = 5.13$.

В знаменателе выражения (17a) находятся произведения вида: $\omega_n^2 + (\xi^{(\nu)})^2$, одно из которых соответствует поверхности Ферми при $\mu > 0$: $E_{\mathbf{q}}^{(+)} = 2ft\sqrt{1 + \epsilon_{\mathbf{q}}} - \mu = 0$.

Выделим полюсное слагаемое, соответствующее интегрированию вблизи поверхности Ферми. Для этой цели разлагаем выражение $1/\det_{\omega_n}(\epsilon)$ на простые дроби и выделяем полюсное слагаемое, соответствующее $1/[\omega_n^2 + (E_{\mathbf{q}}^{(+)})^2]$:

$$\frac{1}{\det_{\omega_n}(\epsilon)} = \frac{1}{2^8 f^6 t^6 (3 - \epsilon)^2 (1 + \epsilon)} \frac{1}{\omega_n^2 + (E_{\mathbf{q}}^{(+)})^2} + \dots \quad (24)$$

Далее мы суммируем по ω_n и переходим к интегрированию по переменной $\xi = 2ft\sqrt{1 + \epsilon} - \mu$, после чего уравнение (17a) переходит в уравнение для определения температуры перехода, записанное с логарифмической точностью:

$$1 = \Lambda(\epsilon) \int_0^{\bar{\epsilon}} \frac{\text{th}(\xi/(2T_c))}{\xi} d\xi, \quad (25)$$

где величина $\Lambda(\epsilon)$ имеет следующий вид:

$$\Lambda(\epsilon) = \frac{g(\epsilon)}{2^7 f_p (3 - \epsilon)^2}. \quad (26)$$

Таким образом, константа БКШ $\Lambda(\epsilon)$ определяется не только относительным расположением уровня Ферми, но зависит также от конечного множителя f_p , который выражается через концентрацию электронов n_p , находящихся на p -оболочке.

3.4. Уравнение состояния

Для области $n_p < 1$ уравнение состояния, записанное в нуль-петлевом приближении (приближение «Хаббард I»), имеет вид

$$n_p = f_p \left[\sum_{\mathbf{q}, \nu=\pm} n_F(E_{\mathbf{q}}^{(\nu)}) + 2 \sum_{\nu=\pm} n_F(E^{(\nu)}) \right]. \quad (27)$$

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

Таким образом, в нашем случае

$$f_p = \frac{6 - 5n_p}{6}, \quad E_{\mathbf{q}}^{(\pm)} = \pm 2ft\sqrt{1 + \epsilon_{\mathbf{q}}} - \mu, \quad (28)$$

$$E^{(\pm)} = \pm 4ft - \mu.$$

Если предположить, что три нижние подзоны заполнены, то формула (28) переписывается следующим образом:

$$n_p = \frac{6}{7} + \frac{2}{7} f_p \left[\sum_{\mathbf{q}} n_F(E_{\mathbf{q}}^{(+)}) + 2n_F(E^{(+)}) \right]. \quad (29)$$

Если ввести обозначение

$$K(\epsilon) = \left[\sum_{\mathbf{q}} n_F(E_{\mathbf{q}}^{(+)}) + 2n_F(E^{(+)}) \right],$$

то формула (29) представится в виде

$$n_p = 6 \frac{3 + K(\epsilon)}{21 + 5K(\epsilon)}, \quad f_p = \frac{6}{21 + 5K(\epsilon)}. \quad (30)$$

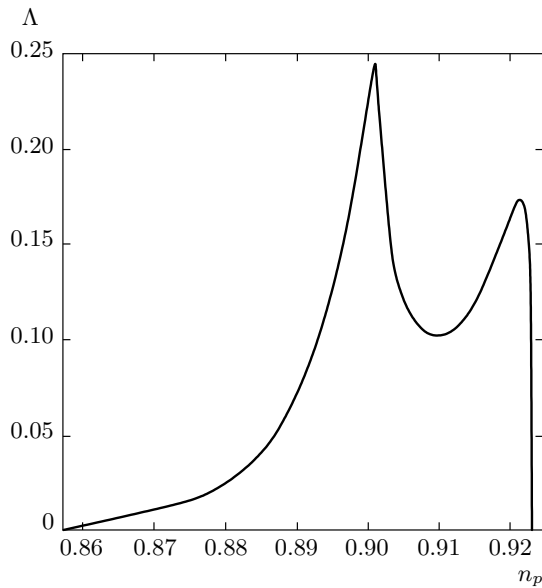


Рис. 6. Концентрационная зависимость константы БКШ $\Lambda(n_p)$ в области $0 < n_p < 1$

Крайним точкам, которые определяются началом ($K = 0$) и концом ($K = 1$) заполнения нижней антисвязывающей делокализованной подзоны, соответствуют концентрации:

$$n_{p1} = \frac{6}{7}, \quad n_{p2} = \frac{12}{13}. \quad (31)$$

Отсюда следует, что сверхпроводимость существует в узкой области концентраций: $\Delta n_p \approx 0.0659$ (см. рис. 6).

При заполнении нижней антисвязывающей коллективизированной подзоны величина $K(\epsilon)$ выражается через интеграл от плотности состояний ГЦК-решетки:

$$\begin{aligned} \rho_{fcc}(\epsilon) &= \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi \delta(\epsilon - \cos u \cos v - \cos v \cos w - \\ &\quad - \cos w \cos u) du dv dw = \\ &= \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \{ (\cos(u) + \cos(v))^2 - \\ &\quad - (\epsilon - \cos(u) \cos(v))^2 \}^{-1/2} du dv. \end{aligned} \quad (32)$$

В пределе $T = 0$ находим функцию²⁾ $K(\epsilon)$:

²⁾ Вычисление интеграла $K(\epsilon)$ удобно проводить с помощью аналитического представления плотности состояний ГЦК-решетки, полученного в работах Иваты, Мориты и Хоригути [6, 7].

$$\begin{aligned} K(\epsilon) &= \int_{-1}^\epsilon \rho_{fcc}(\epsilon') d\epsilon' = \frac{1}{\pi^3} \times \\ &\times \int_0^\pi \int_0^\pi \arcsin \left[\frac{\epsilon - \cos(u) \cos(v)}{|\cos(u) + \cos(v)|} \right] du dv + C, \end{aligned} \quad (33a)$$

где

$$C = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \arcsin \left[\frac{1 + \cos(u) \cos(v)}{|\cos(u) + \cos(v)|} \right] du dv. \quad (33b)$$

В результате численного интегрирования в (33a) и (33b) получаем возможность с помощью соотношений (30) и (26) определить константу БКШ в зависимости от концентрации p -электронов (см. рис. 6).

Как следует из рисунка, кривая зависимости $\Lambda(n_p)$ имеет два максимума. Один из них связан с особенностью амплитуды рассеяния при $\epsilon = 0$. Другой максимум возникает из-за множителя $(3 - \epsilon)^2$, стоящего в знаменателе (26). В пределе $\epsilon \rightarrow 3$ эта особенность компенсируется резким обращением в нуль амплитуды рассеяния, так что в этом пределе константа БКШ обращается в нуль по корневому закону $\Lambda \propto \sqrt{12/13 - n_p}$.

4. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ОБЛАСТИ $1 < n_p < 2$

В решетке типа алмаза одночастичные $2p$ -состояния имеют шестикратное вырождение $\hat{a}_{\sigma,k}^\dagger |0\rangle$, где $\sigma = \pm 1$, а кристаллический индекс пробегает три значения: $k = x, y, z$ (см. (7)).

Нижние двухчастичные состояния имеют спин $S = 1$:

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

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_{x\uparrow}^\dagger \hat{a}_{y\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{y\uparrow}^\dagger \hat{a}_{x\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle, \\ &\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_{y\uparrow}^\dagger \hat{a}_{z\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{z\uparrow}^\dagger \hat{a}_{y\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle, \\ &\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_{z\uparrow}^\dagger \hat{a}_{x\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{x\uparrow}^\dagger \hat{a}_{z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle, \end{aligned} \quad (34)$$

где три последних состояния имеют нулевую проекцию полного спина.

Учитывая переходы между одночастичными и всевозможными двухчастичными состояниями, можно написать разложение операторов уничтожения по X -операторам Хаббарда.

В соответствии с этим, для каждого заданного кристаллического индекса и заданной проекции спина существуют два перехода из состояний с проекцией спина σ и два перехода из состояний с нулевой проекцией полного спина. В результате, мы можем записать разложение операторов уничтожения по X -операторам Хаббарда:

$$\hat{a}_{x\sigma} = \hat{X}^{(Iy,\sigma|IIxy,\sigma)} + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{X}^{(Iy,-\sigma|IIxy,0)} - \hat{X}^{(Iz,\sigma|IIzx,\sigma)} - \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{X}^{(Iz,-\sigma|IIzx,0)}, \quad (35a)$$

$$\hat{a}_{y\sigma} = \hat{X}^{(Iz,\sigma|IIyz,\sigma)} + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{X}^{(Iz,-\sigma|IIyz,0)} - \hat{X}^{(Ix,\sigma|IIxy,\sigma)} - \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{X}^{(Ix,-\sigma|IIxy,0)}, \quad (35b)$$

$$\hat{a}_{z\sigma} = \hat{X}^{(Ix,\sigma|IIzx,\sigma)} + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{X}^{(Ix,-\sigma|IIzx,0)} - \hat{X}^{(Iy,\sigma|IIyz,\sigma)} - \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{X}^{(Iy,-\sigma|IIyz,0)}. \quad (35c)$$

Здесь $|Ik, \sigma\rangle$ — одночастичные состояния ($S = 1/2$, $S^z = \pm\sigma/2$); $|IIk, \sigma\rangle$ — двухчастичное состояние со спином единица и с проекцией $S^z = \sigma$; $|IIk, 0\rangle$ — двухчастичное состояние со спином единица и нулевой проекцией спина.

Таким образом, мы получаем четыре спиновых коэффициента векторного сложения:

$$b_1 = 1, \quad b_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad b_3 = -1, \quad b_4 = -\frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (36)$$

При этом $b^2 = \sum_{\alpha=1}^4 b_{\alpha}^2 = 3$ и не зависит от векторного индекса.

Матрица коэффициентов нормальной части обратной функции Грина имеет вид

$$(\hat{G}_E^{(0)}(\mathbf{p}))_{\alpha,\beta}^{-1} = (E + \mu)\delta_{\alpha,\beta} - f_p T_{i,k}(\mathbf{p}) b_{\alpha}^{(i)} b_{\beta}^{(k)}, \quad (37)$$

где индексы (α, β) нумеруют всевозможные одно-электронные переходы между высокоспиновыми одно- и двухчастичными состояниями (34).

Вычисление определителя матрицы (37) дает произведение 24-х множителей

$$(E - E_{\mathbf{p}}^{(+)}) (E - E_{\mathbf{p}}^{(-)}) (E - E^{(+)})^2 (E - E^{(-)})^2 (E + \mu)^{18},$$

где два первых множителя соответствуют коллективизованным состояниям

$$E^{(\pm)}(\mathbf{p}) = \pm b^2 t f_p \sqrt{4 + 2\epsilon(\mathbf{p})} - \mu = \pm 2b^2 t f_p \sqrt{1 + \epsilon_{fcc}(\mathbf{q})} - \mu, \quad (38a)$$

две пары других множителей соответствуют локализованным состояниям

$$E^{(\pm)} = \pm 4b^2 t f_p - \mu, \quad (38b)$$

остальные 18 множителей $(E + \mu)$ не соответствуют никаким состояниям и выпадают из окончательных ответов.

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

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

$$f = \frac{n_p - 1}{9} + \frac{2 - n_p}{6} = \frac{4 - n_p}{18}. \quad (39)$$

Можно заметить, что в изучаемой области спектры возбуждений (38a) и (38b) только множителем b^2 отличаются от соответствующих спектров (10a), (10b), относящихся к области $0 < n_p < 1$.

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

	$1 \uparrow \quad 1 \downarrow -$	$(x-, y- y-)$	$(xy, 0 y+)$	$(x-, z- z-)$	$(xz, 0 z+)$
$S^{x,x}(\alpha, \beta) =$	$(y+ x+, y+)$	0	–	0	0
	$(y- (xy, 0)$	–	+	0	0
	$(z+ x+, z+)$	0	0	0	–
	$(z- xz, 0)$	0	0	–	+

(40)

Здесь выписаны матричные элементы, возникающие от аномальных средних $\langle \hat{a}_{1\uparrow} \hat{a}_{1\downarrow} \rangle$. Отмеченные знаком минус значения матричных элементов возникают в случае, когда совпадают индексы одночастичных состояний, относящихся к номеру строки и к номеру столбца. Отмеченные знаком плюс значения матричных элементов возникают в случае, когда совпадают индексы двухчастичных состояний. В случае отсутствия совпадений соответствующая вершинная часть обращается в нуль и поэтому матричный элемент следует считать равным нулю.

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

Можно заметить, что отдельные компоненты, относящиеся к диагональной аномальной собственно-энергетической части, отличаются только множителями, пропорциональными произведениям спиновых коэффициентов векторного сложения $b_i b_k$. По этой причине можно написать:

$$\Sigma_{i,k}^{an}(\alpha, \beta) = \delta_{i,k} \Delta \begin{pmatrix} 0 & -b_1 b_2 & 0 & 0 \\ -b_1 b_2 & b_2^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -b_1 b_2 \\ 0 & 0 & -b_2 b_1 & b_2^2 \end{pmatrix}. \quad (41)$$

При этом мы учли, что $b_3 b_4 = b_1 b_2 = 1/\sqrt{2}$ и $b_4^2 = b_2^2 = 1/2$.

Если отбросить аномальные собственно-энергетические части, которые недиагональны по кристаллическому индексу, то мы получим те же соотношения, что и для области $0 < n_p < 1$ (см. (25)).

Температура перехода определяется с помощью формулы БКШ:

$$1 = \Lambda(\epsilon) \int_0^{\bar{\epsilon}} \frac{\text{th}(\xi/(2T_c))}{\xi} d\xi, \quad (42)$$

где в случае заполнения верхней антисвязывающей коллективизованной подзоны

$$\Lambda(\epsilon) = \frac{g(\epsilon)}{2^7 b^2 f_p (3 - \epsilon)^2}. \quad (43)$$

Здесь f_p — конечной множитель (39), $b^2 = 3$, а функция $g(\epsilon)$ определяется в (23).

Уравнение состояния, записанного для интервала $1 < n_p < 2$, имеет следующий вид:

$$n_p = 1 + \frac{3}{2} f_p \left[\sum_{\mathbf{q}, \nu=\pm} n_F(E_{\mathbf{q}}^{(\nu)}) + 2 \sum_{\nu=\pm} n_F(E^{(\nu)}) \right], \quad (44)$$

где в нашем случае

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{q}}^{(\pm)} &= \pm 2b^2 t f_p \sqrt{1 + \epsilon_{fcc}(\mathbf{q})} - \mu, \\ E^{(\pm)} &= \pm 4f_p b^2 t - \mu, \quad b^2 = \sum_k b_k^2 = 3. \end{aligned} \quad (45)$$

Если предположить, что три нижние подзоны заполнены, тогда уравнение (44) переписывается следующим образом:

$$n_p = \frac{8}{5} + \frac{6}{5} f_p \left[\sum_{\mathbf{q}} n_F(E_{\mathbf{q}}^{(+)}) + 2n_F(E^{(+)}) \right]. \quad (46)$$

Используя определение конечного множителя (39) и вводя обозначение

$$K(\epsilon) = \left[\sum_{\mathbf{p}} n_F(E_{\mathbf{q}}^{(+)}) + 2n_F(E^{(+)}) \right],$$

перепишем формулу (46) следующим образом:

$$n_p = 4 \frac{6 + K(\epsilon)}{15 + K(\epsilon)}. \quad (47)$$

Крайним точкам, которые соответствуют заполнению нижней антисвязывающей делокализованной подзоны, соответствуют концентрации

$$n_{p1} = \frac{8}{5} = 1.6, \quad n_{p2} = \frac{7}{4} = 1.75, \quad (48)$$

так что сверхпроводимость существует в узкой области концентраций: $\Delta n_p = 0.15$.

В низкотемпературном пределе, когда происходит заполнение коллективизованной подзоны $E_{\mathbf{q}}^{(+)}$ величина $K(\epsilon)$ выражается через интеграл от плотности состояний согласно формуле (33) предыдущего раздела.

Конечной множитель (39) также выражается через $K(\epsilon)$:

$$f_p = \frac{2}{15 + K(\epsilon)}. \quad (49)$$

В результате, с помощью формул (43), (47) и (49), мы получаем возможность получить концентрационную зависимость константы БКШ, которая представлена на рис. 7.

5. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ОБЛАСТИ $2 < n_p < 3$

В случае $2 < n_p < 3$ необходимо рассмотреть переходы между двухчастичными состояниями со спином 1 и трехчастичными состояниями со спином $3/2$.

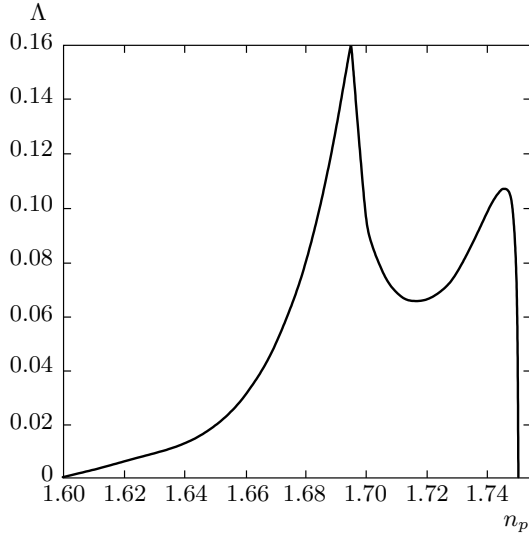


Рис. 7. Концентрационная зависимость константы БКШ $\Lambda(n_p)$ в области $1 < n_p < 2$

Рассмотрим девять низших двухчастичных высокоспиновых состояний со спином $S = 1$, записанных в виде (34). Эти состояния входят в резонанс с четырьмя трехчастичными состояниями с полным спином $3/2$:

$$\hat{a}_{x\sigma}^\dagger \hat{a}_{y\sigma}^\dagger \hat{a}_{z\sigma}^\dagger |0\rangle \quad \left(S^z = \frac{3}{2}\sigma \right); \quad (50a)$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\hat{a}_{x\uparrow}^\dagger \hat{a}_{y\uparrow}^\dagger \hat{a}_{z\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{x\uparrow}^\dagger \hat{a}_{y\downarrow}^\dagger \hat{a}_{z\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{x\downarrow}^\dagger \hat{a}_{y\uparrow}^\dagger \hat{a}_{z\uparrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad \left(S^z = \frac{1}{2} \right), \quad (50b)$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\hat{a}_{x\downarrow}^\dagger \hat{a}_{y\downarrow}^\dagger \hat{a}_{z\uparrow}^\dagger + \hat{a}_{x\downarrow}^\dagger \hat{a}_{y\uparrow}^\dagger \hat{a}_{z\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{x\uparrow}^\dagger \hat{a}_{y\downarrow}^\dagger \hat{a}_{z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad \left(S^z = -\frac{1}{2} \right). \quad (50c)$$

В соответствии с этим, запишем разложение операторов уничтожения по X -операторам Хаббарда:

$$\hat{a}_{x\sigma} = \hat{X}^{(\Pi yz, \sigma | \text{III}, 3/2\sigma)} + \sqrt{\frac{2}{3}} \hat{X}^{(\Pi yz, 0 | \text{III}, \sigma/2)} + \sqrt{\frac{1}{3}} \hat{X}^{(\Pi yz, -\sigma | \text{III}, -\sigma/2)}, \quad (51a)$$

$$\hat{a}_{y\sigma} = -\hat{X}^{(\Pi xz, \sigma | \text{III}, 3/2\sigma)} - \sqrt{\frac{2}{3}} \hat{X}^{(\Pi xz, 0 | \text{III}, \sigma/2)} - \sqrt{\frac{1}{3}} \hat{X}^{(\Pi xz, -\sigma | \text{III}, -\sigma/2)}, \quad (51b)$$

$$\hat{a}_{z\sigma} = \hat{X}^{(\Pi xy, \sigma | \text{III}, 3/2\sigma)} + \sqrt{\frac{2}{3}} \hat{X}^{(\Pi xy, 0 | \text{III}, \sigma/2)} + \sqrt{\frac{1}{3}} \hat{X}^{(\Pi xy, -\sigma | \text{III}, -\sigma/2)}. \quad (51c)$$

Таким образом, сумма квадратов спиновых коэффициентов векторного сложения не зависит от векторного индекса:

$$b_1 = \pm 1, \quad b_2 = \pm \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad b_3 = \pm \sqrt{\frac{1}{3}}, \quad (52)$$

$$b^2 = \sum_{\alpha=1}^3 b_\alpha^2 = 2.$$

Матрица коэффициентов нормальной части обратной функции Грина имеет вид

$$(E + \mu)\delta_{\alpha, \beta} - f_p T_{i,k}(\mathbf{p}) b_\alpha^{(i)} b_\beta^{(k)}, \quad (53)$$

где индексы (α, β) нумеруют всевозможные одночастичные переходы между высокоспиновыми двух- и трехчастичными переходами, коэффициенты матрицы перескоков $T_{i,k}(\mathbf{p})$ к решетке типа алмаза определены в (9).

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

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

$$f_p = \frac{n_p - 2}{4} + \frac{3 - n_p}{9} = \frac{5n_p - 6}{36}. \quad (54)$$

Вычисление определителя матрицы (67) дает произведение 18 множителей

$$(E - E_{\mathbf{p}}^{(+)}) (E - E_{\mathbf{p}}^{(-)}) (E - E^{(+)})^2 \times (E - E^{(-)})^2 (E + \mu)^{12}, \quad (55)$$

где два первых множителя соответствуют коллективизованным состояниям

$$E_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \pm b^2 t f_p \sqrt{4 + 2\epsilon(\mathbf{p})} - \mu = \pm 2b^2 t f_p \sqrt{1 + \epsilon_{fc}(\mathbf{q})} - \mu, \quad (56a)$$

два других множителя соответствуют локализованным состояниям

$$E^{(\pm)} = \pm b^2 4 t f_p - \mu, \quad (56b)$$

остальные множители $(E + \mu)$ не соответствуют каким-либо физическим состояниям.

Для построения аномальной собственно-энергетической части каждому переходу необходимо поставить в соответствие обратный переход со всеми измененными знаками проекций спинов. Отличные от нуля компоненты матрицы аномальной собственно-энергетической части и их знаки определяются с помощью следующей матрицы:

$$\hat{S}_{\alpha,\beta}^{x,x} = \frac{1 \uparrow 1 \downarrow -}{(yz|xyz)} \left| \begin{array}{c} (xyz|yz) \\ \hat{W} \end{array} \right. \quad (57)$$

Здесь на диагонали расположена единственная матрица \hat{W} :

$$\hat{W} = \left(\begin{array}{c|ccc} 1 \uparrow 1 \downarrow - & \left(-\frac{3}{2}(xyz)|-1\right) & \left(-\frac{1}{2}(xyz)|0\right) & \left(\frac{1}{2}(xyz)|1\right) \\ \hline (1(yz)|\frac{3}{2}(xyz)) & 0 & 0 & - \\ (0(yz)|\frac{1}{2}(xyz)) & 0 & - & + \\ (-1(yz)|-\frac{1}{2}(xyz)) & - & + & 0 \end{array} \right). \quad (58)$$

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

В конечном счете диагональные компоненты по кристаллическим индексам матрицы аномальной собственно-энергетической части записываются в следующем виде:

$$\Sigma_{i,k}^{an}(\alpha, \beta) = \delta_{i,k} \Delta \left(\begin{array}{ccc} 0 & 0 & -b_1 b_3 \\ 0 & -b_2^2 & b_2 b_3 \\ -b_3 b_1 & b_3 b_2 & 0 \end{array} \right). \quad (59)$$

При этом мы пренебрегаем недиагональными компонентами как по кристаллическому индексу, так и по номеру атома в ячейке.

В результате находим общее выражение для константы БКШ:

$$\Lambda(\epsilon) = \frac{g(\epsilon)}{b^2 2^7 f_p (3 - \epsilon)^2}. \quad (60)$$

Здесь $b^2 = 2$, а концевой множитель f_p определен в (54).

Уравнение состояния, записанное для интервала $2 < n_p < 3$, имеет следующий вид:

$$n_p = 2 + \frac{2}{3} f_p \left[\sum_{\mathbf{p}, \nu=\pm} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{(\nu)}) + 2 \sum_{\nu=\pm} n_F(\xi^{(\nu)}) \right], \quad (61)$$

где в общем случае

$$E_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \pm b^2 t f_p \sqrt{4 + 2\epsilon(\mathbf{p})} - \mu = \pm 2b^2 t f_p \sqrt{1 + \epsilon_{fcc}(\mathbf{q})} - \mu, \quad (62a)$$

две пары других множителей соответствуют локализованным состояниям

$$E^{(\pm)} = \pm 4b^2 t f_p - \mu, \quad (62b)$$

где $b^2 = 2$.

Если предположить, что три нижние подзоны заполнены, то уравнение (56) переписывается следующим образом:

$$n_p = \frac{30}{13} + \frac{12}{13} f_p \left[\sum_{\mathbf{p}} n_F(E_{\mathbf{p}}^{(+)} + 2n_F(E^{(+)} \right]. \quad (63)$$

С помощью определения концевой множителя (53) и используя обозначение

$$K = \left[\sum_{\mathbf{p}} n_F(E_{\mathbf{p}}^{(+)} + 2n_F(E^{(+)} \right],$$

перепишем формулу (57) следующим образом:

$$n_p = 6 \frac{15 - K}{39 - 5K}. \quad (64)$$

В случае заполнения коллективизованной подзоны $E_{\mathbf{p}}^{(+)}$ величина K выражается через интеграл от плотности состояний согласно (33).

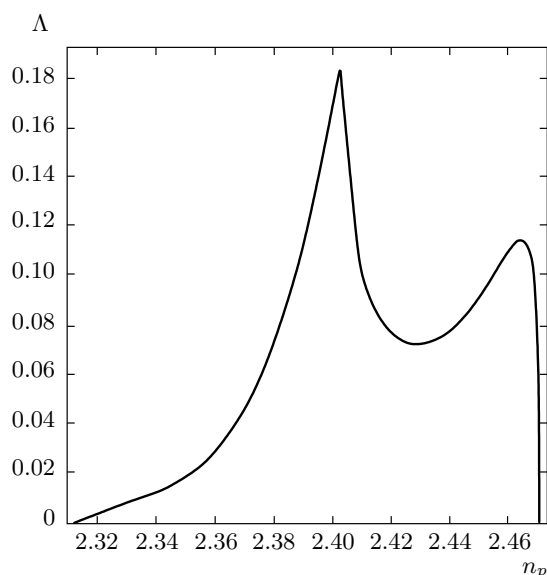


Рис. 8. Концентрационная зависимость константы БКШ $\Lambda(n_p)$ в области $2 < n_p < 3$

Для крайних точек, где $K = 0$ и $K = 1$, получаем критические концентрации

$$n_{p1} = \frac{30}{13} \approx 2.31, \quad n_{p2} = \frac{42}{17} \approx 2.47. \quad (65)$$

Таким образом, сверхпроводимость существует в достаточно узкой области концентраций: $\Delta n_p = 0.163$.

Используя выражение для концевоего множителя (53), определяем с помощью формул (64) и (60) концентрационную зависимость константы БКШ $\Lambda(n_p)$, представленную на рис. 8.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

Таким образом, мы приходим к общему выводу о том, что для каждого целочисленного интервала концентрации p -электронов сверхпроводимость существует внутри узкого интервала концентраций. В решетке с двумя атомами в ячейке (как в решетке типа алмаза, так и в решетке типа пчелиных сот) сверхпроводящая неустойчивость возникает только при заполнении низшей антисвязывающей коллективизованной подзоны.

Температура сверхпроводящего перехода определяется обычной формулой БКШ: $T_c = \bar{\epsilon} \exp(-1/\Lambda(n_p))$. При этом концентрационная

зависимость величины $\Lambda(n_p)$ обнаруживает два резких максимума, один из которых связан с особенностью поверхности Ферми, а другой обусловлен наличием краевой особенности плотности состояний, которая компенсируется резким уменьшением амплитуды рассеяния на краю выделенной подзоны.

В области концентраций порядка единицы константа Λ достаточно велика, чтобы обнаружить эффект возникновения нефононной сверхпроводимости даже при $\bar{\epsilon} \approx 10^2$ К.

Таким образом, можно утверждать, что при наличии сильного электрон-электронного взаимодействия в углеродной системе следует ожидать наличия узких областей электронной концентрации, где можно ожидать возрастания температуры сверхпроводящего перехода. Этот эффект был обнаружен в работе [8], где допирование углерода бором привело к возникновению сверхпроводимости ($T_c \approx 4$ К) в пределах весьма узкой области концентраций допирующей примеси бора от 0.086 до 0.13. Как указано в работе [8], при допировании бором атомы алмаза являются донорами, поэтому можно утверждать, что в этих экспериментах наблюдаемая область существования сверхпроводимости соответствует интервалу от $n_p = 1.87$ до $n_p = 1.914$. Сравнение с формулами (47), (48) обнаруживает только качественное согласие предлагаемой теории с экспериментом.

Автор благодарит В. П. Крайнова, Н. В. Терехину и И. В. Черноусова за помощь при проведении численных расчетов.

Работа выполнена в рамках гос. задания № 2.1947.2011 по теме НИР Г306.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Преобразование подынтегральной функции

Поскольку каждое слагаемое выражений (19a), (19b) и (19c) усредняется с функцией $\delta(\epsilon - \cos(u) \cos(v) - \cos(v) \cos(w) - \cos(w) \cos(u))$, которая симметрична по каждой переменной u , v и w , при интегрировании каждую функцию $A_k(u, v, w)$ следует заменить ее четной частью по всем трем переменным. Иными словами, вместо каждой из шестнадцати функций $A_k(u, v, w)$ будем использовать следующие $B_k(u, v, w)$:

$$\begin{aligned}
 B_1(u, v, w) &= \cos(w) (\cos(u) + \cos(v)) + \cos(u) \cos(v); \\
 B_2(u, v, w) &= B_1(u, v, w); \\
 B_3(u, v, w) &= \cos(2w) (\cos(2u) + \cos(2v)) + \\
 &\quad + \cos(2u) \cos(2v); \\
 B_4(u, v, w) &= \cos(2w) \cos(u) \cos(v) + \\
 &\quad + \cos(w) (\cos(2u) \cos(v) + \cos(2v) \cos(u)); \\
 B_5(u, v, w) &= A_5(u, v, w) = \cos(2u) + \\
 &\quad + \cos(2v) + \cos(2w); \\
 B_6(u, v, w) &= \cos(3w) (\cos(2u) \cos(v) + \cos(2v) \cos(u)) + \\
 &\quad + \cos(2w) (\cos(3u) \cos(v) + \cos(u) \cos(3v)) + \\
 &\quad + \cos(w) (\cos(3u) \cos(2v) + \cos(2u) \cos(3v)); \\
 B_7(u, v, w) &= \cos(3w) (\cos(u) + \cos(v)) + \cos(w) (\cos(3u) + \cos(3v)) + \cos(u) \cos(3v) + \cos(3u) \cos(v); \\
 B_8(u, v, w) &= \cos(2w) (\cos(u) \cos(v)) + \cos(w) (\cos(2u) \cos(v) + \cos(u) \cos(2v)); \\
 B_9(u, v, w) &= \cos(2w) (\cos(2u) + \cos(2v)) + \cos(2u) \cos(2v); \\
 B_{10}(u, v, w) &= 2 \cos(2w) \cos(u) \cos(v) + 2 \cos(w) (\cos(2u) \cos(v) + \cos(2v) \cos(u)); \\
 B_{11}(u, v, w) &= \cos(2w) \cos(2u) \cos(2v); \\
 B_{12}(u, v, w) &= A_{12}(u, v, w) = \cos(4u) + \cos(4v) + \cos(4w); \\
 B_{13}(u, v, w) &= \cos(4w) \cos(u) \cos(v) + \cos(w) (\cos(u) \cos(4v) + \cos(v) \cos(4u)); \\
 B_{14}(u, v, w) &= \cos(2w) \cos(3u) \cos(3v) + \cos(3w) (\cos(3u) \cos(2v) + \cos(2u) \cos(3v)); \\
 B_{15}(u, v, w) &= \cos(3w) (\cos(u) + \cos(v)) + \cos(w) (\cos(3u) + \cos(3v)) + \cos(3u) \cos(v) + \cos(3v) \cos(u); \\
 B_{16}(u, v, w) &= \cos(4w) \cos(2u) \cos(2v) + \cos(2w) (\cos(2u) \cos(4v) + \cos(2v) \cos(4u)).
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Поскольку каждая из функций $B_k(u, v, w)$ является четной, усреднение проводится в области положительных значений (u, v, w) :

$$\begin{aligned}
 \langle B_k(\mathbf{q}) \rangle &= \overline{B_k}(\epsilon) = \\
 &= \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi A_k(\mathbf{q}) \delta(\epsilon - \epsilon(\mathbf{q})) \frac{d\mathbf{q}}{\pi^3}. \tag{A.2}
 \end{aligned}$$

Далее исключаем переменную w с помощью следующих соотношений:

$$\begin{aligned}
 \cos(2w) &= 2 \cos(w)^2 - 1, \\
 \cos(3w) &= \cos(w) (4 \cos(w)^2 - 3), \\
 \cos(4w) &= 8 \cos(w)^4 - 8 \cos(w)^2 + 1, \\
 \cos(w) &= \frac{\epsilon - \cos(u) \cos(v)}{\cos(u) + \cos(v)}.
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

В результате выражение (18) преобразуется к следующему виду:

$$\begin{aligned}
 \tilde{R}_0(\mathbf{q}, \zeta) &= \zeta^2 V_{44}(\mathbf{q}) + \zeta V_{22}(\mathbf{q}) + V_{00}(\mathbf{q}) \rightarrow L_\epsilon(u, v) = \\
 &= 64 \frac{\sum_{k=0}^4 \epsilon^k C_k(u, v)}{(\cos(u) + \cos(v))^4}. \tag{A.4}
 \end{aligned}$$

Здесь выражения $C_k(u, v)$ имеют вид четных тригонометрических полиномов

$$C_k(u, v) = \sum_{m \geq 0} \sum_{n \geq 0} B_k^{n,m} \cos(u)^n \cos(v)^m, \tag{A.5}$$

где $B_0^{0,0} = B_1^{0,0} = B_2^{0,0} = B_3^{0,0} = 0$, а остальные числовые матрицы $B_k^{n,m}$ симметричны и представляются в виде следующих таблиц:

$$\hat{B}_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 18 & 0 & -33 & 0 & 16 \\ 0 & 0 & 0 & 72 & 0 & -132 & 0 & 64 & 0 \\ 0 & 0 & 108 & 0 & -264 & 0 & 217 & 0 & -48 \\ 0 & 72 & 0 & -330 & 0 & 427 & 0 & -144 & 0 \\ 18 & 0 & -264 & 0 & 532 & 0 & -288 & 0 & 32 \\ 0 & -132 & 0 & 427 & 0 & -336 & 0 & 64 & 0 \\ -33 & 0 & 217 & 0 & -288 & 0 & 96 & 0 & 0 \\ 0 & 64 & 0 & -144 & 0 & 64 & 0 & 0 & 0 \\ 16 & 0 & -48 & 0 & 32 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{A.6}$$

$$\hat{B}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 54 & 0 & -97 & 0 & 48 \\ 0 & 0 & 114 & 0 & -194 & 0 & 90 & 0 \\ 0 & 54 & 0 & -246 & 0 & 270 & 0 & -64 \\ -3 & 0 & 194 & 0 & 264 & 0 & -64 & 0 \\ 0 & -97 & 0 & 270 & 0 & -128 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 90 & 0 & -64 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 48 & 0 & -64 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{A.7}$$

$$\hat{B}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -33 & 0 & 61 & 0 & -25 \\ 0 & -66 & 0 & 111 & 0 & -46 & 0 \\ -33 & 0 & 196 & 0 & -236 & 0 & 65 \\ 0 & 111 & 0 & -142 & 0 & 35 & 0 \\ 61 & 0 & -236 & 0 & 132 & 0 & 0 \\ 0 & -46 & 0 & 35 & 0 & 0 & 0 \\ -25 & 0 & 65 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{A.8}$$

$$\hat{B}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 6 & 0 & -5 & 0 \\ 0 & -52 & 0 & 84 & 0 & -33 \\ 6 & 0 & -14 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 84 & 0 & -66 & 0 & 0 \\ -5 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -33 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{B}_4 = \begin{pmatrix} 16 & 0 & -25 & 0 & 9 \\ 0 & -2 & 0 & 3 & 0 \\ -25 & 0 & 20 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 9 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{A.9}$$

В результате мы получим возможность вычислить $g(\epsilon)$:

$$g(\epsilon) = \frac{64}{3\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi (\cos(u) + \cos(v))^{-4} \times \times \{ (\cos(u) + \cos(v))^2 - (\epsilon - \cos(u)\cos(v))^2 \}^{-1/2} \times \times \sum_{k=0}^4 \epsilon^k \sum_{m \geq 0} \sum_{n \geq 0} B_k^{n,m} \cos(u)^n \cos(v)^m du dv. \tag{A.10}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Вычисление интегралов

Нашей задачей является вычисление интеграла общего вида:

$$J(\epsilon) = \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{W(u, v, \epsilon) du dv}{\sqrt{(\cos(u) + \cos(v))^2 - (\epsilon - \cos(u)\cos(v))^2}}, \tag{B.1}$$

где интегрирование ведется по тем областям, для которых выражение, стоящее под радикалом, является положительным.

Таким образом, области интегрирования определяются с помощью уравнений

$$\cos(u) + \cos(v) = \pm [\epsilon - \cos(u) \cos(v)]. \quad (B.2)$$

Для положительных энергий, т. е. при $0 < \epsilon < 3$, одной из таких кривых является следующая:

$$v = f(u) = \pi - \arccos \left[\frac{\cos(u) - \epsilon}{1 + \cos(u)} \right]. \quad (B.3)$$

Другую кривую находим с помощью преобразования $u \rightarrow \pi - u, v \rightarrow \pi - v$. Учитывая, что подынтегральная функция оказывается инвариантной относительно этого преобразования, можно ограничиться вычислением интеграла по области, ограниченной кривой (OAC), а окончательный результат удвоить (см. рис. 9).

Аналогичным образом, можно обнаружить, что подынтегральная функция оказывается симметричной относительно замены $u \rightarrow v, v \rightarrow u$. По этой причине можно провести интегрирования по области $u > v$, а окончательный результат умножить на четыре.

Исходя из этих соображений, мы получаем два интеграла. Первый интеграл берется по треугольной области:

$$J_1(\epsilon) = \int_0^{\varphi_1(\epsilon)} \left\{ \int_0^u \frac{W(u, v, \epsilon) dv}{\sqrt{(\cos(u) + \cos(v))^2 - (\epsilon - \cos(u) \cos(v))^2}} \right\} \times du, \quad (B.4)$$

где $\varphi_1(\epsilon) = \arccos(\sqrt{1 + \epsilon} - 1)$.

Второй интеграл берется по области, ограниченной кривой $f(u)$, которая определена в (B.3):

$$J_2(\epsilon) = \int_{\varphi_1(\epsilon)}^{\varphi_2(\epsilon)} \left\{ \int_0^{f(u)} \frac{W(u, v, \epsilon) dv}{\sqrt{(\cos(u) + \cos(v))^2 - (\epsilon - \cos(u) \cos(v))^2}} \right\} \times du, \quad (B.5)$$

где $\varphi_2(\epsilon) = \pi - \arccos((1 - \epsilon)/2)$. Область интегрирования представлена на рис. 9а.

В общем случае при $0 < \epsilon < 3$: точке А соответствуют координаты $u = v = \arccos(\sqrt{1 + \epsilon} - 1)$, точке В — координаты $(u = \arccos(\sqrt{1 + \epsilon} - 1), v = 0)$,

точке С — координаты $(u = \pi - \arccos((1 - \epsilon)/2), v = 0)$.

В случае отрицательных $\epsilon - 1 < \epsilon < 0$, в качестве граничных кривых мы используем области, ограниченные двумя кривыми (см. рис. 9б):

$$v = f_3(u) = \arccos \left[\frac{\cos(u) + \epsilon}{-1 + \cos(u)} \right], \quad (B.6)$$

$$v = f_4(u) = \pi + \arccos \left[\frac{\cos(u) - \epsilon}{1 + \cos(u)} \right],$$

которые пересекаются в симметричных точках $(\arccos(\sqrt{-\epsilon}), \pi - \arccos(\sqrt{-\epsilon}))$ и $(\pi - \arccos(\sqrt{-\epsilon}), \arccos(\sqrt{-\epsilon}))$.

Если учесть инвариантность подынтегральной функции относительно преобразований $u \rightarrow \pi - u, v \rightarrow \pi - v$, а также относительно преобразования симметрии $u \rightarrow v, v \rightarrow u$, то достаточно вычислить три интеграла. Первый интеграл берется по треугольной области:

$$R_1(\epsilon) = \int_0^{\psi_1(\epsilon)} \left\{ \int_0^u \frac{W(u, v, \epsilon) dv}{\sqrt{(\cos(u) + \cos(v))^2 - (\epsilon - \cos(u) \cos(v))^2}} \right\} \times du, \quad (B.7)$$

где $\psi_1(\epsilon) = \pi - \arccos(\sqrt{1 + \epsilon} - 1)$.

Второй интеграл берется по области, ограниченной первой кривой $f_3(u)$, которая определена в (B.6):

$$R_2(\epsilon) = \int_{\psi_1(\epsilon)}^{\psi_2(\epsilon)} \left\{ \int_0^{f_3(u)} \frac{W(u, v, \epsilon) dv}{\sqrt{(\cos(u) + \cos(v))^2 - (\epsilon - \cos(u) \cos(v))^2}} \right\} \times du, \quad (B.8)$$

где $\psi_2(\epsilon) = \pi - \arccos \sqrt{-\epsilon}$.

Третий интеграл берется по области, ограниченной второй кривой $f_4(u)$, которая определена в (B.6):

$$R_3(\epsilon) = \int_{\psi_2(\epsilon)}^{\psi_3(\epsilon)} \left\{ \int_0^{f_4(u)} \frac{W(u, v, \epsilon) dv}{\sqrt{(\cos(u) + \cos(v))^2 - (\epsilon - \cos(u) \cos(v))^2}} \right\} \times du, \quad (B.9)$$

где $\psi_3(\epsilon) = \pi - \arccos[(1 - \epsilon)/2]$. Область интегрирования представлена на рис. 9б.

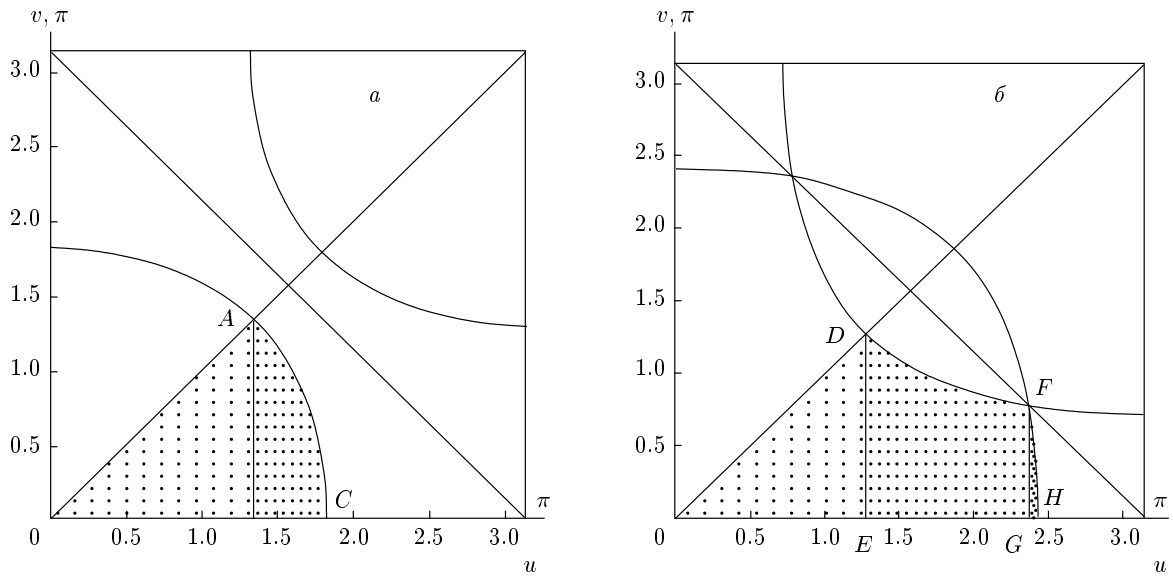


Рис. 9. Области интегрирования в переменных ГЦК-решетки: $a - \epsilon = 2$, $b - \epsilon = -1/2$

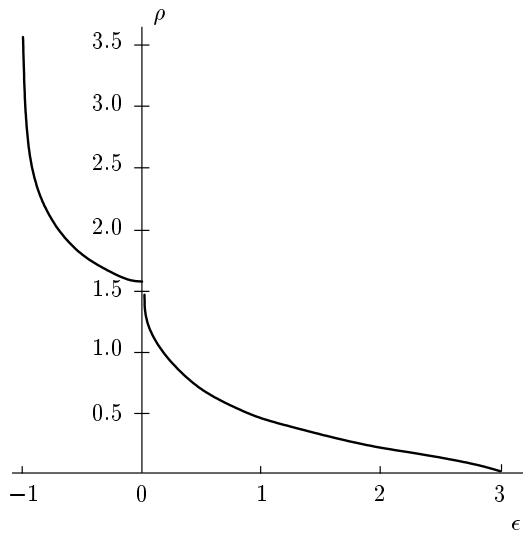


Рис. 10. Плотность состояний ГЦК-решетки $\rho(\epsilon)$

В случае $-1 < \epsilon < 0$ точке D соответствуют координаты

$$\{u = v = \pi - \arccos(-1 + \sqrt{1 + \epsilon})\},$$

точке E —

$$\{u = \pi - \arccos(-1 + \sqrt{1 + \epsilon}), v = 0\},$$

точке F —

$$\{u = \pi - \arccos(\sqrt{-\epsilon}), v = 2\pi - \arccos(\sqrt{-\epsilon})\},$$

точке H —

$$\{u = \pi - \arccos(1 - \epsilon/2), v = 0\}.$$

Этим способом можно вычислить плотность состояний ГЦК-решетки (см. рис. 10):

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{\pi^3} \times \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{du dv}{\sqrt{(\cos(u) + \cos(v))^2 - (\epsilon - \cos(u)\cos(v))^2}}. \tag{B.10}$$

Эта кривая совпадает с аналитической зависимостью, полученной в [7].

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Левин, *Введение в квантовую химию твердого тела*, Изд-во химия, Москва (1974). Перевод *Solid State Quantum Chemistry*, Mc Grow-Hill, New York (1977).
2. Т. О. Wehling, E. Şaşoğlu, C. Fridrich et al., *Phys. Rev. Lett.* **106**, 236805 (2011).
3. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **142**, 770 (2012).
4. Р. О. Зайцев, *Письма в ЖЭТФ* **95**, 422 (2012).
5. Л. П. Горьков, *ЖЭТФ* **34**, 735 (1958).
6. G. Iwata, *Natural Science Rept.*, Ochanomizu Univ. **20**, 13 (1969).
7. T. Morita and T. Horiguchi, *J. Math. Phys.* **12**, 981, 986 (1971).
8. E. A. Ekimov, S. M. Stishov et al., *Nature* **428**, 542 (2004).