

УДК 538.945

О НЕФОНОННОМ МЕХАНИЗМЕ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В СИСТЕМЕ s -, p -, d -ЭЛЕКТРОНОВ

Р. О. Зайцев

Изучается возможность парной конденсации в обобщенной модели Хаббарда. Определена область существования сверхпроводящего состояния, обусловленного сильным кинематическим взаимодействием в зависимости от n_p - и n_s , d -степеней недозаполнения $2p^6$ -, $6s^2$ - и $3d^{10}$ -оболочки O^{2-} , Vi^{3+} и Cu^+ . Вычислена температура сверхпроводящего перехода с учетом температурно-зависящего времени релаксации с переворотом спина.

Нефоновый механизм сверхпроводимости, основанный на кинематическом взаимодействии в модели Хаббарда [1-3], позволяет правильно описать сверхпроводящие высокотемпературных сверхпроводников типа $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. Для других соединений, таких как $(K, Ba)BiO_3$ и $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, модель Хаббарда не дает даже качественного построения фазовой диаграммы в зависимости от заряда комплексов BiO_3 или CuO_2 , которое бы соответствовало эксперименту. В настоящей работе показано, что возможность качественного согласования с экспериментом появляется, если отказаться от предположений о полном заполнении оболочки анионов O^{2-} и явно учесть электронный перескок между анионом и соседними катионами Vi^{3+} или Cu^+ . Энергетический сдвиг кислородных уровней относительно катионных считается заданным $r = \bar{\epsilon}_p - \epsilon_{s, d}$, так что модели Хаббарда соответствует $\bar{\epsilon}_p \gg U$. Реальной ситуации отвечает обратный предел, когда энергия Хаббарда U больше или порядка энергетического сдвига r , так что с увеличением химпотенциала μ происходит одновременное заполнение недозаполненных $2p^6$ -, $6s^2$ - или $3d^{10}$ -оболочек. Такая постановка задачи эквивалентна модели Эмери [4] с заданным интегралом перескока t и одночастичными $\bar{\epsilon}_p$, ξ энергиями p - и s (d)-дырок. Соответствующий гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = - \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'\sigma\lambda} t(p_{\mathbf{r}\sigma}^+(\lambda) a_{\mathbf{r}'\sigma} + \text{h. c.}) + \bar{\epsilon}_p \sum_{\mathbf{r}, \lambda\sigma} \hat{p}_{\mathbf{r}\sigma}^+(\lambda) p_{\mathbf{r}\sigma}(\lambda) + \xi \sum_{\mathbf{r}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{r}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{r}\sigma}. \quad (1)$$

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

В первом разделе работы находим область существования сверхпроводящего состояния в зависимости от n_p - и n_s , d -степени недозаполнения $2p^6$ -, $6s^2$ - и $3d^{10}$ -оболочек O^{2-} , Vi^{3+} или Cu^+ . В этом разделе не ставится задача вычисления температуры сверхпроводящего перехода, но находится область, для которой T_c отлична от нуля. Для решения этой задачи достаточно использовать нулевое приближение самосогласованного поля.

Во втором разделе все вычисления проведены в однопетлевом приближении, что позволяет определить температуру сверхпроводящего перехода T_c с учетом конечного времени релаксации с переворотом спина τ_s . Здесь показано, что оно внутренне присуще как модели Хаббарда [5], так и мо-

дели Эмери. Его сильная температурная зависимость существенно меняет общие соотношения теории БКШ при любой конечной температуре. В низкотемпературном пределе $T \ll T_c$, где обратное время релаксации $1/\tau_s$ обращается в нуль, при заданной T_c имеем обычную теорию БКШ.

1. Ф а з о в а я д и а г р а м м а

Определим условия, при которых появляется неустойчивость в куперовском канале для двух возбуждений, имеющих нулевое значение суммарного спина, импульса и энергии. Для этой цели достаточно ограничиться так называемым приближением «Хаббард-I», когда не учитываются флуктуационные явления и времена релаксации считаются бесконечными.

Предположим, что энергия отталкивания p -электронов, принадлежащих одному и тому же аниону, велика как по сравнению с энергиями одноэлектронных состояний $(\bar{\epsilon}_p, \xi)$, так и по сравнению с интегралом перескока. Энергию Хаббарда s - или d -состояний считаем большой, но конечной. Первому предположению соответствует возможность изменения валентности кислорода O^{2-} не больше чем на единицу, в то время как валентность Bi^{3+} и Cu^+ в нашей модели может измениться больше, чем на единицу (до 2), в зависимости от степени недозаполнения в $6s^2$ - и $3d^{10}$ -оболочки. Будет рассмотрен и другой предельный случай, когда энергия отталкивания p -электронов мала, а d -электроны по-прежнему имеют конечную (или бесконечно большую) энергию Хаббарда. Если ограничиться случаем возможного изменения валентности кислорода не больше, чем на единицу, тогда уравнение для спектра одночастичных возбуждений находим через полюсы $2+D$ -компонентной функции Грина, которую определим через обратную матрицу

$$G_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{matrix} (0, +) & (-, 2) & (0, p_s) \\ (0, +) & \begin{pmatrix} \Omega_0 & 0 & -\tau_p^{0s} \\ 0 & \Omega_2 & -\tau_p^{2s} \\ -\tau_p^{k0} & -\tau_p^{k2} & \delta_{ks}\Omega_p \end{pmatrix} & \\ (-, 2) & & \\ (0, p_k) & & \end{matrix} \quad (2)$$

В приближении «Хаббард-I» $\tau_p^{ak} = f_a t (1 - e^{ipk})$, $\tau_p^{ka} = ft (1 - e^{-ipk})$, индекс k пробегает три или два значения соответственно для комплекса BiO_3 и CuO_2 ; $f = 1 - 5/6 n_p$ или $f = 1 - 3/4 n_p$; $f_0 = 1 - n_{s,d}/2$; $f_2 = n_{s,d}/2$ — так называемые концевые множители [6], которые для нулевой энергии Хаббарда следовало бы считать равными единице,

$$n_{s,d} = 2T \sum_{\omega, p} \Omega_p (\Omega_2 f_0 + \Omega_0 f_2) e^{i\omega\delta} \Phi_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}). \quad (3)$$

Аналогично для p -электронов

$$n_p = \frac{2}{3} f_p \left\{ 8n_F(\bar{\epsilon}_p) + T \sum_{\omega, p} \Omega_0 \Omega_2 e^{i\omega\delta} \Phi_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) \right\} \quad (4a)$$

для кубического комплекса BiO_3 и

$$n_p = f_p \left\{ 3n_F(\bar{\epsilon}_p) + T \sum_{\omega, p} \Omega_0 \Omega_2 e^{i\omega\delta} \Phi_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) \right\} \quad (4б)$$

для слоев CuO_2 .

Первые слагаемые в (4a), (4б) отвечают бездисперсным атомным p_n -переходам, не туннелирующим в направлениях, перпендикулярных n . При нулевой энергии Хаббарда p -электронов везде следует положить $f_p = 1$.

Определитель матрицы (2) дает уравнение для спектра элементарных возбуждений $\Phi_{-i\epsilon}(\mathbf{p}) = 0$, где

$$\begin{aligned} \Phi_{\omega}(\mathbf{p}) &= \Omega_0 \Omega_2 \Omega_p - f_p t_p^2 (\Omega f_2 + \Omega_2 f_0), \\ \Omega_k &= i\omega - \xi_k, \quad \xi_0 = -\frac{U}{2} - \mu, \quad \xi_2 = \frac{U}{2} - \mu, \quad \bar{\epsilon}_p = \epsilon_p - \mu, \\ t_p^2 &= 2t^2 \left(D - \sum_{\lambda} \cos p_{\lambda} \right). \end{aligned} \quad (5)$$

В случае предельно большой энергии $\bar{\epsilon}_p$ ($\Omega_p \rightarrow -\infty$) из (5) получаем уравнения для спектра возбуждений, которые следуют из классической модели Хаббарда с эффективным интегралом перескока $\tau_p = -t_p^2 f_p / \bar{\epsilon}_p$. В предельном случае бесконечно большой энергии Хаббарда ($\Omega_2 \rightarrow -\infty$) имеем случай одновременного заполнения p - и нижней хаббардовской подзоны со следующим спектром возбуждений:

$$\xi_p^{(\pm)} = \pm \sqrt{r_0^2/4 + f_p t_p^2} - \mu_0, \quad (6)$$

где

$$r_0 = \bar{\epsilon}_p - \xi_0, \quad f = f_0 = 1 - \frac{n_s, d}{2}, \quad \mu_0 = \mu + \frac{U}{2} - \frac{r_0}{2}, \quad 0 < n_s, d < 1.$$

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

$$\xi_p^{(\pm)} = \pm \sqrt{r_2^2/4 + f_p t_p^2} - \mu_2, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} r_2 &= \bar{\epsilon}_p - \xi_2, \quad f = f_2 = \frac{n_s, d}{2}, \\ \mu_2 &= \mu - \frac{U}{2} - \frac{r_2}{2}, \quad 1 < n_s, d < 2. \end{aligned}$$

Условие возникновения сверхпроводящего состояния определим, согласно Горькову [7], из условия появления особенности двухчастичной $(2+D)^2$ -компонентной вершинной части $\Gamma_{\alpha\beta}$ при нулевых суммарных частоте, импульсе и спине

$$\Gamma_{\alpha\beta} = -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} g_{\alpha\beta\lambda\nu}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{\nu\nu'}(-\mathbf{p}) G_{\omega}^{\lambda\lambda'}(\mathbf{p}) \Gamma_{\nu'\lambda'}. \quad (8)$$

Здесь $G_{\omega}^{\beta\beta}(\mathbf{p})$ — компоненты одночастичной функции Грина, полученные из (2); $g_{\alpha\beta\lambda\nu}$ — двухчастичная вершинная часть, неприводимая по импульсам одинакового направления, которую находим по методу Дайсона [8]. Для любых двух операторов Хаббарда X_r^{α} имеем тождество

$$[\hat{H}, X_r^{\alpha} X_r^{\beta}] = -X_r^{\beta} [\hat{H}, X_r^{\alpha}] + X_r^{\alpha} [\hat{H}, X_r^{\beta}] + \{[\hat{H}, X_r^{\alpha}] X_r^{\beta}\}. \quad (9)$$

Если под $X_{r, r'}^{\alpha, \beta}$ подразумевать операторы рождения одночастичных Ферми-возбуждений, то, действуя левой частью (9) на основное состояние, получаем энергию двухчастичных возбуждений, которая справа дает сумму энергий одночастичных возбуждений плюс дополнительную энергию, происходящую от третьего слагаемого правой части (9). Выразим гамилтониан Эмери (1) через операторы Хаббарда $\hat{p}_{r\sigma}^{\pm}(\lambda) = X_{r\sigma}^{\lambda, 0}, a_{r\sigma}^{\pm} = X_r^{\sigma, 0} + c X_r^{2, \bar{\sigma}}$ и подставим его в (9). В результате для случая рассеяния с противоположными значениями проекции спина $\bar{\sigma}$ имеем $2+D$ -ненулевых амплитуды

$$\begin{aligned} \{[\hat{H}, X_r^{\sigma, 0}] X_{r'}^{\bar{\sigma}, 0}\} &= -\sum_{r'', \lambda} t(r'' - \mathbf{r}) \{X_{r''}^{\lambda, 0} X_{r'}^{\bar{\sigma}, 0} - X_{r''}^{\lambda, 0} X_{r'}^{\bar{\sigma}, 0}\} \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}, \\ \{[\hat{H}, X_r^{\lambda, 0}] X_{r'}^{\lambda', 0}\} &= -\sum_{r''} t(r'' - \mathbf{r}) \{X_{r''}^{\sigma, 0} X_{r'}^{\lambda', 0} - X_{r''}^{\bar{\sigma}, 0} X_{r'}^{\lambda, 0}\} \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \delta_{\lambda, \lambda'}, \\ \{[\hat{H}, X_r^{2, \bar{\sigma}}] X_{r'}^{2, \sigma}\} &= \sum_{r''} t(r'' - \mathbf{r}) \{X_{r''}^{\lambda, 0} X_{r'}^{2, \sigma} - X_{r''}^{\lambda, 0} X_{r'}^{2, \bar{\sigma}}\} \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}. \end{aligned} \quad (10)$$

После перехода к импульсному представлению $X_r^* = \sum_p X_p^z e^{ipr}$ обнаруживаем, что каждое слагаемое в правой стороне (10) дает борновскую амплитуду кинематического взаимодействия $g_{\alpha\beta\lambda\nu}$, где пары $\alpha\beta$ отвечают начальным состояниям (в левой части (10) $[(\sigma, 0); (\bar{\sigma}, 0)]$, $[(\lambda, 0); (\bar{\lambda}, 0)]$, $[(2, \bar{\sigma}), (2, \sigma)]$), а индексы λ, ν — всевозможные двухчастичные состояния в правой стороне (10).

Комбинируя всевозможные пары переходов, получаем всего $4+D$ уравнений. Это упрощение происходит от того, что амплитуды кинематического взаимодействия (10) в нашей модели отличны от нуля только для переходов с одинаковыми индексами k и для совпадающих ячеек (рис. 1). Для неизвестных вершинных частей Γ_{00} , Γ_{22} , Γ_{20} , Γ_{02} , Γ_{kk} имеется $1+D$ соотношений

$$\Gamma_{kk} = \Gamma_p, \quad 2\Gamma_{02} = \Gamma_{00} - \Gamma_{22} = -2\Gamma_{20}, \quad (11)$$

первое следует из симметрии решетки, два других являются следствием перестановочных соотношений. Условие разрешимости получающейся

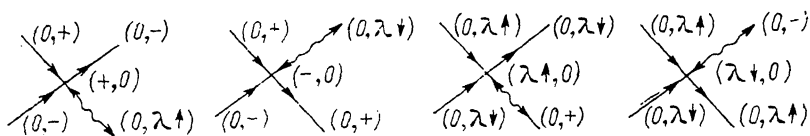


Рис. 1. Борновские амплитуды кинематического взаимодействия при $n_d < 1$, $U = \infty$. Для верхней подзоны Хаббарда $n_d > 1$ следует произвести замену $(0, \pm) \rightarrow (\mp, 2)$.

системы уравнений удастся записать в логарифмическом приближении, когда между вершинами Γ_{00} и Γ_{22} имеется связь

$$\Gamma_{00}/\Gamma_{22} = -f_0 \xi_2^2 / f_2 \xi_0^2, \quad (12)$$

Окончательная система уравнений для Γ_p и $\Gamma = \Gamma_{00} \xi_0^2 / f_0 = -\Gamma_{22} \xi_2^2 / f_2$ имеет следующий вид:

$$\Gamma = 2T \sum_{\omega, p} t_p^2 \left\{ t_p^2 f_p^2 (\Omega_2 - \Omega_0) \left(\frac{\Omega_2 f_0}{\Omega_0} + \frac{\Omega_0 f_2}{\Omega_2} \right) \Gamma + \Omega_p (\Omega_0 \Omega_2)^2 \Gamma_p \right\} W_{\omega}^{-1}(p),$$

$$D\Gamma_p = 2f_p T \sum_{\omega, p} \left\{ t_p^2 (\Omega_2 - \Omega_0) \left(\frac{\Omega_2 f_0}{\omega_0} + \frac{\Omega_0 f_2}{\omega_2} \right) \Gamma + \frac{\Omega_p}{f_p^2} (\Omega_0 \Omega_2)^2 \Gamma_p \right\} W_{\omega}^{-1}(p). \quad (13)$$

$$W_{\omega}(p) = |\Omega_0 \Omega_2 \Omega_p - (\Omega_0 f_2 + \Omega_2 f_0) t_p^2|^2.$$

Условие разрешимости системы (13) имеет простую форму

$$2f_p T \sum_{\omega, p} \left\{ f_p (\Omega_2 - \Omega_0) \left(\frac{\Omega_2 f_0}{\Omega_0} + \frac{\Omega_0 f_2}{\Omega_2} \right) t_p^4 + \Omega_p (\Omega_0 \Omega_2)^2 / D f_p^3 \right\} W_{\omega}^{-1}(p) = 1. \quad (14)$$

Учитывая условие $\Omega_0 - \Omega_2 = U$ и полагая $(\Omega_2 f_0 + \Omega_0 f_2) t_p^2 f_p \approx \Omega_0 \Omega_2 \Omega_p$, $\Omega_p \approx -\xi_p$, находим условие существования сверхпроводящего состояния

$$\frac{Df_p U \xi_p^2 (f_0 \xi_2^2 + f_2 \xi_0^2)}{\xi_0 \xi_2} + \xi_p (f_2 \xi_0 + f_0 \xi_2)^2 < 0. \quad (15)$$

В предельном случае $\xi_p \gg U$ из (15) получаем результат расчета [2] $T_c \propto \exp(-1/\lambda_0)$, где

$$\lambda_0 = 2U (U^2 - 4\mu^2) \rho_0(\epsilon) (Ux - 2\mu)^{-2}, \quad (16)$$

$x = 1 - n$ — степень недозаполнения нижней подзоны Хаббарда, $\rho_0(\epsilon)$ — заданная плотность состояний с эффективным интегралом перескока $-t_p^2/\xi_p$.

Если предположить, что энергия Хаббарда p -электронов $U_p = 0$, то в уравнениях (13) $\Gamma_p = 0$, так что вместо (15) имеем простейшее неравенство

$\xi_0 \xi_2 < 0$. Наибольший интерес представляет случай, когда энергия возбуждений находится внутри корреляционной щели.

В предельном случае $U_d \rightarrow \infty$, когда p -состояния заполняются одновременно с нижней s (d)-подзоной Хаббарда, имеем спектр (6), $n_{s,d} < 1$, а условие сверхпроводимости (15) преобразуется к следующему виду:

$$\frac{\bar{\epsilon}_p}{f_0} + \frac{\xi_0}{Df_p} < 0 \quad (\xi_0 < 0, U_p = 0). \quad (17)$$

Используя явное выражение для спектра возбуждений (6) и переходя к пределу $U_d \rightarrow \infty$ в соотношениях (3) и (4), удается обнаружить, что сверхпроводимость может существовать только для n_p , достаточно близких к единице (когда заполняется $\xi_p^{(+)}$ -зона)

$$\begin{aligned} 4(8 - 5n_d)/(32 - 19n_d) < n_p < 1 \quad (D=2, \text{CuO}_2), \\ 12(9 - 5n_s)/(108 - 59n_s) < n_p < 1 \quad (D=3, \text{BiO}_3). \end{aligned} \quad (18)$$

Если нижняя s (d)-подзона Хаббарда заполнена, а p -состояния заполняются одновременно с верхней подзоной, то $1 < n_{s,d} < 2$, $\xi_0 \sim -U_d \rightarrow -\infty$, а условие сверхпроводимости (15) преобразуется к виду, аналогичному (17)

$$-\frac{\bar{\epsilon}_p}{f_2} + \frac{\xi_2}{Df_p} < 0 \quad (\xi_2 > 0, U_p = 0). \quad (19)$$

В предельном случае $U_p = \infty$ сверхпроводимость осуществляется при заполнении как $\xi_p^{(-)}$, так и $\xi_p^{(+)}$ -зоны (7). Если энергия p -состояний превышает энергию одночастичных состояний в верхней (s , d)-подзоне $\bar{\epsilon}_p - \xi_2 = r_2 > 0$, то при $n_{s,d} > 4/3$ сверхпроводимость существует во всей $\xi_p^{(-)}$ -подзоне

$$\begin{aligned} 0 < n_p < 4(2 - n_d)/(6 + n_d), \quad D=2, \text{CuO}_2\text{-комплекс}, \\ 0 < n_p < 3(2 - n_d)/(5 + 2n_s), \quad D=3, \text{BiO}_3\text{-комплекс}. \end{aligned} \quad (20)$$

В случае, когда энергия p -состояний находится внутри корреляционной щели, $1 < n_{s,d} < 4/3$ и $r_2 = \bar{\epsilon}_p - \xi_2$, граница по n_p определяется из условия (19) и может быть получена только для нижней части $\xi_p^{(-)}$ -зоны. При $D=3$ и для полуэллиптической плотности состояний (по $\epsilon = \Sigma \cos p_k/3$) $n_p^{\max} = 0.31$, $n_s = 1.18$; для $D=2$ в модели плоской зоны $n_p^{\max} = 0.39$, $n_d = 1.23$. В этой области число n_p достаточно мало, амплитуда p - p -рассеяния положительна, а сверхпроводимость осуществляется кинематическим взаимодействием s - или d -возбуждений. С повышением числа n_p -возбуждений их отталкивательная роль возрастает, что и приводит к ограничению по n_p области существования сверхпроводящих решений.

В обратном предельном случае $U_p = 0$, но $U_d = \infty$ сверхпроводимость по-прежнему существует в правой нижней части n_p, n_d -диаграммы

$$1 < n_d < 2, 1 < n_p < (2 - n_d)/n_d \quad (D=2). \quad (21)$$

Таким образом, включение хаббардовского p - p -отталкивания сужает область существования сверхпроводимости d - d -типа (ср. (20) и (21)), но приводит к появлению узкой области существования сверхпроводимости p - p -типа при $n_d \geq 1$ и $n_p \leq 1$, когда валентность кислорода близка к -1 . В областях (20) или (21) заряды комплексов $Q = Dn_p + n_{s,d} - 3$ достаточно малы, что вполне соответствует эксперименту [9-11]. Заметим, что условие сверхпроводимости (19) выполняется при $n_{s,d} > 4/3$, $n_p \sim 1$, т. е. при заполнении верхней подзоны $\xi_p^{(+)}$ (7). В этом случае $Q > 0$, что делает его неинтересным для физического рассмотрения. Это же самое соображение относится к предельному случаю $U_p = 0$ и $0 < n_d < 1$, для которого сверхпроводимость могла бы существовать в области $(8 - 5n_d)/(2 - n_d) < n_p < 4$.

Наиболее важной отличительной особенностью как изучаемой модели, так и модели Хаббарда (кроме отсутствия изотопического эффекта) оказывается наличие конечной длины свободного пробега, происходящей от рассеяния на флуктуациях спина и заряда. Будет показано, что процессы рассеяния на флуктуациях спина не меняют знака амплитуды рассеяния, но сильно перенормируют эффективную константу взаимодействия, входящую в определение температуры сверхпроводящего перехода.

Рассмотрим сначала вклад от собственно-энергетических частей $\Sigma_{\omega(\mathbf{p})}^{0\lambda}$ и $\Sigma_{\omega}^{\lambda 0}(\mathbf{p})$ для случая $U_d = U_p = \infty$, когда происходит заполнение нижней подзоны $s(d)$ -электронов. Обе функции пропорциональны «своим» интегралам перескока $\tau_p^{0\lambda}$ и $\tau_p^{\lambda 0}$ (определены в (2))

$$\Sigma_{\omega}^{0\lambda}(\mathbf{p}) = \frac{K_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p})}{f_0^2} \tau_p^{0\lambda}, \quad \Sigma_{\omega}^{\lambda 0}(\mathbf{p}) = \frac{K_{\omega}^{(\lambda)}(\mathbf{p})}{Df_{\lambda}^2} \tau_p^{\lambda 0}. \quad (22)$$

Температурная зависимость собственно-энергетических частей определяется через функции $K_{\omega}^{(0)}$ и $K_{\omega}^{(\lambda)}(\mathbf{p}) \equiv K_{\omega}^{(n)}(\mathbf{p})$, которые в простейшем одно-

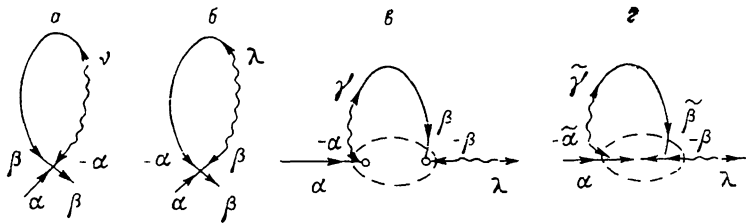


Рис. 2. Графическое изображение однопетлевых собственно-энергетических частей. а, б — кинематическое; в, г — флуктуационное рассеяние. Переходы $\tilde{\alpha}$, $\tilde{\beta}$, $\tilde{\gamma}$ отличаются от α , β , γ измененным знаком проекции спина.

петлевым приближении пропорциональны среднеквадратичным корреляторам плотности $\delta\hat{n}_n(\mathbf{r}, t)$ и спина $\delta\hat{S}_n(\mathbf{r}, t)$ (рис. 2).

В статическом приближении имеем

$$\begin{aligned} \text{Im } \Sigma_{\omega}^{0\lambda}(\mathbf{p}) &= \pi T \sum_{\mathbf{p}'} \chi_d^{(+)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta(\xi_{\mathbf{p}'}) \frac{\epsilon_p \xi_0 \tau_p^{0\lambda}}{2f_0^2 |\mu_0|}, \\ \text{Im } \Sigma_{\omega}^{\lambda 0}(\mathbf{p}) &= \pi T \sum_{\mathbf{p}'} \chi_p^{(+)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta(\xi_{\mathbf{p}'}) \frac{\epsilon_p \xi_0 \tau_p^{\lambda 0}}{2Df_p^2 |\mu_1|}. \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь

$$\chi_n^{(+)}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \int_0^{1/T} \left\{ \frac{1}{4} \langle \delta\hat{n}_n(\mathbf{r}, t) \delta\hat{n}_n(0, 0) \rangle + \langle \delta\hat{S}_n(\mathbf{r}, t) \delta\hat{S}_n(0, 0) \rangle \right\} dt. \quad (24)$$

Подставляя (23) в уравнение Дайсона

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

где в качестве нулевого приближения взята матрица (2), находим обратное время релаксации для нормальной фазы

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{\pi T (\xi_0 \epsilon_p)^2}{2\mu_0^2} \sum_{\mathbf{p}'} \delta(\xi_{\mathbf{p}'}) \left\{ \frac{\chi_d^{(+)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')}{f_0^2} + \frac{\chi_p^{(+)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')}{Df_p^2} \right\}. \quad (25)$$

С понижением температуры, когда возникает сильная временная дисперсия с частотами $\omega \sim T$, необходимо выйти за рамки статического приближения. Однако еще раньше, когда система переходит в сверхпроводящее состояние, корреляторы $K^{(n)}$, входящие в определения собственно-

энергетических частей, начинаются зависеть от аномальных собственно-энергетических частей, возникающих ниже точки перехода. Обозначая переходы $(-, 0)$ через $\bar{0}$, а переходы $(\lambda_{\downarrow}, 0)$ через $\bar{\lambda}$, которые сопряжены с переходами $(0, +) \rightarrow 0$ и $(0, \lambda_{\uparrow}) \rightarrow \lambda$, можно записать следующее общее выражение для обратной функции Грина ($U = \infty$):

$$G_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{matrix} & 0 & \nu & \bar{0} & \bar{\nu} \\ \begin{matrix} 0 \\ \lambda \\ \bar{0} \\ \lambda \end{matrix} & \left(\begin{array}{cccc} \Omega_0 & -\tau_{\mathbf{p}}^{0\nu} - \Sigma_{\omega}^{0\nu}(\mathbf{p}) & \Delta_0 & -\bar{\Sigma}_{\omega}^{0\bar{\nu}}(\mathbf{p}) \\ -\tau_{\mathbf{p}}^{\lambda 0} - \Sigma_{\omega}^{\lambda 0}(\mathbf{p}) & \delta_{\lambda\nu}\Omega_{\lambda} & -\bar{\Sigma}_{\omega}^{\lambda\bar{0}}(\mathbf{p}) & \delta_{\lambda\bar{\nu}}\Delta_{\lambda} \\ \Delta_0 & -\bar{\Sigma}_{\omega}^{0\nu}(\mathbf{p}) & \Omega_0 & -\tau_{\mathbf{p}}^{0\bar{\nu}} - \Sigma_{\omega}^{0\bar{\nu}}(\mathbf{p}) \\ -\bar{\Sigma}_{\omega}^{\lambda 0}(\mathbf{p}) & \delta_{\lambda\nu}\Delta_{\lambda} & -\tau_{\mathbf{p}}^{\lambda\bar{0}} - \Sigma_{\omega}^{\lambda\bar{0}}(\mathbf{p}) & \delta_{\lambda\bar{\nu}}\Omega_{\lambda} \end{array} \right) \end{matrix}. \quad (26)$$

Аномальные собственно-энергетические части имеют вид, вполне аналогичный (22)

$$\bar{\Sigma}_{\omega}^{0\lambda}(\mathbf{p}) = \frac{R_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p})}{f_0^2} \tau_{\mathbf{p}}^{0\lambda}, \quad \bar{\Sigma}_{\omega}^{\lambda 0}(\mathbf{p}) = \frac{R_{\omega}^{(\lambda)}(\mathbf{p})}{Df_p^2} \tau_{\mathbf{p}}^{\lambda 0}. \quad (27)$$

Уравнения для неизвестных функций $K_{\omega}^{(\nu)}(\mathbf{p})$ и $R_{\omega}^{(\nu)}(\mathbf{p})$ запишем в однопетлевом и статическом приближении

$$K_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p}) = T \sum_{\mathbf{p}', \lambda} \chi_{\mathbf{p}}^{(+)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \tau_{\mathbf{p}'}^{0\lambda} G_{\omega}^{\lambda 0}(\mathbf{p}'),$$

$$K_{\omega}^{(\nu)}(\mathbf{p}) = T \sum_{\mathbf{p}', \lambda} \chi_{\mathbf{p}'}^{(+)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \tau_{\mathbf{p}'}^{\lambda 0} G_{\omega}^{0\lambda}(\mathbf{p}'), \quad (28)$$

$$R_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p}) = T \sum_{\mathbf{p}', \lambda} \chi_{\mathbf{p}}^{(-)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \tau_{\mathbf{p}'}^{0\lambda} G_{\omega}^{\lambda\bar{0}}(\mathbf{p}'),$$

$$R_{\omega}^{(\nu)}(\mathbf{p}) = T \sum_{\mathbf{p}', \lambda} \chi_{\mathbf{p}'}^{(-)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \tau_{\mathbf{p}'}^{\lambda\bar{0}} G_{\omega}^{\bar{0}\lambda}(\mathbf{p}'). \quad (29)$$

Определение восприимчивости $\chi_n^{(-)}(\mathbf{q})$ от $\chi_n^{(+)}(\mathbf{q})$ отличается знаком перед флуктуацией «плотность—плотность»

$$\chi_n^{(\pm)}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} \int_0^{1/T} \left\{ \pm \frac{1}{4} \langle \delta \hat{n}_n(\mathbf{r}, t) \delta \hat{n}_n(0, 0) \rangle + \langle \delta \hat{s}_n(\mathbf{r}, t) \delta \hat{s}_n(0, 0) \rangle \right\} dt. \quad (30)$$

Систему уравнений (22), (27)—(29) необходимо дополнить уравнениями для диагональных собственно-энергетических частей, определяемых амплитудами кинематического взаимодействия

$$\Delta_0 = \frac{2T}{f_0} \sum_{\omega, \mathbf{p}, \lambda} \tau_{\mathbf{p}}^{0\lambda} G_{\omega}^{\lambda\bar{0}}(\mathbf{p}), \quad \Delta_p = \frac{2T}{Df_p} \sum_{\omega, \mathbf{p}, \lambda} \tau_{\mathbf{p}}^{\lambda\bar{0}} G_{\omega}^{\bar{0}\lambda}(\mathbf{p}). \quad (31)$$

Обобщенную восприимчивость (30) следует вычислять при заданной температуре. Выражая ее через интегралы от точной функции Грина (26), можно было бы замкнуть систему уравнений. Однако в настоящей работе мы будем рассматривать два предельных случая: а) низкотемпературный, когда при $T=0$ все времена релаксации, вычисленные на поверхности Ферми, следует считать бесконечными; б) температура вблизи T_c , когда все корреляторы достаточно вычислить в нормальной фазе.

Заметим далее, что решение уравнений (22), (26)—(31) невозможно даже при заданных функциях $\chi_n^{(\pm)}(\mathbf{q})$. По этой причине для получения качественной картины заменим все восприимчивости соответствующими средними значениями, вычисленными на поверхности Ферми $1/\tau_p \rightarrow \sum_{\mathbf{p}} \delta(\xi_{\mathbf{p}})/\bar{\rho}\tau_p$, где $1/\tau_p$ определено в (25), а $\bar{\rho} = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\xi_{\mathbf{p}})$ — плотность состояний на уровне Ферми.

В результате аналогичного преобразования в (28) и (29) неизвестные функции заменяются соответствующими средними

$$K_n = \chi_n^{(+)} T \sum_{p, \lambda} \tau_p^{0\lambda} G_\omega^{\lambda 0}(p),$$

$$R_n = \psi_n^{(-)} T \sum_{p, \lambda} \tau_p^{\lambda 0} G_\omega^{0\lambda}(p),$$

где

$$\chi_n^{(\pm)} = \sum_{p, p'} \delta(\xi_p) \delta(\xi_{p'}) (\bar{p})^{-2} \chi_n^{(\pm)}(p - p'). \quad (32)$$

Все уравнения самосогласования удается записать через две неизвестные функции σ_ω и $\bar{\sigma}_\omega$

$$\sigma_\omega^{0\lambda}(p) = \frac{\chi_0^{(+)} \tau_p^{0\lambda} \sigma_\omega}{f_0^2}, \quad \sigma_\omega^{\lambda 0}(p) = \frac{\chi_p^{(+)} \tau_p^{\lambda 0} \sigma_\omega}{Df_p^2},$$

$$\bar{\sigma}_\omega^{0\lambda}(p) = \frac{\chi_0^{(-)} \tau_p^{0\lambda} \bar{\sigma}_\omega}{f_0^2}, \quad \bar{\sigma}_\omega^{\lambda 0}(p) = \frac{\chi_p^{(-)} \tau_p^{\lambda 0} \bar{\sigma}_\omega}{Df_p^2}. \quad (33)$$

Диагональные собственно-энергетические части Δ_0 и Δ_λ выражаются через функцию $\bar{\sigma}_\omega$

$$\Delta_0 = \frac{2T}{f_0} \sum_\omega \bar{\sigma}_\omega, \quad \Delta_\lambda = \frac{2T}{Df_\lambda} \sum_\omega \bar{\sigma}_\omega. \quad (34)$$

Однопетлевому приближению (28), (29) отвечают следующие уравнения самосогласования:

$$\sigma_\omega = \sum_{p, \lambda} \tau_p^{0\lambda} G_\omega^{\lambda 0}(p) = \sum_{p, \lambda} \tau_p^{\lambda 0} G_\omega^{0\lambda}(p),$$

$$\bar{\sigma}_\omega = \sum_{p, \lambda} \tau_p^{0\lambda} G_\omega^{\lambda 0}(p) = \sum_{p, \lambda} \tau_p^{\lambda 0} G_\omega^{0\lambda}(p), \quad (35)$$

которые вместе с определениями (26), (32) и (33) представляют собой замкнутую систему уравнений (при заданных $\chi_n^{(+)}$ и $\chi_n^{(-)}$).

Для нахождения температуры сверхпроводящего перехода рассмотрим уравнение, линеаризованное по $\bar{\sigma}_\omega$

$$\bar{\sigma}_\omega = \bar{\sigma} \left(\frac{\Omega_p}{f_0} + \frac{\Omega_n}{Df_p} \right) \overline{\sum_y \tau_p^{0y} \tau_p^{y0}} - \bar{\sigma}_\omega \left(\frac{\chi_0^{(-)}}{f_0^2} + \frac{\chi_p^{(+)}}{Df_p^2} \right) \left(\overline{\sum_y \tau_p^{0y} \tau_p^{y0}} \right)^2, \quad \bar{\sigma} = 2T \sum_\omega \bar{\sigma}_\omega. \quad (36)$$

Черта означает суммирование по всем p с дополнительным множителем

$$\Pi_\omega(p) = [(\bar{\omega}_n^2 + \xi_n^2)(\bar{\omega}_n^2 + \xi_n^2)]^{-1}, \quad \bar{\omega}_n = \omega_n + \text{sgn } \omega / 2\tau. \quad (37)$$

Здесь $1/\tau = \sum_p \delta(\xi_p) / \bar{\rho} \tau_p$ — обратное время релаксации (25), усредненное по поверхности Ферми.

Окончательное уравнение для определения температуры перехода находим из второго соотношения (36)

$$1 = -2T \sum_\omega \left(\frac{\bar{\xi}_p}{f_0} + \frac{\xi_0}{Df_p} \right) \frac{\overline{\left(\sum_y \tau_p^{0y} \tau_p^{y0} \right)}}{1 + \left(\frac{\chi_0^{(-)}}{f_0^2} + \frac{\chi_p^{(-)}}{Df_p^2} \right) \left(\overline{\sum_y \tau_p^{0y} \tau_p^{y0}} \right)^2}. \quad (38)$$

Произведем явное вычисление средних с помощью интегрирования вблизи поверхности Ферми. Учитывая определение времени релаксации (25), получаем

$$1 = -T \sum_\omega \frac{\pi \xi_0 \bar{\xi}_p \bar{\rho} (\bar{\xi}_p / f_0 + \xi_0 / Df_p)}{2\mu^2 (|\omega| + 1/\tau_s)}. \quad (39)$$

Здесь

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{\pi (\xi_0 \bar{\epsilon}_p)^2}{2\mu^2} \left(\frac{\bar{K}_p}{Df_p^2} + \frac{\bar{K}_0}{f_0^2} \right), \quad (40)$$

— обратное время релаксации с переворотом спина, которое зависит от температуры через корреляторы спиновых флуктуаций

$$K_n = T \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \delta(\xi_p) \delta(\xi_{p'}) (\bar{\rho})^{-1} \chi_n(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (41)$$

где

$$\chi_n(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \int_0^{1/T} \langle \delta s_n(\mathbf{r}, t) \delta s_n(0, 0) \rangle dt$$

— статическая восприимчивость нормальной фазы. При заполнении верхней подзоны, когда $1 < n_s, d < 2$, получаем те же формулы (39), (40) с заменой индекса «0» на «2» и дополнительной сменой знака перед f_2 .

Формальное рассмотрение (38) приводит к заключению о расходимости суммы по $\omega_n = (2n+1)\pi T$. Однако на самом деле она обрезается на частоте $\omega^* = \bar{\epsilon}$, которая не зависит от τ_s . В результате получим уравнение на T_c

$$\pi T_c = 2\gamma \bar{\epsilon} \exp(-1/\bar{\lambda}),$$

где

$$\bar{\lambda} = \left[\lambda_0^{-1} + \psi\left(\frac{1}{2} + \zeta\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \right]^{-1}, \quad \lambda_0 = \frac{\xi_0 \bar{\epsilon}_p \bar{\rho}}{2\mu^2} \left(-\frac{\bar{\epsilon}_p}{f_0} - \frac{\xi_0}{Df_p} \right). \quad (42)$$

При больших значениях параметра $\zeta = 1/2\pi T_c \tau_s$ асимптотика $\psi(\zeta) \sim \ln \zeta$, так что при малых τ_s температурная зависимость в (42) исчезает, определяя, таким образом, максимальное значение магнитной восприимчивости, для которого еще возможен переход в сверхпроводящее состояние.

Как уже отмечалось, для нормальной фазы восприимчивость слабо зависит от температуры, так что коэффициенты \bar{K}_n , входящие в определение параметра ζ , зависят от температуры в основном по линейному закону и обращаются в нуль при $T \rightarrow 0$. Этот результат справедлив и при учете неупругих процессов, поскольку исходный гамильтониан (1) не содержит взаимодействия, приводящего к перевороту спина. Таким образом, существование конечного времени релаксации при $T \neq 0$ сильно уменьшает, но не обращает в нуль температуру сверхпроводящего перехода в отличие от того, что происходит в сверхпроводниках с парамагнитными примесями [12]. В низкотемпературном пределе $T \ll T_c$, когда все корреляторы R_n и K_n обращаются в нуль, различие между $\bar{\omega}$ и ω исчезает. Все $\bar{\Sigma}_{\omega}(p) \rightarrow 0$, а уравнение для Δ_p и Δ_0 в силу общих соотношений (30) сводится к одному уравнению. В него входит единственная комбинация $\Delta = (\xi_0 \Delta_p + \bar{\epsilon}_p \Delta_0)/2\mu$, причем $\Delta_0/\Delta_p = -Df_p/f_0$. При $T=0$ получаем уравнение БКШ с эффективной константой

$$g = -\frac{\xi_0 \bar{\epsilon}_p}{2\mu^2} \left(\frac{\bar{\epsilon}_p}{f_0} + \frac{\xi_p}{Df_p} \right), \quad 1 = \frac{g}{2} \sum_p (\Delta^2 + \xi_p^2)^{-1/2}. \quad (43)$$

В случае заполнения верхней подзоны имеем несколько иное определение

$$g = \frac{\bar{\epsilon}_p \xi_2}{2\mu^2} \left(\frac{\bar{\epsilon}_p}{f^2} - \frac{\xi_2}{Df_p} \right). \quad (44)$$

После интегрирования вблизи поверхности Ферми из уравнения (43) получим известное уравнение для щели в спектре возбуждений

$$\Delta = 2\bar{\epsilon} \exp(-1/\lambda_0), \quad (45)$$

где λ_0 — та же, что и в (42).

Сравнение (45) и (42) позволяет найти $2\Delta(T=0)/T_c$, измеряемое на опыте

$$2\Delta_0/T_c = 8\pi \exp[\psi(1/2 + \zeta)], \quad (46)$$

которое, таким образом, всегда оказывается больше своего классического значения $2\pi/\gamma = 3.53$.

Таким образом, сверхпроводимость в модели Эмери сводится к однопараметрической теории сверхпроводимости, которая при $T=0$ приводится к модели БКШ, а при конечной температуре имеет свойства, аналогичные сверхпроводникам с парамагнитной примесью. Соответственно этому вблизи точки перехода можно получить уравнения Гинзбурга—

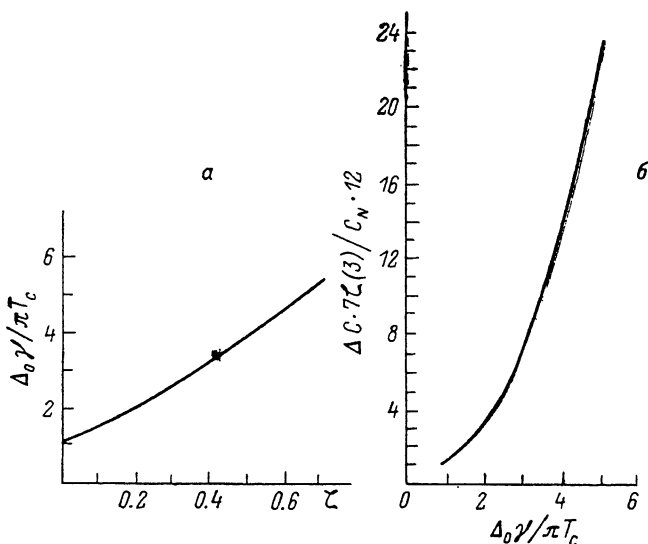


Рис. 3. Неуниверсальные зависимости Δ_0/T_c от ζ (а) и $\Delta C/C_N$ (б) от Δ_0/T_c в предположении о полной независимости параметра ζ от температуры.

Ландау с коэффициентами, зависящими от двух времен релаксации τ_s и τ с переворотом и без переворота спина. Вычисление этих коэффициентов, а также температурной зависимости τ и τ_s в сверхпроводящей фазе является предметом специального исследования.

3. Заключение

Результат (46), являющийся следствием сильной температурной зависимости τ_s , дополняется различными соотношениями, которые следуют из теории Гинзбурга—Ландау и справедливы вблизи T_c

$$\alpha\psi^*(T - T_c) - \frac{\delta_\alpha \delta_\beta}{4m_{\alpha\beta}} \psi^* + b|\psi|^2\psi^* = 0. \quad (47)$$

Здесь

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}} = \frac{D}{2\mu\bar{\rho}} \sum_{\mathbf{p}} \delta(\xi_{\mathbf{p}}) \frac{\partial \xi}{\partial p_\alpha} \frac{\partial \xi}{\partial p_\beta}, \quad |\psi|^2 = C|\Delta|^2, \quad (48)$$

а коэффициенты α , b и C определены через τ и τ_s , как в теории сверхпроводников с парамагнитными примесями [12] (см. также работу автора [5])

$$\alpha = \bar{\rho} \left[1 + \frac{\partial \zeta}{\partial (\ln T_c)} \psi' \left(\frac{1}{2} + \zeta \right) \right] / 2CT_c, \quad \psi(x) = \Gamma'(x) / \Gamma(x),$$

$$b = \bar{\rho} \left[-\psi'' \left(\frac{1}{2} + \zeta \right) - \frac{\zeta}{3} \psi''' \left(\frac{1}{2} + \zeta \right) \right] / 32(\pi T_c C)^2,$$

$$C = \frac{\mu \bar{\rho}}{D(2\pi T_c)^2} \frac{\partial}{\partial \zeta} \left[\frac{\psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi T_c \tau} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} + \zeta \right)}{\zeta - 1/4\pi T_c \tau} \right]. \quad (49)$$

При таком определении сверхпроводящий ток выражается через ψ^* -функцию с помощью обычной формулы Лондона, а скачок теплоемкости, отнесенный к теплоемкости нормальной фазы $C_N = 2\pi^2 \bar{\rho} T_c / 3$, зависит только от параметра ζ

$$\frac{\Delta C}{C_N} = 24 \frac{\left[1 + \frac{\partial \zeta}{\partial (\ln T_c)} \psi' \left(\frac{1}{2} + \zeta \right) \right]^2}{\left[-\psi'' \left(\frac{1}{2} + \zeta \right) - \frac{\zeta}{3} \psi''' \left(\frac{1}{2} + \zeta \right) \right]}. \quad (50)$$

Удается доказать, что для нецелых n_p и n_s , d параметр ζ практически не зависит от температуры, так что правая сторона (50) быстро возрастает с увеличением ζ , достигая десяти уже при $\zeta = 0.4$.

Таким образом, для заданного значения ζ , не зависящего от температуры, существует внутренняя связь между безразмерным скачком теплоемкости (50) и отношением $2\Delta_0/T_c$ (46), которая свойственна изучаемому механизму сверхпроводимости. Эта зависимость изображена на рис. 3 и может быть проверена экспериментально.

Список литературы

- [1] Зайцев Р. О., Иванов В. А. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 8. С. 2554—2557.
- [2] Зайцев Р. О., Иванов В. А. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 10. С. 3111—3119.
- [3] Zaitsev R. O. // Phys. Lett. A. 1988. V. 134. N 3. P. 199—201.
- [4] Emery V. J. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. N 26. P. 2794—2797.
- [5] Зайцев Р. О. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 6. С. 1631—1639.
- [6] Зайцев Р. О. // ЖЭТФ. 1976. Т. 70. № 3. С. 1100—1111.
- [7] Горьков Л. П. // ЖЭТФ. 1958. Т. 34. № 3. С. 735—741.
- [8] Dyson F. // Phys. Rev. 1956. V. 102. P. 1217—1230.
- [9] Fujita T., Aoji Y., Maeno Y. et al. // Jpn. J. Appl. Phys. 1987. V. 26. P. L368—L372.
- [10] Sreedhar K., Ramakrishnan T. V., Rao C. N. R. // Sol. St. Comm. 1987. V. 63. N 9. P. 835—837.
- [11] Subramenian M. A., Torardi C. C., Calabrese J. C. et al. // Science. 1988. V. 239. N 4843. P. 1015—1017.
- [12] Абрикосов А. А., Горьков Л. П. // ЖЭТФ. 1960. Т. 39. С. 1781—1792.

Институт атомной энергии
им. И. В. Курчатова
Москва

Поступило в Редакцию
22 ноября 1988 г.
В окончательной редакции
14 марта 1989 г.