УДК 538.945

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ОКСИДНЫХ СИСТЕМАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С ВЫРОЖДЕННЫМИ 3*d*-ЭЛЕКТРОНАМИ

Р. О. Зайцев, В. А. Иванов, Ю. В. Михайлова

На основе кинематического механизма изучена возможность высокотемпературной сверхпроводимости в сильнокоррелированных системах $2p$- и $3d$-электронов с орбитальным вырождением. Рассчитаны фазовые диаграммы моделей ВТСП оксидов с e_g^2-электронами.

Кинематический механизм сверхпроводимости [1-5] оказалось возможным применить к описанию ряда свойств ВТСП-купратов в сильнокоррелированной модели Эмери—Хирша (см. также [6]). В этой модели электронная структура слоистых купратов формируется в плоскостях CuO_2 из кислородных $2p_{x,\,y}$ и медных невырожденных электронов орбитали $3d\,(x^2-y^2)$, отщепленной тетрагональной компонентой кристаллического поля. Сверхпроводящая фаза, возникающая по механизму [1-5], подчиняется уравнениям Гинзбурга—Ландау [7, 8]. Рассчитанные фазовые диаграммы в модели Эмери—Хирша ВТСП-купратов имеют некоторую предсказательную силу (ср. [9, 10] и [11]).

Представляет интерес исследование сверхпроводимости в моделях оксидов переходных металлов со структурой без сильных тетрагональных искажений. Малая по сравнению с La_2CuO_4 тетрагональная компонента кристаллического поля обусловливает сближение $a=3d\,(x^2-y^2)$ и $b=3d\,(3z^2-r^2)$ орбиталей катиона M^{2+} переходного металла и орбитальному e_g^2 вырождению $3d$-зон в электронной структуре в противоположность существованию орбитально невырожденных $3d$-электронов в известных ВТСП-купратах. Примером таких соединений могут быть как соединения на основе слоистых типа La_2MO_4 со сближенными слоями MO_2, так и соединения на основе кубических перовскитов типа $LaMO_3$.

Отметим, что сверхпроводящая фаза в модели Хаббарда с вырожденными электронами изучалась ранее [12], и оказалось, что она имеет T_c выше, чем в классической орбитально невырожденной модели Хаббарда. Здесь мы покажем, что явный учет $2p$-электронов в сильнокоррелированной системе с e_g^2-электронами позволяет значительно расширить фазовую диаграмму. В разделе 1 предложен гамильтониан задачи. В разделах 2—4 на основе кинематического механизма ВТСП изучена сверхпроводимость в 2- и 3-мерной системах $2p_{x,\,y}$—e_g-электронов.

1. Гамильтониан. Постановка задачи

Рассматриваемыми системами могут быть производные оксида La_2NiO_4, такие как $La_{2-x}M_xNiO_4$ (M — щелочноземельный элемент и др.). В самом деле, отношения c/a в La_2CuO_4 и La_2NiO_4 составляют 3.466 [13] и 3.28 [14], слабо изменяясь с температурой. Из первых исследований [14, 15] магнитных свойств La_2NiO_4 вытекает оценка магнитного момента Ni^{2+}, близкая к $2\mu_B$. Анализ магнитных и резистивных экспериментальных данных по La_2NiO_4 привел Гудинафа [16] к мысли о близости атомных уровней $a=3d\,(x^2-y^2)$ и $b=3d\,(3z^2-\mathbf{r}^2)$ в La_2NiO_4.

Для простоты в настоящей работе рассмотрены модельные соединения с совпадающими энергиями $E_a=E_b=E_d$. Заряд Q комплекса $Ni^{n_d}O_2^{-2+n_p}$ в $La_{2-x}Sr_xNiO_4=La^{3+}_{2-x}Sr^{2+}_x(NiO_2)^Q_2O^{2-}_2$ зависит от легирования x, $Q=2n_p+n_d-4=-2+x$, так что полное число дырочных состояний n_p+n_d меняется от $+2$ при $x=0$ ($n_p=0$, $n_d=2$) до -1 при $x=1$ ($2n_p+n_d=2$). Сильно-коррелированные p, d возбуждения описываются Гамильтонианом

$$H=-t\sum_{\mathbf{r},\,\mathbf{r}',\,\sigma,\,l,\,n}[p^+_{\mathbf{r},\,\sigma}(l)\,d_{\mathbf{r}',\,\sigma}(n)+\mathrm{h.\ c.}]+E_p\sum_{\mathbf{r},\,l,\,\sigma}p^+_{\mathbf{r},\,\sigma}(l)+p_{\mathbf{r},\sigma}(l)+$$
$$+E_d\sum_{\mathbf{r},\,\sigma,\,n}d^+_{\mathbf{r},\,\sigma}(n)\,d_{\mathbf{r},\,\sigma}(n)+I_p\sum_{\mathbf{r}}n^p_{r+}n^p_{\mathbf{r}-}+$$
$$+I_d\sum_{\mathbf{r}}n^d_{\mathbf{r}+}n^d_{\mathbf{r}-}\ (l=x,\ y;\ n=a,\ b),\qquad(1)$$

где t — интеграл перескока электронов между ближайшими ионами: $p^+_{\mathbf{r}\sigma}(l)$, $d^+_{\mathbf{r}\sigma}(n)$ — операторы рождения дырок в замкнутых оболочках $2p^6$ и $3d^{10}$, энергии которых E_p и E_d отсчитываются от уровня Ферми μ; $I_{p,\,d}$ — энергии Хаббарда p-, d-электронов.

Предположение о e_g^2-вырождении подсистемы d-электронов в модели (1) $La_{2-x}M_xNiO_4$ соответствует, по Хунду, высокоспиновому состоянию катиона Ni^{2+} ($3t^6_{2g}e^2_g$) в этом соединении и диэлектризации энергетического спектра в «правеществе» La_2NiO_4 даже при температурах, превышающих температуру Нееля в диэлектрической фазе. Т. е. рассматриваемые Гамильтонианом (1) правещества являются диэлектриками Мотта—Хаббарда с наполовину заполненной орбитально вырожденной e_g-зоной [17].

В простейшем однопетельном приближении [18] спектр одночастичных возбуждений получен из условия обращения в нуль определителя матрицы обратной функции Грина

$$G^{-1}_{j,\ k}(\omega,\ p)=(i\omega+\mu)\,\delta_{jk}-f_{j,\ k}t^{aa'}_p b^a_j b^{a'}_k.\qquad(2)$$

Здесь b_j — генеалогические коэффициенты [17]; j и k нумеруют переходы между основным j и полярным k состояниями; $f_{(j,\ k)}=n_j+n_k$, где $n_{j,\ k}$ — средние числа заполнения j, k состояний.

Согласно Горькову [19], появление сверхпроводимости определяется условием возникновения особенности вершинной части $\Gamma_{\alpha\beta}$ пар α (↑) и β (↓) Ферми-возбуждений с нулевыми суммарными энергией, импульсом и спином

$$\Gamma_{\alpha\beta}=\sum_{\omega,\ \mathbf{p}}g_{\alpha\beta\lambda\nu}(\mathbf{p})\,G^{\lambda\lambda'}_{\omega}(\mathbf{p})\,G^{\nu\nu'}_{-\omega}(-\mathbf{p})\,\Gamma_{\lambda'\nu'}.\qquad(3)$$

2. Сверхпроводимость в модели слоистых оксидов с e_g^2-электронами

В изучаемой ситуации низший основной терм Ni^{2+} — двухчастичный триплетный [17]

$$a^+_\sigma b^+_\sigma|0\rangle=|\sigma\sigma\rangle=|S=1,\ S_z=2\sigma\rangle,\quad\frac{a^+_\sigma b^+_{\bar\sigma}+a^+_{\bar\sigma}b^+_\sigma}{\sqrt2}=|T\rangle=|S=1,\ S_z=0\rangle,\qquad(4)$$

а полярный терм — одночастичный Ni^{3+}. Поэтому d-операторы в сильнокоррелированной модели (1) следует выразить через X-операторы перехода между термами (4) и одночастичными состояниями (0σ), $(\sigma0)$ [17]

$$a^+_\sigma=\frac{\sigma}{\sqrt2}X^{0\bar\sigma\,|\,T}+\sigma X^{0\sigma\,|\,\sigma\sigma},\quad b^+_\sigma=-\frac{\sigma}{\sqrt2}X^{\bar\sigma0\,|\,T}-\sigma X^{\sigma0\,|\,\sigma\sigma}.\qquad(5)$$

Аналогичным образом $p^{+}_{r\sigma}(\cdot) = X^{\sigma l\,|\,0}_{r}$. Тогда обратная функция Грина (2) имеет вид ($I_p = I_d = \infty$)

$$\begin{array}{c} \\ (T\,|\,0-) \\ (++\,|\,0+) \\ (0\,|+l) \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{ccc} (T\,|\,0-) & (++\,|\,0+) & (0\,|+m) \end{array} \\ \begin{pmatrix} \Omega_d & 0 & -\tau_{1m}(\mathbf{p}) \\ 0 & \Omega_d & -\tau_{2m}(\mathbf{p}) \\ -\tau_{l1}(\mathbf{p}) & -\tau_{l2}(\mathbf{p}) & \Omega_p \delta_{lm} \end{pmatrix}, \end{array} \tag{6}$$

где

$$\tau_{1l} = \pm \frac{t}{\sqrt{2}} f_d \left(1 - e^{ip_l}\right), \quad \tau_{2l} = t f_d \left(1 - e^{ip_l}\right),$$

$$\tau_{l1} = \pm \frac{t}{\sqrt{2}} f_p \left(1 - e^{-ip_l}\right), \quad \tau_{l2} = t f_p \left(1 - e^{-ip_l}\right),$$

$$\Omega_d = i\omega - E_d, \; \Omega_p = i\omega - E_p \; (l = x,\ y).$$

Спектр возбуждений получаем из (6) путем аналитического продолжения $i\omega_n = i(2n+1)\pi T \to \omega + i\delta$

$$\xi^{\pm}_{\mathbf{p}} = \pm\sqrt{(r/2)^2 + 6t^2 f_p f_d \left(1 - \varepsilon_{\mathbf{p}}\right)} - \mu. \tag{7}$$

Здесь $r = E_p - E_d$, $\varepsilon_{\mathbf{p}} = (\cos p_x + \cos p_y)/2$, $2\mu = -(E_p + E_d)$.

В случае $2 < n_d < 3.0 < n_p < 1$ факторы $f_d = (6 - n_d)/12$, $f_p = 1 - 3n_p/4$, а числа заполнения $n_{p,\,d}$ определяются условиями самосогласования

$$n_p = f_p \left[3n_F\left(E_p\right) + \sum_{\mathbf{p},\,k=\pm} a^{k}_{\mathbf{p}} n_F\left(\xi^{k}_{\mathbf{p}}\right)\right],$$

$$n_d = 2 + 2f_d \left[n_F\left(E_d\right) + \sum_{\mathbf{p},\,k} a^{-k}_{\mathbf{p}} n_F\left(\xi^{k}_{\mathbf{p}}\right)\right],$$

$$a_{\mathbf{p}} = {}^1\!/_2 \left[1 \pm r\left(r^2 + 24 f_p f_d \left(1 - \varepsilon_{\mathbf{p}}\right)\right)^{-1/2}\right]. \tag{8}$$

Первое из соотношений (8) справедливо при энергии Хаббарда $I_p = \infty$, так что $n_p < 1$. В обратном пределе для $I_p = 0$ (периодическая модель Андерсона [20]) следует положить $f_p = 1.0 < n_p < 4$, что соответствует 4-кратному вырождению невзаимодействующих $p_{x,\,y}$-состояний.

Согласно Ф. Дайсону ([7], [21]), борновская амплитуда рассеяния $g_{\alpha\beta lr}$ в формуле (3) такова, что рассеяние одинаковых по кристаллическому индексу ($l=x$, y или $n=a$, b) разноспиновых частиц может быть описано пятью ненулевыми вершинами. Три d—d-амплитуды рассеяния возбуждений ($T\,|\,0^-$) на ($T\,|\,0+$), ($++\,|\,0+$) на ($T\,|\,0-$), ($T\,|\,0-$) на ($--\,|\,0-$) пропорциональны, а две p—p-амплитуды равны между собой. В результате получаем следующее условие разрешимости системы уравнений (3):

$$Dg \int\limits_0^{t^*} \frac{d\xi}{\xi} \operatorname{th} \frac{\xi}{2T_c} = 0, \tag{9}$$

где

$$D = \sum_{\mathbf{p}} \delta\left(\xi_{\mathbf{p}}\right),$$

$$g = \frac{E_p E_d}{2\mu^2 f_p f_d} \left(\pm \frac{3}{4} f_p E_p - f_d E_d\right). \tag{10}$$

Из последнего условия находим область существования сверхпроводящего состояния в модели (1). Верхний знак соответствует случаю $2 < n_d < 3$, а нижний — нефизической степени окисления никеля, превышающей +1 ($1 < n_d < 2$), ниже не рассматриваемой.

3. Фазовая диаграмма слоистых купратов с e_d^2-электронами

Из системы уравнений (10) и (9) следует, что при $r > 0$ в области

$$30/13 < n_d < 18/7,\ 0 < n_p < 4\,(13 - 18n_d)/(78 - 25n_d) \tag{11}$$

сверхпроводимость осуществляется во всей ξ_p^--зоне. При заполнении ξ_p^+-подзоны и $r > 0$ имеем узкую область по n_p

$$12/13 < n_p < 28/29,\ 6\,(28 - 25n_d)/(44 - 37n_p) < n_d < 3, \tag{12}$$

где сверхпроводимость существует во всей ξ_p^+-зоне. В области (11) амплитуда d—d-рассеяния отрицательна и при $r > 0$ ξ_p^--зона заполняется в основном e_g-возбуждениями так, что p-возбуждения не влияют на образование сверхпроводящего конденсата. В области (12) при $r > 0$ отрицательна амплитуда p—p-рассеяния и ξ_p^+-зона заполняется в основном p-возбуждениями, определяющими сверхпроводимость.

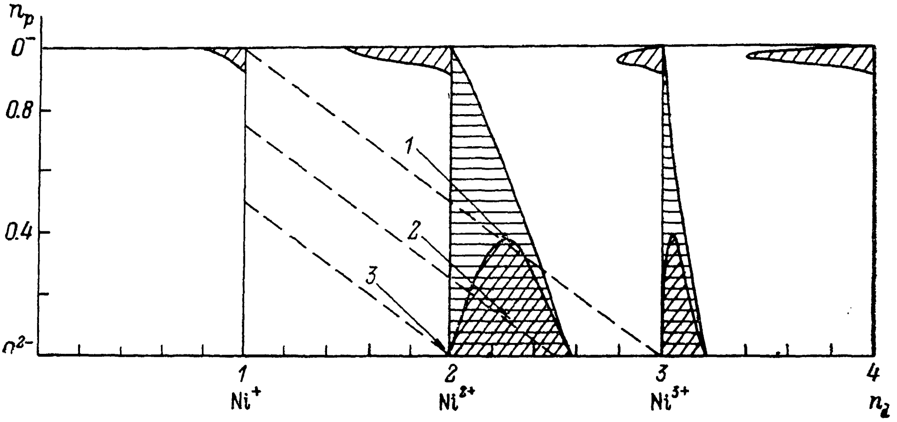

Рис. 1. Фазовая диаграмма слоистых оксидов $LaSrNiO_4$ (*1*), $La_{1.5}Sr_{0.5}NiO_4$ (*2*), La_2NiO_4 (*3*) с e_g^2-электронами, рассчитанная по кинематическому механизму для прямоугольной плотности состояний.

Сверхпроводящие области выделены косой штриховкой для энергий Хаббарда $I_d = I_p = \infty$ и горизонтальной штриховкой — для периодической модели Андерсона $I_d = \infty$, $I_p = 0$.

Напротив, при $r < 0$ ξ_p^-(ξ_p^+)-зона заполняется p (e_g)-возбуждениями, что приводит к разрушающему сверхпроводимость кинематическому отталкиванию. При этом для $2 < n_d < 30/13$ и $28/29 < n_p < 1$ область сверхпроводящей фазы сужается вследствие усиления отталкивательной роли p- и e_g-возбуждений.

Рассмотрим сверхпроводимость в периодической модели Андерсона: $I_p = 0$ и $I_d = \infty$ в (1). В ней рассеяния некоррелированных p-возбуждений нет, а условие (10) принимает вид

$$E_d > 0. \tag{13}$$

Область сверхпроводимости расширяется вследствие требования $f_p = 1$ и существует во всей нижней подзоне

$$2 < n_d < 18/7,\ 0 < n_p < (18 - 7n_d)/(6 - n_d). \tag{14}$$

В верхней подзоне сверхпроводимость отсутствует, так как при $n_p \sim 1$ она возникает только по причине кинематического притяжения p-возбуждений. Соответствующая фазовая диаграмма представлена на рис 1. Она рассчитана для прямоугольной плотности состояний $D_0(E) = 1/2\ \vartheta(1 - E^2)$, характерной для рассмотренного случая двумерной решетки

Вышеприведенные неравенства выявляют зависимость кинематического спаривания от спинового состояния никеля в $La_{2-x}Sr_xNiO_4$ в противоположность бесспиновому электрон-фононному механизму. Для низкоспинового состояния оболочка $3d^8$ почти заполнена и сверхпроводимости нет. В высокоспиновой конфигурации никеля коллективизированная зона расщепляется на связывающую и антисвязывающую. Для большого числа возбуждений можно ожидать появления сверхпроводимости, соответствующей спариванию дырочных $0 < n_p < 4/7$ и электронных $2 < n_d < 16/7$ $(0 < n_d^* = -2 < 4/7)$ возбуждений. Соответствующая обратная масса задана общим соотношением

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}} = \frac{d}{2D\,|\mu|} \sum_{\mathbf{p}} \delta(\xi_{\mathbf{p}}) \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial p(\alpha)} \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial p_\beta} \quad (d = 2,\ 3)$$

в нижней $\xi_{\bar{\mathbf{p}}}$-зоне.

4. Сверхпроводимость в моделях оксидов переходных металлов со структурой кубического перовскита

Рассмотрим соединения типа (А, В)CuO_3 со структурой кубического перовскиата: катионы меди центрированы в вершинах куба, анионы кислорода расположены в серединах ребер. Заряд $Q = -5 + 3n_p + n_l$ комплекса $Cu^{1+n_d}O_3^{-2+n_p}$ меняется от -5 до $+2$ $(n_p = 1,\ n_d = 4)$. Поскольку p_k-электроны туннелируют в $k = x$, y направлениях, обратная виртуальная функция Грина имеет лишний по сравнению со слоистыми купратами ряд, соответствующий вырождению a и b состояний

$$\begin{array}{c} \\ (0a) \\ (0b) \\ (0p_k) \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} (0a) & (0b) & (0p_l) \end{array} \\ \begin{pmatrix} \Omega_d & 0 & \tau_{1l}(\mathbf{p}) \\ 0 & \Omega_d & \tau_{2l}(\mathbf{p}) \\ \tau_{k1}(\mathbf{d}) & \tau_{k2}(\mathbf{d}) & \Omega_p \delta_{kl} \end{pmatrix} \end{array}. \tag{15}$$

При бесконечной энергии Хаббарда в области $0 < n_d < 1$ получаем, учитывая переходы только между основным и пустым состояниями, уравнение для химпотенциала

$$n_p = \frac{2}{3} f_p \left[7n_F(E_p) + T \sum_{\alpha,\,\mathbf{p}} e^{i\omega\beta} \frac{2\Omega_p \Omega_d^2}{\det_\omega(\mathbf{p})} \right], \quad (f_p = 1 - 5n_p 16), \tag{16}$$

где определитель матрицы (15) равен

$$\det_\omega(\mathbf{p}) = \left[\Omega_p^2 \Omega_d^2 - 4 f_p f_d \Omega_p \Omega_d t^2 \sum_k \sin^2 \frac{p_k}{2} + 12 t^4 \times \right.$$
$$\left. \times \sum_{ik}' \sin^2 \frac{p_i}{2} \sin^2 \frac{p_k}{2} \right]. \tag{17}$$

Из условия $\det_\omega(\mathbf{p}) = 0$ находим одночастичные энергии, формирующие четыре гибридизованные зоны

$$\xi_{\mathbf{p}} = \pm \left\{ \left(\frac{r}{2}\right)^4 + 2t^2 f_p f_d \left[\sum_k \sin^2 p_k \pm \right.\right.$$
$$\left.\left. \pm \left(\sum_k \sin^4 p_k - \sum_{i,\,k}' \sin^2 p_i \sin^2 p_k \right)^{1/2} \right] \right\}^{1/2} - \mu \quad (0 < n_d < 1).$$

Как и в разделе 2, получаем число e_g-состояний

$$n_d = 4 f_d T \sum_{\omega,\,\mathbf{p}} \frac{\Omega_d \Omega_p^2}{\det_\omega(\mathbf{p})} e^{i\omega\delta}. \tag{18}$$

В области $1 < n_l < 2$, когда $f_d = (2 + n_d)/12$, соотношение (18) принимает вид

$$n_d = 1 + 3T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \frac{\Omega_d \Omega_p^2}{\det_\omega(\mathbf{p})} e^{i\omega\delta}, \tag{19}$$

где

$$\det_\omega(\mathbf{p}) = \Omega_p^2 \Omega_d^2 - 6t^2 f_d f_p \Omega_d \Omega_p \sum_k \sin^2 \frac{p_k}{2} + $$
$$+ 27t^4 f_p^2 f_d^2 \sum_{ik}' \sin^2 \frac{p_k}{2} \sin^2 \frac{p_i}{2}. \tag{20}$$

Во всей области чисел недозаполнения $3d^{10}$-оболочки $0 < n_d < 2$ сверхпроводимость осуществляется только при $n_p \sim 1$.

Пренебрегая кубической анизотропией в (17), (20), т. е игнорируя

$$\sum_{i, k}' \sin^2 \frac{p_i}{2} \sin^2 \frac{p}{2},$$

находим, что сверхпроводимость возникает при заполнении верхней подзоны

$$\xi_{\mathbf{p}}^+ = \sqrt{\left(\frac{r}{2}\right)^2 + 6t^2 f_p f_d (1 - \varepsilon)} - \mu \quad \left(\varepsilon = \frac{1}{3} \sum_\lambda \cos p_\lambda\right), \tag{21}$$

т. е. в области

$$\begin{gathered} 3(44 - 37n_d)/(2(64 - 53n_d)) < n_d < 1, \ 4/5 < n_d < 1, \\ 3(38 - 5n_d)/(8(13 - n_d)) < n_p < 1, \ 10/7 < n_d < 2. \end{gathered} \tag{22}$$

Последняя область соответствует заполнению верхней подзоны при $1 < n_d < 2$, и в (21) следует $6t^2$ заменить на $9t^2$.

В области $2 < n_d < 3$ в (A, B)CuO_3 состояния ионов меди резонируют между двух- и трехчастичными термами и $f_d = (6 - n_d)/12$, $f_p = 1 - 5n_p/6$. В пренебрежении кубической анизотропией получаем

$$n_p = \frac{2}{3} f_p \left[7n_F(E_p) + 2 \sum_{\mathbf{p}, k=\pm} a_{\mathbf{p}}^k n_F(\xi_{\mathbf{p}}^k)\right],$$

$$n_d = 2 + 2f_d \left[n_F(E_d) + \sum_{\mathbf{p}, k} a_{\mathbf{p}}^{-k} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^k)\right], \tag{23}$$

$$\xi_{\mathbf{p}}^k = \pm \sqrt{(r/2)^2 + 9f_p f_d (1 - \varepsilon)} - \mu. \tag{24}$$

Здесь условие существования сверхпроводящей неустойчивости ограничивается неравенством

$${}^9/_8 E_p f_p - E_d f_d > 0. \tag{25}$$

В случае $r > 0$ сверхпроводимость существует как в нижней, так и верхней подзонах (24),

$$\begin{gathered} 1 < n_p < 12(18 - 7n_d)/(234 - 79n_d), \ 30/13 < n_d < 18/7, \\ (270 - 252n_p)/(69 - 62n_p) < n_d < 3, \ 21/22 < n_p < 48/49. \end{gathered} \tag{26}$$

Если же $r < 0$, то область сверхпроводимости ограничивается условием (25): бо́льшими значениями n_p для нижней зоны, меньшими значениями n_d для верхней зоны

$$2 < n_d < 30/13, \ 48/49 < n_p < 1. \tag{27}$$

В предельном случае периодической модели Андерсона ($I_p = 0$, $I_d = \infty$) из-за отсутствия p—p-взаимодействия ($f_p = 1$) сверхпроводимость осуществляется во всей $\xi_{\mathbf{p}}^-$-зоне

$$0 < n_p < 4(18 - 7n_d)/(3(6 - n_d)), \ 2 < n_d < 18/7. \tag{28}$$

В области $3 < n_d < 4$ система резонирует между пустым и одночастичными d-состояниями и $f_d = (3n_d - 8)/4$, $f_p = 1 - 5n_p/6$. В случае малой кубической анизотропии

$$n_d = 3 + \frac{f_d}{2}\left[n_F(E_d) + \sum_{\mathrm{p},k} a_{\mathrm{p}}^{-k} n_F(\xi_{\mathrm{p}}^k)\right],$$

$$n_p = \frac{2}{3} f_p \left[7n_F(E_p) + 2\sum_{\mathrm{p},k} a_{\mathrm{p}}^{k} n_F(\xi_{\mathrm{p}}^k)\right], \tag{29}$$

$$\xi_{\mathrm{p}}^{\pm} = \pm\sqrt{\left(\frac{r}{2}\right)^2 + 6t^2 f_p f_d (1-\varepsilon)} - \mu,$$

$$a_{\mathrm{p}}^{\mp} = \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{r}{2}\left(\left(\frac{r}{2}\right)^2 + 6t^2 f_p f_d (1-\varepsilon)\right)^{-1/2}\right). \tag{30}$$

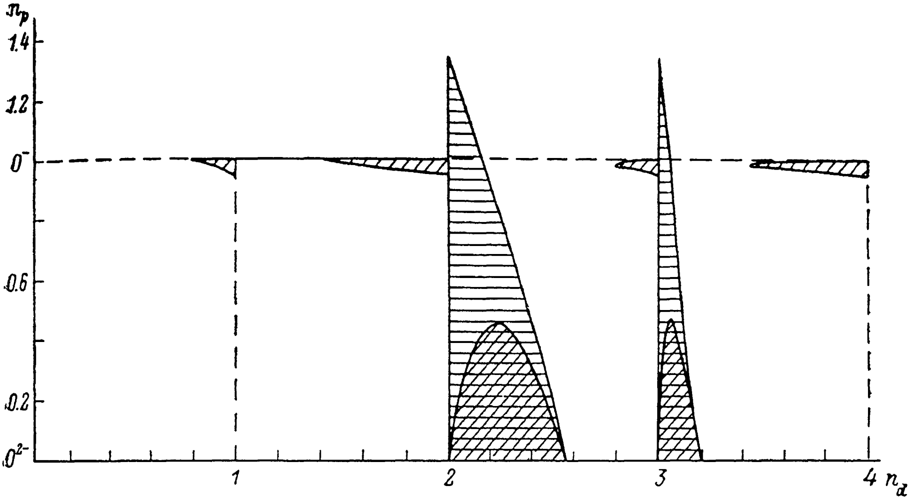

Рис. 2. Фазовая диаграмма оксидов переходных металлов с кристаллической структурой кубического перовскита, рассчитанная по кинематическому механизму ВТСП для полуэллиптической плотности состояний.

Сверхпроводящие области выделены штриховкой, как и на рис. 1.

В данной области сверхпроводимость определяется условием

$$g = \frac{E_p E_d}{2\mu^2 f_p f_d}\left(\frac{1}{2}E_p f_p - \frac{1}{3}E_d f_d\right) > 0. \tag{31}$$

Как и выше, при $r > 0$ кинематическое спаривание происходит и в нижней, и в верхних зонах (30),

$$0 < n_p < 12(16 - 5n_d)/(88 - 23n_d),\quad 40/13 < n_d < 16/5, \tag{32}$$

$$(136n_p - 120)/(56n_p - 51) < n_d < 4, 21/22 < n_p < 48/49. \tag{33}$$

Если же $3 < n_d < 40/13$ или $48/49 < n_p < 1$, что соответствует $r < 0$, то, согласно ограничению (31), нарастающее число p- или d-возбуждений с кинематическим отталкиванием уничтожает сверхпроводимость. В таком случае не удается получить аналитических выражений для областей и требуются машинные вычисления.

Рассуждения этого раздела подытоживает фазовая диаграмма (рис. 2). Она рассчитана для модели кубических оксидов переходных металлов с $0 < n_p < 1$ и $0 < n_d < 4$ и построена для полуэллиптической плотности состояний $D_0(E) = 2/\pi\sqrt{1-E^2}$, характерной для рассмотренного случая трехмерной решетки.

В периодической модели Андерсона ($I_p=0$, $I_d=\infty$) при значениях $3<n_d<4$ получаем следующее условие на сверхпроводящую фазу:

$$0<n_p<4\,(16-5n_d)/(3\,(3n_d-8)), \quad 3<n_d<16/5. \tag{34}$$

В области $n_d>16/5$ и $n_p\sim 1$ амплитуда d—d-рассеяния положительна, соответствуя отталкиванию, и сверхпроводимость отсутствует.

Таким образом, в рамках кинематического механизма ВТСП [1] удается рассчитать сверхпроводимость в моделях оксидов переходных металлов с орбитально вырожденными $3d$-электронами, примерами которых могут быть никелаты $La_{2-x}M_xNiO_4$ и другие соединения переходных металлов со структурой слоистого перовскита (рис. 1), а также оксиды типа $La_{1-x}M_xCuO_3$, сохранившие при легировании кристаллическую структуру кубического перовскита (рис. 2). О возможной сверхпроводимости в системах $La_{2-x}M_xNiO_4$ сообщалось в работах [22, 23] (M=Sr) и [24] (M=Na).

Список литературы

[1] Зайцев Р. О., Иванов В. А. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 8. С. 2554—2557; Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. Приложение. С. 140—143.
[2] Takahashi Y. // Physica B. 1988. V. 149. N 3. P. 69—73.
[3] Zielinskej J., Matlak M., Entel R. // Phys. Lett. 1989. V. 136. N 7—8. P. 441—445.
[4] Hirsch J. E., Marsiglio F. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. N 16. P. 11515—11525; Physica C. 1989. V. 162—164. P. 87—90.
[5] Bogolubov N. N., Aksenov V. L., Plakida N. M. // Physica C. 1988. V. 153—155. P. 96—99.
[6] Gaididei Yu. B., Loktev V. M. Preprint ITP-87-147E. Kiev, 1987. 21p. // Phys. St. Sol. (b). 1988. V. 147. N 3. P. 307—320.
[7] Зайцев Р. О., Иванов В. А., Михайлова Ю. В. // Препринт ИАЭ-4556/9. М., 1988. 36 с.
[8] Зайцев Р. О. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 6. С. 1631—1638.
[9] Зайцев Р. О., Иванов В. А., Михайлова Ю. В. Сверхпроводимость: Физика. Химия. Техника. В. 3 / Под ред. В. И. Ожогина. М., 1988. С. 103—108.
[10] Zaitsev R. O. // Intern. J. Modern Phys. B. 1988. V. 2. N 5. P. 689—698.
[11] Зайцев Р. О., Иванов В. А., Михайлова Ю. В. // Препринт ИАЭ-4800/9. М., 1989. 36 с.
[12] Zaitsev R. O., Ivanov V. A. // Physica C. 1988. V. 153—155. P. 1295—1296.
[13] Kenjo T., Yajima S. // Bull. Chem. Soc. Jpn. 1977. V. 50. N 11. P. 2847—2856.
[14] Смоленский Г. А., Юдин В. М., Шер Е. С. // ФТТ. 1962. Т. 4. № 11. С. 3350—3356.
[15] Ganguly P., Sheelavathi Kollali, Rao C. N. R. // Magnetism Letters. 1980. V. 1. P. 107—115.
[16] Goodenough J. B., Ramaseska S. // Mater. Res. Bull. 1982. V. 17. N 3. P. 383—390.
[17] Зайцев Р. О., Иванов В. А. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 12. С. 3561—3570.
[18] Hubbard J. // Proc. Roy. Soc. A. 1964. V. 281. N 1386. P. 401—413.
[19] Горьков Л. П. // ЖЭТФ. 1958. Т. 35. № 2. С. 735—745.
[20] Newns D. M., Rasolt M., Pattnaik P. C. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 10. P. 6513—6520.
[21] Dyson F. // Phys. Rev. 1956. V. 102. N 1. P. 1217—1253.
[22] Spalek J., Kakol Z., Honig J. M. // J. Sol. St. Chem. 1989. V. 79. N 2. P. 288—293.
[23] Rao C. N. R., Ganguli A. K., Nagarajan R. // Physica C. 1989. V. 162—164. P. 284—285.
[24] Михайлов И. Г., Морозовский А. Е., Пан В. М. и др. // Тр. II Всес. конф. по ВТСП. Киев, 1989. Т. I. С. 270—271.

Институт атомной энергии им. И. В. Курчатова
Москва
Институт общей и неорганической химии
им. Н. С. Курнакова АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
16 октября 1989 г.