

УДК 538.945

© 1991

ОБ ЭЛЕКТРОН-ДЫРОЧНОЙ АСИММЕТРИИ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ СОЕДИНЕНИЙ $\text{Ln}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$

Р. О. Зайцев

Изучается возможность нефононного спаривания гибридных p - d -дырок в условиях сильного короткодействующего отталкивания Хаббарда. Установлена область существования сверхпроводящего состояния в зависимости от степени недо-заполнения $2p^6$ - и $3d^{10}$ -оболочек для плоских комплексов CuO_2 . Выясняются причины возникновения d -электрон-дырочной асимметрии фазовой диаграммы при малом числе p -состояний.

Одной из особенностей ВТСП-соединений является резкая зависимость температуры сверхпроводящего перехода T_c от концентрации допанта x , с которой связано существование точки исчезновения сверхпроводимости. Объяснение этих особенностей удается получить уже в классической модели Хаббарда [1] — возникновение сверхпроводимости определяется наличием отрицательной амплитуды рассеяния сразу на всей поверхности Ферми. Исчезновение сверхпроводимости точно соответствует изменению знака амплитуды рассеяния. В простейшем варианте [2] критическое значение x_c оказалось одинаковым как для дырочного x_{2c} , так и для электронного x_{4c} типа носителей $x_{2c} = x_{4c} = 1/3$. Для объяснения наблюдаемого различия $x_{2c} \approx 0.35$ [3], $x_{4c} < 0.2$ [4] потребовалось обобщение элементарной модели Хаббарда с учетом перескока w между кислородом и медью [5], а также различия перескока в дырочной ($n_d > 1$) и электронной ($n_d < 1$) частях фазовой диаграммы [6]. Изучение модели Эмери [5] показало, что для малого числа кислородных p -дырок (n_p) в переменных n_p и n_d фазовая диаграмма оказывается максимально асимметричной [7], так как $x_{4c} = 0$. В этой модели ВТСП существует в слишком широкой дырочной части фазовой диаграммы, в то время как для электронной части $n_d < 1$ сверхпроводимость может существовать только за счет p -дырочного спаривания $n_p \approx 1$.

Будет рассмотрена модель, которая учитывает конечные вероятности w_p^2 и w_d^2 для p - и d -дырочных перескоков наряду с большой вероятностью w^2 перескока между кислородом и медью

$$\begin{aligned} \hat{H}_t = t \sum_{r, r', \sigma, \lambda} \{ w (\hat{p}_{r\sigma}^+(\lambda) \hat{d}_{r'\sigma} + \text{h. c.}) + w_p \hat{p}_{r\sigma}^+(\lambda) \hat{p}_{r'\sigma}(\lambda) \} + t \sum_{r, r', \sigma} w_d \hat{d}_{r\sigma}^+ \hat{d}_{r'\sigma} + \\ + \varepsilon_p \sum_{r, \lambda} \hat{n}_r(\lambda) + \varepsilon_d \sum_r \hat{n}_r. \end{aligned} \quad (1a)$$

Здесь \hat{p}^+ , \hat{d}^+ , \hat{p} , \hat{d} — операторы рождения и уничтожения p - и d -дырочных состояний; $\hat{n}_r(\lambda) = \sum_{\sigma} \hat{p}_{r\sigma}^+(\lambda) \hat{p}_{r\sigma}(\lambda)$, $\hat{n}_r = \sum_{\sigma} \hat{d}_{r\sigma}^+ \hat{d}_{r\sigma}$ — операторы плотности дырок в $2p^6$ - и $3d^{10}$ -оболочке O^{2-} и Cu^+ . Будем считать, что вероятность p - d перескока не превышает вероятности p - p и d - d перескока, а энергия Хаббарда d -электронов есть самый большой энергетический параметр $U_d = \infty$. По оценке Эмери [5], величина прямого кулоновского взаимодействия на соседних узлах имеет тот же порядок, что и энергия

перескока $w \approx 1.3 \pm 1.5$ эВ, в то время как энергия обменного взаимодействия значительно меньше. Таким образом, возникает необходимость учета прямого, кулоновского взаимодействия

$$\hat{V} = \sum_{\lambda, \mathbf{r}, \mathbf{r}'} V_{\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{n}_{\mathbf{r}}(\lambda) \hat{n}_{\mathbf{r}'}. \quad (16)$$

Что касается энергии Хаббарда p -электронов U_p , то ниже рассмотрены два предельных случая $U_p=0$ и $U_p=\infty$.

Два последних слагаемых в гамильтониане (1а) соответствуют различным энергиям ϵ_p и ϵ_d одной дырки, которые выражаются через химпотенциал $\mu = -(\epsilon_p + \epsilon_d)/2$ и энергетический сдвиг $r = \epsilon_p - \epsilon_d$. В настоящей работе не ставится задачи вычисления величины r , она считается заданным параметром, меняя который можно фиксировать средние числа дырок n_p и n_d в замкнутых оболочках меди и кислорода. В этих переменных построена фазовая диаграмма. Концентрация двухвалентного x_2 и четырехвалентного x_4 катиона связана со средними числами заполнения через соотношение электронейтральности

$$Q = 2n_p + n_d - 3, \quad (2)$$

где Q — заряд комплекса CuO_2 , который определяется через x_2 или x_4 : $Q = -2 + x_2$ или $Q = -2 - x_4$.

В разделе 1 получены общие соотношения, связывающие n_p, n_d с химпотенциалом и энергетическим сдвигом r . Учет сильного электрон-электронного отталкивания в одном и том же узле уже в нулевом приближении позволяет сделать и следующий шаг: получить уравнение для нахождения амплитуды двухчастичного рассеяния, а затем определить условные изменения ее знака на поверхности Ферми. Это условие и определяет уравнение обращения в нуль эффективной константы БКШ $\lambda(\epsilon_p, \epsilon_d, n_p, n_d) = 0$. Полученное уравнение позволяет исключить из уравнений состояния переменные ϵ_p и ϵ_d и найти кривую $\Phi(n_p, n_d) = 0$, ограничивающую область существования сверхпроводящей фазы на плоскости n_p, n_d . Точки пересечения линии электронейтральности (2) с фазовой кривой позволяют оценить критические замечания x_c . В разделе 2 произведен расчет фазовой диаграммы для случая не взаимодействующих p -дырок, но бесконечной энергии Хаббарда для d -электронов. Все три интеграла перескока считаются пропорциональными одной и той же величине t_p , для которой задана функция плотности состояний $\rho_0(\epsilon) = \sum_p \delta(\epsilon - t_p)$. Численные расчеты удается произвести для трех предельных случаев: а) $w_p = w_d = w$ изотропная модель; б) $w_d = 0, w = 2w_p$; в) $w_p = w_d = 0$, модель Эмери. На этих примерах произведен анализ внутренних причин электрон-дырочной d -асимметрии фазовой диаграммы при заданном конечном числе p -возбуждений ($0 < n_p < 1$).

В разделе 3 изучается другой предел, когда энергия Хаббарда велика как для d -, так и для p -электронов, но по-прежнему без прямого кулоновского взаимодействия (16). Здесь показано, что сильное отталкивание p -дырок в газовой фазе ($n_p < 4/7$) заметно уменьшает сверхпроводящую область при любом конечном U_p по сравнению со случаем $U_p = 0$.

В Приложении изучается влияние прямого кулоновского взаимодействия. Удастся показать, что при нулевой энергии Хаббарда для p -электронов роль (16) сводится к простому уменьшению эффективной константы БКШ. Если же считать $U_p = U_d = +\infty$, тогда возникает сильный нелинейный эффект перемешивания кулоновского и кинематического взаимодействия, который сам по себе является источником d -асимметрии фазовой диаграммы. В заключение показано, что выводы настоящей работы качественно согласуются с экспериментом.

Как впервые отмечено в работе Эмери [5], основную роль в формировании спектра элементарных возбуждений комплекса CuO_2 играют матричные элементы перескока между медью и кислородом w . Матричные элементы, пропорциональные w_p и w_d , меньше и имеют весьма сложную угловую зависимость. По этой последней причине для упрощения вычислений и в дополнение к модели Эмери будут учтены только диагональные p - p - и d - d -матричные элементы, которые вместе с $\tau_{p,d}$ считаем пропорциональными одной и той же безразмерной функции t_p .

С учетом этих упрощений запишем обратную одночастичную функцию Грина, которая в нулевом приближении самосогласованного поля и при $U_d = \infty$ имеет следующий вид:

$$G_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{matrix} (0, +) & (a, x) & (b, y) \\ (0, +) & \left(\begin{matrix} \Omega_d(\mathbf{p}), & -\tau_x(\mathbf{p}), & -\tau_y(\mathbf{p}) \\ -\tau_x(\mathbf{p}), & \Omega_p(\mathbf{p}), & 0 \\ -\tau_y(\mathbf{p}), & 0, & \Omega_p(\mathbf{p}) \end{matrix} \right) \end{matrix}. \quad (3)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \tau^x(\mathbf{p}) = \tau^y(\mathbf{p}) &= w f_d t_p / \sqrt{2}, \quad \tau_x(\mathbf{p}) = \tau_y(\mathbf{p}) = w f_p t_p / \sqrt{2}, \quad \Omega_d(\mathbf{p}) = i\omega - w_d f_d t_p - \varepsilon_d, \\ \Omega_p(\mathbf{p}) &= i\omega - w_p f_p t_p - \varepsilon_p. \end{aligned} \quad (4)$$

Факторы f_p, f_d — так называемые концевые множители, которые учитывают конечную энергию Хаббарда в нулевом приближении самосогласованного поля.

В первом предельном случае $U_d = \infty, U_p = 0, f_p = 1, f_d = 1 - n_d/2$ для нижней зоны Хаббарда, когда $n_d < 1$. Во втором предельном случае $U_d = \infty, U_p = \infty, f_p = 1 - 3n_p/4, f_d = 1 - n_d/2$ для нижней зоны Хаббарда как для p -, так и для d -дырок. Чтобы перейти в верхнюю зону Хаббарда $n_d > 1$, во всех соотношениях (3), (4) достаточно произвести замену $f_d \rightarrow f_d = n_d/2, \varepsilon_d \rightarrow \varepsilon_d = \varepsilon_d + U_d$. Наряду с двумя неколлективизированными p_x, p_y -ветвями одночастичная функция Грина (3) дает еще три ветви

$$\xi_p^{(\pm)} = \frac{\xi_p^{(p)} + \xi_p^{(d)}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\xi_p^{(p)} + \xi_p^{(d)}}{2}\right)^2 + w^2 f_p f_d t_p^2}, \quad E_p = \xi_p^{(p)} = w_p f_p t_p + \varepsilon_p, \quad (5)$$

где $\xi_p^{(d)} = w_d f_d t_p + \varepsilon_d$. Средние числа заполнения n_p и n_d выражаются через диагональные матричные элементы

$$\begin{aligned} G_{dd} &= \sum_{\alpha=\pm} a_p^{(-\alpha)} [i\omega - \xi_p^{(\alpha)}]^{-1}, \quad a_p^{(\pm)} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\xi_p^{(p)} - \xi_p^{(d)}}{\sqrt{(\xi_p^{(p)} - \xi_p^{(d)})^2 + 4w^2 f_p f_d t_p^2}} \right], \\ G_{xx} = G_{yy} &= \frac{1}{2} (i\omega - \xi_p^{(p)})^{-1} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=\pm} a_p^{(\alpha)} [i\omega - \xi_p^{(\alpha)}]^{-1}. \end{aligned} \quad (6)$$

Используя (6), находим уравнения состояния

$$\begin{aligned} n_p &= f_p \left[2n_F(\varepsilon_p) + \sum_p n_F(\xi_p^{(p)}) + \sum_{p, \alpha=\pm} a_p^{(\alpha)} n_F(\xi_p^{(\alpha)}) \right], \\ n_d &= 2f_d \sum_{p, \alpha=\pm} a_p^{(-\alpha)} n_F(\xi_p^{(\alpha)}), \quad 0 < n_d < 1, \quad f_d = 1 - \frac{n_d}{2}, \\ n_d &= 1 + f_d \sum_{p, \alpha=\pm} a_p^{(-\alpha)} n_F(\xi_p^{(\alpha)}), \quad 1 < n_d < 2, \quad f_d = \frac{n_d}{2}. \end{aligned} \quad (7)$$

В условиях $\omega^2 > w_p w_d$ заданному значению химпотенциала $\mu = -(\epsilon_p + \epsilon_d)/2$ могут соответствовать два значения t_p , для которых энергия возбуждений $\xi^{(+)}$ или $\xi^{(-)}$ соответствует уровню Ферми.

При больших значениях сдвига $r = \epsilon_p - \epsilon_d$ наимизшей оказывается подзона $\xi_p^{(-)}$ с энергией порядка ϵ_d . С уменьшением сдвига r происходит перекрытие $\xi_p^{(-)}$ - и $\xi^{(p)}$ -подзон. При дальнейшем сближении уровней ϵ_p и ϵ_d точка максимума $\xi_p^{(-)}$ проходит через значение $t_p = +1$ и на поверхности Ферми возникает второй тип возбуждений с большим значением t_p .

Предположим, что затравочная плотность состояний $\rho_0(\epsilon)$ нигде не обращается в бесконечность. Тогда для выявления куперовской неустойчивости достаточно исследовать однородную систему уравнения для двух частичной вершинной части $\Gamma_{\alpha\beta}$, записанную в лестничном приближении [2]

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

Здесь $G_{\omega}^{\alpha\beta}(\mathbf{p})$ — компоненты одночастичной функции Грина (3).

В настоящей работе не ставится задачи о нахождении температуры сверхпроводящего перехода с предэкспоненциальной точностью — нас интересует только условие появления сверхпроводящего конденсата на линии фазового перехода при $T=0$. Для решения этой более простой задачи в качестве неприводимой вершинной части $g_{\alpha\beta\lambda}$ можно использовать борновскую амплитуду двучастичного рассеяния. В отсутствие прямого кулоновского взаимодействия (рассмотрение которого отнесено в Приложение) сильная корреляция d -электронных состояний при $U_d = +\infty$, а также при $U_p \neq 0$ приводит к рассеянию $d-d$ - и $p-p$ -типа, которое в борновском приближении определяется двойными перестановочными соотношениями с гамильтонном \hat{H}

$$\{X_r^{\sigma\bar{\sigma}}, [X_r^{\sigma\bar{\sigma}}, \hat{H}]\}, \quad \{X_r^{\lambda\sigma}, [X_r^{\lambda\sigma}, \hat{H}]\}, \quad \sigma = \pm 1, \quad \bar{\sigma} = -\sigma, \quad \lambda = x, y.$$

В результате простых алгебраических преобразований с использованием уравнения Дайсона получаем следующее уравнение разрешимости (см. работу автора [8], посвященную модели Эмери, а также Приложение к настоящей статье):

$$2T \sum_{\omega, \mathbf{p}, \lambda} [\pm G_{\lambda\lambda}^{(0)}]^{-1} f_{\lambda}^{-1} G_{\omega}^{\lambda\lambda}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{\lambda\lambda}(-\mathbf{p}) = -1. \quad (8b)$$

Здесь λ — индексы тех диагональных атомных состояний, для которых энергия Хаббарда равна ∞ ; $[G_{\lambda\lambda}^{(0)}]^{-1}$ — атомная обратная функция Грина, вычисленная при нулевых интегралах перескока и взятая при $i\omega=0$; верхний знак относится к верхней, а нижний знак — к нижней зоне Хаббарда.

В простейшем случае $U_p=0$ достаточно использовать диагональную функцию $G_{d\bar{d}}$, вычисленную в (6). Учитывая, что в условиях $\omega^2 > w_p w_d$ энергии возбуждений $\xi^{(\pm)}$ разделены гибридационной щелью, видим, что сингулярные слагаемые в (8) происходят только от одной зоны, через которую проходит уровень Ферми. Так, при заполнении $\xi^{(-)}$ -подзоны вместо (8) получаем

$$1 = \pm \frac{e_d}{f_d} \sum_{\mathbf{p}} (a_{\mathbf{p}}^{(+)})^2 (\xi_{\mathbf{p}}^{(-)})^{-1} \text{th} \left(\frac{\xi_{\mathbf{p}}^{(-)}}{2T} \right) \approx \pm \frac{2e_d}{f_d} \sum_{\mathbf{p}} (a_{\mathbf{p}}^{(+)})^2 \delta(\xi_{\mathbf{p}}^{(-)}) \int_0^{+\infty} \frac{d\xi}{\xi} \text{th} \left(\frac{\xi}{2T} \right).$$

Отсюда находим константу БКШ

$$\lambda_{(-)} = \pm \frac{2e_d}{f_d} \sum_{\mathbf{p}} (a_{\mathbf{p}}^{(+)})^2 \delta(\xi_{\mathbf{p}}^{(-)}). \quad (9)$$

Таким образом, условие появления сверхпроводимости имеет вид $\epsilon_d > 0$ для верхней и $\epsilon_d < 0$ для нижней хаббардовской зоны. В более сложном

случае $U_p = \infty$ в условии (8) необходимо включить слагаемые, отвечающие p - p -рассеянию. Учитывая возможность перекрытия $\xi_p^{(-)}$ - и ε_p -подзон, находим с помощью (6) и (8) следующую эффективную константу:

$$\lambda = \sum_p \left[\pm \frac{2\varepsilon_d}{f_d} (a_p^{(+)})^2 - \frac{\varepsilon_p}{f_p} (a_p^{(-)})^2 \right] \delta(\xi_p^{(-)}) - \frac{\varepsilon_p}{f_p} \sum_p \delta(\xi_p^{(p)}). \quad (10)$$

Коэффициенты $a_p^{(\pm)}$ определены в (6), однако в (10) их надлежит вычислять на поверхности Ферми $\xi_p^{(-)} = 0$. Это обстоятельство позволяет выразить эффективную константу в виде суммы произведений плотности состояний на энергетические множители

$$\lambda = g_{(-)}\rho_- + g_p\rho_p. \quad (11)$$

Здесь

$$\rho_\alpha = \sum_p \delta(\xi_p^{(\alpha)}), \quad g_p = -\varepsilon_p/f_p.$$

Для вычисления $g_{(-)}$ необходимо записать уравнение Ферми-поверхности через t_p и $\bar{w}_\alpha = w_\alpha f_\alpha$

$$(\bar{w}^2 - \bar{w}_p \bar{w}_d) t_p^2 - (\bar{w}_p \varepsilon_d + \bar{w}_d \varepsilon_p) t_p - \varepsilon_p \varepsilon_d = 0, \quad (12)$$

а затем подставить t_p в определение (6). В общем случае получаем достаточно громоздкое выражение для $g_{(-)}$. Рассмотрим поэтому три предельных случая: а) все интегралы перескока одинаковы; б) $w_d = 0$, $w_p < w$; в) $w_p = w_d = 0$, модель Эмери. В случае «а» имеем однозначный ответ: $t_p = -\varepsilon_p \varepsilon_d / (\bar{w}_p \varepsilon_d + \bar{w}_d \varepsilon_p)$ и соответственно

$$g_{(-)} = \frac{\varepsilon_p \varepsilon_d}{(\varepsilon_p^2 \bar{w}_d + \varepsilon_d^2 \bar{w}_p)^2} \left[\pm 2 \frac{\varepsilon_p^3 \bar{w}_d^2}{f_d} - \frac{\varepsilon_d^3 \bar{w}_p^2}{f_p} \right]. \quad (13)$$

Для классической модели Эмери имеем результат, уже полученный в [7]

$$g_{(-)} = \varepsilon_p \varepsilon_d (\pm 2\varepsilon_p f_p - \varepsilon_d f_d) / f_p f_d (\varepsilon_p + \varepsilon_d)^2. \quad (14)$$

Для невзаимодействующих p -электронов в выражениях (13), (14) необходимо отбросить вторые слагаемые, а эффективную константу g_p следует считать равной нулю.

2. Фазовая диаграмма ($U_d = \infty$, $U_p = 0$)

Для невзаимодействующих p -дырок сверхпроводимость возможна только за счет притяжения d -возбуждений, так что, согласно (9), сверхпроводимость может существовать при большом числе электронных ($\varepsilon_d < 0$, $n_d < 1$) и дырочных ($\varepsilon_d > 0$, $n_d > 1$) состояний. Для нахождения границы сверхпроводящей и нормальной фаз при $U_p = 0$ положим в уравнениях состояния $f_p = 1$, $\varepsilon_d = 0$ и будем менять параметр $r = \varepsilon_p - \varepsilon_d$.

В пределе низких температур при самых больших r происходит заполнение только нижней $\xi^{(-)}$ -подзоны. Поэтому для нахождения границ фаз достаточно сложить уравнения состояния для n_p и n_d , после чего из условия $a_p^{(+)} + a_p^{(-)} = 1$ находим участки границы фаз

$$n_p = (2 - 3n_d) / 2(2 - n_d), \quad 0 < n_p < n_p^*, \quad n_d < 1, \quad (15a)$$

$$n_p = (4 - 3n_d) / 2n_d, \quad 0 < n_p < n_p^{**}, \quad n_d > 1. \quad (15б)$$

В предельном случае $\varepsilon_p \rightarrow \infty$ получаем две точки: $n_p = 0$, $n_d = 2/3$ и $n_p = 0$, $n_d = 4/3$, симметричные относительно прямой $n_d = 1$.

Уменьшение энергии ε_p приведет к появлению p -возбуждений (если $\varepsilon_p < w_p$) или $\xi^{(-)}$ -возбуждений с большим положительным t_p (если $\varepsilon_p < (w^2 - w_p w_d) / w_d$). В этих условиях фазовая кривая определяется через параметр ε_p при $\varepsilon_d = 0$, $f_p = 1$

$$n_p = \int_{-1}^0 \rho_0(\varepsilon) a^{(-)}(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\tau_+}^1 \rho_0(\varepsilon) a^{(-)}(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{-1}^1 \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (16)$$

$$\int_{-1}^0 \rho_0(\varepsilon) a^{(+)}(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\tau_+}^1 \rho_0(\varepsilon) a^{(+)}(\varepsilon) d\varepsilon = \begin{cases} n_d/2f_d, & n_d < 1, \\ (n_d - 1)/f_d, & n_d > 1. \end{cases} \quad (17a)$$

$$\int_{-1}^0 \rho_0(\varepsilon) a^{(+)}(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\tau_+}^1 \rho_0(\varepsilon) a^{(+)}(\varepsilon) d\varepsilon = \begin{cases} n_d/2f_d, & n_d < 1, \\ (n_d - 1)/f_d, & n_d > 1. \end{cases} \quad (17b)$$

Здесь $\delta_+ = \max [1, \varepsilon_p - w_d / (w^2 - w_p w_d)]$, $t_- = \min [-1, -\varepsilon_p / w_p]$. При $\varepsilon_p > \max [w_p; (w^2 - w_p w_d) / w_d]$ из (16), (17) получаем кривые (15). При меньших ε_p фазовая кривая отклоняется от (15) в сторону больших n_p . В пределе $\varepsilon_p \rightarrow 0$ сумма интегралов в (17) равна 1/2. Отсюда имеем конечные точки $n_p = 1$, $n_d = 2/3$ и $n_d = 4/3$, $n_p = 1$. Сверхпроводящее состояние целиком заполняет дырочную область между $n_d = 1 + 0$ и $n_d = n_d(n_p)$ из (17b), однако внутри электронной области от (17a) до $n_d = 1$ можно обнаружить и несверхпроводящую область. Несверхпроводящие состояния имеются для $\varepsilon_d < 0$, когда в системе нет $\xi^{(+)}$ -возбуждений, а все состояния $\xi^{(-)}$ заполнены. При этом плотность состояний на поверхности Ферми отлична от нуля только для $\xi^{(p)}$ -подзоны, а для нее сверхпроводимость отсутствует, так как $U_p = 0$.

Обозначим через t^* максимальное значение t_p , которое соответствует уровню Ферми для p -возбуждений

$$t_p^* = -\varepsilon_p / w_p = -(r/2 - \mu) / w_p. \quad (18)$$

При данном r величина химпотенциала для граничных кривых определяется условием полного заполнения $\xi^{(-)}$ -подзоны (малые n_p) или условием полного недозаполнения $\xi^{(+)}$ -подзоны (большие n_p). Если значение t_p , отвечающее экстремальному $\xi^{(+)}$ или $\xi^{(-)}$, лежит внутри интеграла изменения $|t_p| < 1$, т. е.

$$r \bar{w}_p \bar{w}_d < \sqrt{\bar{w}^2 - \bar{w}_p \bar{w}_d} (\bar{w}_+ \bar{w} \pm \bar{w}_- \sqrt{\bar{w}^2 - \bar{w}_p \bar{w}_d}), \quad \bar{w}_\pm = \bar{w}_p \pm \bar{w}_d,$$

то в граничных точках химпотенциал пропорционален r

$$\mu^* = r (\mp 4 \bar{w} \sqrt{\bar{w}^2 - \bar{w}_p \bar{w}_d} - \bar{w}_p^2 + \bar{w}_d^2) / 2 (4 \bar{w}^2 + \bar{w}^2). \quad (19)$$

В противном случае химпотенциал определяется энергией $\xi^{(+)}$ - или $\xi^{(-)}$ -возбуждений, вычисленных при $t_p = \mp 1$

$$\mu = \mp \frac{w_p + f_d w_d}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{r \mp (w_p - w_d f_d)}{2} \right]^2 + w^2 f_d}. \quad (20)$$

Подставляя в (18) то или иное значение химпотенциала (19) или (20), получим функцию от r , который считаем положительным параметром. Граничные кривые находим из уравнения состояния

$$n_p = \int_{-1}^{t^*} \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{-1}^{+1} a^{(-)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad n_d/2f_d = \int_{-1}^{+1} a^{(+)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (21)$$

Для нижней кривой, когда полностью заполнена $\xi^{(-)}$ -подзона, в пределе $r \rightarrow +\infty$ минимальное значение t^* становится меньше -1 , что соответствует гибридной щели. Складывая уравнения (21), получаем начальный участок кривой

$$n_p = 2(1 - n_d) / (2 - n_d). \quad (22)$$

Для верхней кривой при $r \rightarrow +\infty$, $t^* \rightarrow -1$, так что она начинается в той же точке, что и нижняя, $n_p = 0$, $n_d = 1 - 0$. С уменьшением параметра r величина $t^* \rightarrow 0$. Все три интеграла в (21) для четной функции

$\rho_0(\varepsilon)$ оказываются равными 1/2. Поэтому обе кривые заканчиваются в точке $n_p=1$, $n_d=2/3$.

Таким образом, в нижней хаббардовской подзоне для $2/3 < n_d < 1$ с повышением n_p всегда можно найти область Δn_p , внутри которой заполняется только $\xi^{(p)}$ -подзона, а сверхпроводимость отсутствует.

В условиях $n_d > 1$ и $\varepsilon_p < \varepsilon_d = \varepsilon_d + U_d$ ($r < 0$) сверхпроводимость осуществляется в односвязной области по n_p и $n_d < n_p$. Здесь нижняя зона «привязана» к $\xi^{(p)}$ -зоне соотношением $\xi^{(p)}(t_p=0) = \xi^{(-)}(t_p=0) = \varepsilon_p$. По этой причине при $\varepsilon_d > 0$ зоны заполняются одновременно, а сверхпроводимость не исчезает.

Сверхпроводимость снова исчезает, когда уровень Ферми приближается к границе $\varepsilon_p=0$, выше которой появляются локальные p -состояния. Граничную кривую $\varepsilon_p=0$ получаем из уравнений состояния. Можно показать, что при $r > 0$ соответствующая кривая проходит выше $n_p=1$. Поэтому сразу рассмотрим случай $r < 0$ или $\varepsilon_p=0$, но $\varepsilon_d > 0$

$$n_p = \frac{1}{2} + \int_{-1}^0 a^{(-)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\tau_+}^1 a^{(+)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (23)$$

$$\int_{-1}^0 a^{(+)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\tau_+}^1 a^{(+)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon = \begin{cases} n_d/2f_d, & n_d < 1, \\ (n_d - 1)/f_d, & n_d > 1, \end{cases} \quad (24a)$$

$$(24b)$$

где $\tau_+ = \max [1, \varepsilon_d w_p / f_d (w^2 - w_p w_d)]$ и везде следует положить $\varepsilon_p=0$, $f_p=1$. Начальный участок кривой, примыкающий к точке $n_p=1$, $n_d=0$, определяется большими ε_d при $\tau_+=1$ и имеет следующий вид:

$$n_p = 2(1 - n_d)/(2 - n_d). \quad (25)$$

Участок кривой, примыкающий к точке $n_p=1$, $n_d=1+0$, имеет вид

$$n_p = (2 - n_d)/n_d. \quad (26)$$

Если же $\varepsilon_d \rightarrow 0+$, то кривая (23)—(24a) заканчивается в точке $n_p=1$, $n_d=2/3$. Кривая (23)—(24b) заканчивается в точке $n_p=1$. Граничные кривые (16)—(17), (21) и (23)—(24) ограничивают все три области существования сверхпроводящих состояний.

Для рассмотрения различных предельных случаев определенный интерес представляет ситуация, которую обычно изучает Матхейсс, когда различием энергий p - и d -состояний можно пренебречь ($r=0$). В этом пределе энергия возбуждений есть линейная функция t_p : $\xi_p^{(\pm)} = t_p w_{\pm} - \mu$. В условиях $\xi_p = -\mu > 0$ достаточно рассмотреть заполнение трех подзон $\xi^{(-)}$ и $\xi^{(p)}$ для $t_p < 0$ и $\xi^{(-)}$ для $t_p > 0$. Заметим, что при заданном знаке t_p при $r=0$ коэффициенты w_{\pm} от импульса вообще не зависят. Можно показать, что кривая Матхейсса (М-кривая) начинается при $n_p=n_d=0$ и заканчивается в точке $n_p=1$, $n_d=2/3$, оставаясь целиком в несверхпроводящей фазе. При заполнении верхней зоны Хаббарда имеется аналогичная кривая $\varepsilon_p = \varepsilon_d + U_d$, которую назовем кривой Вебера (W-кривая). Она начинается при $n_p=0$, $n_d=1$, заканчивается в точке $n_p=1$, $n_d=4/3$ и располагается целиком в сверхпроводящей области.

В предельном случае $w^2 = w_p w_d$ каждая из кривых (М или W) делится на две части. Нижняя часть кривой, соответствующая малым n_p и n_d (или n_d-1), заканчивается в точке, которой соответствует заполнение с отрицательными t_p . Элементарные вычисления дают следующие координаты:

$$n_p^* = 0.775, \quad n_d^* = 0.367 \text{ на М-кривой}, \quad (27a)$$

$$n_p^* = 0.823, \quad n_d^* = 1.097 \text{ на W-кривой}. \quad (27b)$$

Для больших n_p , когда заполняются состояния с $t_p > 0$, MW-кривые при $w^2 = w_p w_d$ проходят вдоль границы сверхпроводящей и нормальной фаз. Начальные точки совпадают с (27). Максимальное значение $n_p = 1$ имеем для $n_d = 2/3$ или $n_d = 4/3$.

В пределе $w^2 = w_p w_d$ уравнение граничной кривой (23)–(24) ($\epsilon_p = 0$) преобразуется следующим образом. Для $n_d < n_d^*$ получаем линии (25)

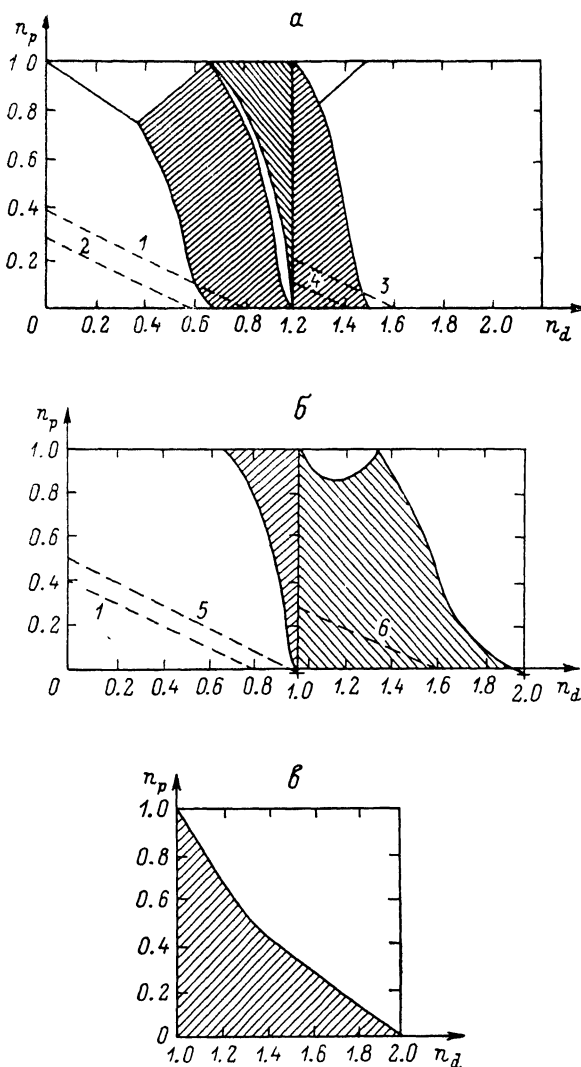


Рис. 1. Фазовая диаграмма не взаимодействующих p -дырок и хаббардовских d -электронов, рассчитанная для прямоугольной плотности состояний в пределе одинаковых интегралов перескока $w_p = w_d = w$ (а), в промежуточном случае $w_d = 0, w = 2w_p$ (б) и в модели Эмери $w_p = w_d = 0$ (в).

Сверхпроводящие области заштрихованы. Штриховые прямые — линии электронейтральности (2). 1 — $\text{Ln}_{1-x}\text{Ce}_{0.2}\text{CuO}_4$, 2 — $\text{Ln}_{1-x}\text{Ce}_{0.4}\text{CuO}_4$, 3 — $\text{Ln}_{1-x}\text{Ce}_{0.6}\text{CuO}_4$, 4 — $\text{Ln}_{1-x}\text{Sr}_{0.2}\text{CuO}_4$, 5 — Ln_2CuO_4 , 6 — $\text{Ln}_{1-x}\text{Sr}_{1-x}\text{CuO}_4$.

и (26); оставшаяся часть кривой прижимается к (28). В этом же пределе границы фаз сначала совпадают с (15а) и (15б), а затем определяются уравнениями с $\epsilon_d = 0$. Соответствующая кривая начинается в точке $n_p = 0$ и $n_d = 2/3$ (или $n_d = 4/3$) и заканчивается в «критической точке» (27). Кривые (21), ограничивающие внутреннюю несверхпроводящую часть, определяются теми же соотношениями (18)–(20), в которых следует положить $w^2 = w_p w_d$.

Внутренние части этих кривых, как и большая часть фазовой кривой, зависят от вида функции $\rho_0(\varepsilon)$. В частном случае $\rho_0(\varepsilon) = \Theta(1 - \varepsilon^2)/2$ фазовая диаграмма для $w = w_p = w_d$ изображена на рис. 1, а.

Для комплексов CuO_2 особый интерес представляет случай отсутствия прямого $d-d$ -туннелирования ($w_d = 0$) при малом, но конечном $p-p$ -туннелировании $w_p < w$ (рис. 1, б). При этом $\xi_p^{(d)} = \varepsilon_d$, так что для $\varepsilon_p > \varepsilon_d$ и на границе фаз $\varepsilon_d = 0$ энергия нижней подзоны имеет максимум при $t_p = 0$. Отсюда заключаем, что для $n_d < 1$ и при заполнении $\xi^{(-)}$ -подзоны сверхпроводимость отсутствует. При $n_d < 1$ сверхпроводимость появляется как раз тогда, когда начинает заполняться $\xi^{(+)}$ -подзона. В случае $w_d = 0$ минимальное значение энергии в верхней подзоне осуществляется при $t_p^* = -2rw_p/(w_p^2 + 4\bar{w}^2)$ и оказывается равным $r(4\bar{w}^2 - w_p^2)/2(4\bar{w}^2 - w_p^2)$.

Исходя из этого находим уравнение фазовой кривой

$$n_p = \int_{-1}^{\tau_a} \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{-1}^1 d^{(-)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad n_d = 2f_d \int_{-1}^1 a^{(+)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (28)$$

Для больших $r > (w_p^2 + 4\bar{w}^2)/2w_p$,

$$\tau_a = -\frac{1}{2} - \frac{r}{2w_p} + \left(\frac{1}{2} - \frac{r}{2w_p}\right)^2 + \left(\frac{\bar{w}}{w_p}\right)^2,$$

если же $0 < r < (w_p^2 + 4\bar{w}^2)/2w_p$, то

$$\tau_a = -2rw_p/(w_p^2 + 4\bar{w}^2).$$

В пределе $r \rightarrow 0+$ имеем точку $n_p = 1$, $n_d = 2/3$. С возрастанием r критическое значение n_p убывает, а n_d возрастает; в пределе $r \rightarrow \infty$ имеем $n_p = 0$, $n_d = 1$.

В области $n_d > 1$ условие сверхпроводимости имеет вид $\bar{\varepsilon}_d > 0$, так что для $\varepsilon_p > \bar{\varepsilon}_d$ сверхпроводимость осуществляется именно при заполнении нижней $\xi^{(-)}$ -подзоны. Соответствующая кривая имеет вид, аналогичный (28)

$$n_p = \int_{-1}^{\tau_b} \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{-1}^1 d^{(-)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad n_d = 1 + f_d \int_{-1}^1 d^{(-)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (29)$$

где $\tau_b = \min(-1, -r/w_p)$. Кривая начинается в точке $n_p = 1$, $n_d = 4/3$ ($r = 0+$) и заканчивается в точке $n_p = 0$, $n_d = 2$, когда $r \rightarrow +\infty$.

В условиях $n_d < 1$ и $r < 0$ сверхпроводимость отсутствует. Если же $n_d > 1$ и $\varepsilon_p < \bar{\varepsilon}_d$, то сверхпроводимость осуществляется для всех $\varepsilon_p > 0$. Граничная кривая начинается в точке $n_p = n_d = 1$ и заканчивается при $n_p = 1$, $n_d = 4/3$ (рис. 1, б).

На рис. 1, в изображен предел Эмери $w_p = w_d = 0$. В этом случае сверхпроводимость осуществляется только для $n_d > 1$ и при условии

$$n_p < (2 - n_d)/n_d, \quad (30)$$

которое при $n_d > 1$ формально совпадает с (26). Несверхпроводящая граница заполнения нижней подзоны для $n_d < 1$ в модели Эмери совпадает с (25).

3. Фазовая диаграмма для $U_p = U_d = \infty$

При наличии сильного хаббардовского отталкивания и малой концентрации n_p амплитуда $p-p$ -рассеяния положительна, так что сверхпроводимость может существовать только за счет притяжения d -возбуждений, как это следует из общего выражения (10) при $\varepsilon_p > 0$.

Для больших положительных r , когда заполняется только нижняя $\xi^{(-)}$ -подзона, существование сверхпроводящего состояния определяется

условием $\varepsilon_d > 0$ для верхней и $\varepsilon_d < 0$ для нижней зоны Хаббарда. Легко видеть, что при $r \gg w$ и $t_p \rightarrow 0$ коэффициент $a_p^{(-)}$ обращается в нуль, поэтому граничному значению $\varepsilon_d = 0$ отвечает половинное заполнение нижней подзоны $\xi_p^{(-)}$ при $t_p < 0$. Отсюда находим уравнение фазовой кривой

$$n_p/f_p = \int_{-1}^0 a^{(-)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\tau_+}^1 a^{(-)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon, \\ \int_{-1}^0 a^{(+)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\tau_+}^1 a^{(+)}(\varepsilon) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon = \begin{cases} n_d/2f_d, & n_d < 1, \\ (n_d - 1)/f_d, & n_d > 1. \end{cases} \quad (31)$$

Здесь

$$\varepsilon_d = 0, \quad \varepsilon_p > w_p f_p, \quad \tau_+ = \max[1, \varepsilon_p w_d / f_p (w^2 - w_p w_d)].$$

Эти уравнения представляют собой участок фазовой кривой, который начинается в точках $n_p = 0$, $n_d = 2/3$ и $n_d = 4/3$, $n_p = 0$. Граничному значе-

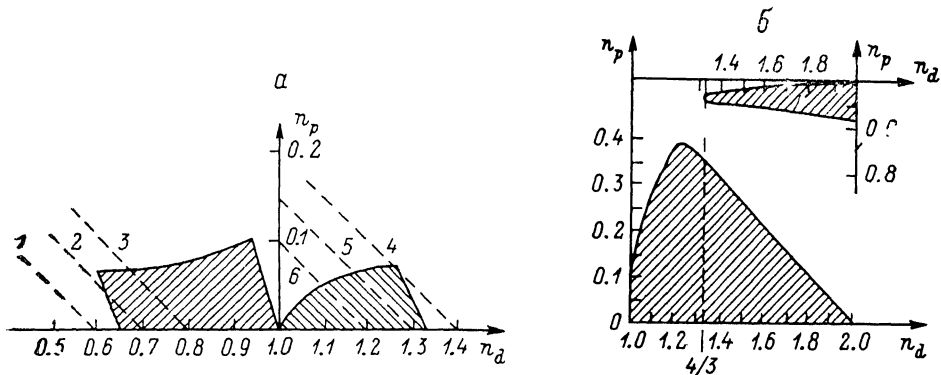


Рис. 2. Фазовая диаграмма хаббардовских p -дырок и d -электронов, рассчитанная для прямоугольной плотности состояний в пределе одинаковых интегралов перескока $w_p = w_d = w$ (а) и в случае $w_p = w_d = 0$ (б).

Сверхпроводящие области заштрихованы. Штриховые прямые — линии электронейтральности. 1 — $\text{Ln}_{1.6}\text{Ce}_{0.4}\text{CuO}_4$, 2 — $\text{Ln}_{1.7}\text{Ce}_{0.3}\text{CuO}_4$, 3 — $\text{Ln}_{1.8}\text{Ce}_{0.2}\text{CuO}_4$, 4 — $\text{Ln}_{1.8}\text{Sr}_{0.2}\text{CuO}_4$, 5 — $\text{Ln}_{1.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CuO}_4$, 6 — $\text{Ln}_{1.8}\text{Sr}_{0.2}\text{CuO}_4$.

нию $\varepsilon_p = w_p f_p$ отвечает точка, начиная с которой происходит одновременное заполнение $\xi^{(-)}$ и $\varepsilon^{(p)}$ -подзон. Таким образом, оставшийся участок кривой, определяемый условием $\lambda = 0$, надлежит искать на ЭВМ.

В области самых больших ε_p , когда исчезают вторые интегралы в (31), для верхней хаббардовской зоны получаем область сверхпроводимости, примыкающую к интервалу

$$n_p \leq 4(4 - 3n_d)/(12 - n_d). \quad (32)$$

Для нижней зоны сверхпроводящая область примыкает к интервалу $2/3 < n_d < 1$,

$$\frac{4 - 7n_p}{4 - 5n_p} \geq n_d \geq 2 \frac{4 - 11n_p}{12 - 17n_p}. \quad (33)$$

Правое равенство соответствует полному заполнению нижней подзоны и справедливо для больших r , пока еще не начинает заполняться $\xi^{(p)}$ -подзона. С уменьшением r кривые, являющиеся продолжением кривых от левого и правого равенства (33), сближаются и смыкаются в некоторой точке R , положение которой зависит от безразмерных параметров $w^2/w_p w_d$ и w_p/w_d .

При больших значениях n_p , но меньших $4/7$, сверхпроводимость отсутствует по причине большой положительной амплитуды p - p -рассеяния,

что соответствует условию $\varepsilon_p > 0$. Сверхпроводимость отсутствует и в области отрицательных r выше кривой Матхейса, так как здесь $\varepsilon_d > \varepsilon_p > 0$ все возбуждения имеют положительную амплитуду рассеяния.

В верхней зоне, когда $\varepsilon_d = \varepsilon_d + U_d > \varepsilon_p$, $n_d > 1$, $r < 0$, амплитуда рассеяния \hat{a} -возбуждений отрицательна. Однако можно утверждать, что при больших $|r|$ сверхпроводимость отсутствует по причине малого числа \hat{a} -возбуждений по сравнению с числом p -возбуждений (так как здесь $a_p^{(+)} \ll 1$). Скорее всего, вся сверхпроводящая область находится под кривой Вебера $r=0$. Именно в области $r > 0$ плотность \hat{a} -возбуждений больше плотности p -возбуждений, а фазовая кривая, которая начинается под кривой $\varepsilon_d=0$, нигде не пересекает линию $r=0$.

В качестве иллюстрации приведем рис. 2, на котором изображена фазовая диаграмма для двух предельных случаев: $w=w_p=w_d(a)$, $w_p=w_d=0(b)$, когда заполняются только нижние подзоны $\xi^{(-)}$ и $\xi^{(p)}$, т. е. $n_p < 4/7$.

4. Сравнение с экспериментом и выводы

Рассмотрим границы фаз в области предельно малых n_p . Вне зависимости от энергии U_p в обеих точках $n_d=2/3$ и $n_d=4/3$ наклон фазовой кривой $|\partial n_p / \partial n_d| = 9/8$, что в 2.25 раза больше наклона линии электронейтральности (2). Отсюда заключаем, что при большом допировании четырехвалентным катионом сверхпроводимость заведомо исчезает для $x_4 > 1/3$. Если же замещение произведено на двухвалентный катион, то при $x_2 > 1/3$ сверхпроводимость исчезает только для самых больших r . При конечном сдвиге r всегда существуют значения $x_4 < 1/3$, начиная с которых при $n_d < 1$ сверхпроводимость только начинает появляться. В дырочной части фазовой диаграммы $1 < n_d < 4/3$ и $n_p < 4/7$ сверхпроводимость существует всегда (рис. 1, а; 2, а).

Сравнение рис. 1, а и б указывает на существенную роль «прямого» перескока w_d . При $w_d=0$ в электронной части фазовой диаграммы сверхпроводимость существует только для конечных n_p , когда начинается заполнение верхней $\xi^{(+)}$ -подзоны. Наклон фазовой кривой (29) при $n_p \ll 1$ и $n_d \rightarrow 1-0$ в четыре раза больше наклона линии электронейтральности (2), поэтому для $w_d=0$ сверхпроводимость не может существовать ни при каких концентрациях четырехвалентного допанта. Таким образом, для возможности хотя бы качественного согласования с экспериментом необходимо предположить $w_d \neq 0$. Модель Эмери есть случай, противоположный модели Хаббарда в смысле асимметрии фазовой диаграммы. При малой концентрации p -дырок сверхпроводимость может появиться только при $n_d > 1$. Как следует из Приложения, включение прямого кулоновского взаимодействия еще больше усиливает асимметрию фазовой диаграммы. На эксперименте наблюдается промежуточная ситуация, когда область существования ВТСП для $n_d < 1$ значительно уже, чем для $n_d > 1$, но все-таки она существует. Если предположить, что $w_d \neq 0$, то это наблюдение можно качественно согласовать с выводами настоящей работы.

Основной результат — доказательство асимметрии фазовой диаграммы — следует непосредственно из явного вида эффективной константы БКШ (10)–(14), которая существенно зависит от параметров гамильтониана (4). Асимметрия проявляется еще сильнее, если учесть прямое кулоновское взаимодействие и вычислить константу $\lambda^{-1}=L$ из уравнения (П.7).

Важно заметить, что вычисление предэкспоненциального множителя в формуле для T_c требует выхода за рамки логарифмического приближения [8]. Учет нелогагрифмических парамагнитных поправок приводит к перенормировке и уменьшению эффективной константы, но не меняет условий, при которых она обращается в нуль.

Изучим влияние прямого кулоновского взаимодействия (16), заэкранированного на длине, превышающей расстояние до ближайших соседей. Предполагая, что потенциал $V_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ отличен от нуля только для узлов с ионами разных знаков, находим новые вершины $\Gamma_{\lambda, d}$ и $\Gamma_{d, \lambda}$. Соответствующие однородные уравнения, записанные в лестничном приближении, имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \Gamma_{d\lambda}(\mathbf{p}) &= -T \sum_{\omega, \mathbf{p}', n, k} V^{d\lambda}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') G_{-\omega}^{d\lambda}(-\mathbf{p}') G_{\omega}^{\lambda n}(\mathbf{p}') \Gamma_{kn}(\mathbf{p}'), \\ \Gamma_{\lambda d}(\mathbf{p}) &= -T \sum_{\omega, \mathbf{p}', n, k} V^{\lambda d}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') G_{-\omega}^{\lambda k}(-\mathbf{p}') G_{\omega}^{dn}(\mathbf{p}') \Gamma_{kn}(\mathbf{p}'). \end{aligned} \quad (\text{П. 1})$$

Здесь вершинная часть Γ_{kn} зависит от входящего импульса первого k -состояния; второе n -состояние имеет противоположный импульс и противоположный знак изменения проекции спина. К системе (П. 1) следует добавить уравнение, содержащее кинематическую часть амплитуды рассеяния (8а), в котором левая сторона не зависит от начальных импульсов. В изучаемой модели $V_{(q)}^{2\lambda} = V_0(1 + e^{i\mathbf{q}\lambda}) = (V_{(q)}^{\lambda})^*$, так что система уравнений (П.1) решается в разделяющихся переменных

$$\Gamma_{d\lambda} = a + be^{i\mathbf{p}\lambda} = \Gamma_{\lambda d}^*, \quad \Gamma_{d\lambda} = \Gamma_{d\lambda}, \quad \Gamma_{\lambda\lambda} = \delta_{\lambda\lambda} \Gamma_{\mathbf{p}}. \quad (\text{П. 2})$$

Подстановка (П. 2) в уравнения (П. 1) и (8а) с учетом явного вида одночастичных функций Грина (3) позволяет заключить, что окончательные формулы содержат неизвестные коэффициенты в виде разности $R = a - b$, для которой из (П. 1) получаем

$$R = -\frac{V_0}{Dw} \left\{ w_{\mathbf{p}}^2 \overline{\Omega_{\mathbf{p}}} f_{\mathbf{p}} \Gamma_{d\lambda} + w_{\mathbf{p}}^2 \Omega_{d\lambda} f_{d\lambda} \Gamma_{\mathbf{p}} + \frac{R}{w} \overline{w_{\mathbf{p}}^2 \Omega_{\mathbf{p}}} \right\}. \quad (\text{П. 3})$$

Здесь D — размерность, $w_{\mathbf{p}}^2 = w^2 \left(D - \sum_{\lambda} \cos p_{\lambda} \right)$, а черта означает усредненные по всем \mathbf{p} с множителем

$$W_{\mathbf{p}} = T \sum_{\omega} \{ [\omega_n^2 + (\xi_{\mathbf{p}}^{(+)})^2] [\omega_n^2 + (\xi_{\mathbf{p}}^{(-)})^2] \}^{-1}. \quad (\text{П. 4})$$

Аналогичные преобразования уравнений (8а) приводят к следующей системе:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{p}} &= -\frac{2\epsilon_{\mathbf{p}}}{Df_{\mathbf{p}}} \left[\overline{\Omega_{d\lambda} \Omega_{d\lambda}^*} \Gamma_{\mathbf{p}} + \overline{w_{\mathbf{p}}^2 f_{\mathbf{p}} f_{d\lambda}} \Gamma_{d\lambda} + \frac{f_{\mathbf{p}}}{w} \overline{\Omega_{d\lambda} w_{\mathbf{p}}^2} R \right], \\ \Gamma_{d\lambda} &= \pm \frac{2\epsilon_{d\lambda}}{f_{d\lambda}} \left[\overline{\Omega_{\mathbf{p}} \Omega_{\mathbf{p}}^*} \Gamma_{d\lambda} + w_{\mathbf{p}}^2 f_{\mathbf{p}} f_{d\lambda} \Gamma_{\mathbf{p}} + \frac{f_{d\lambda}}{w} \overline{\Omega_{\mathbf{p}} w_{\mathbf{p}}^2} R \right]. \end{aligned} \quad (\text{П. 5})$$

При выключенном кулоновском взаимодействии $R=0$ из (П. 5) находим все соотношения (9)–(10). В общем случае условие разрешимости системы (П. 4) и (П. 5) имеет громоздкий вид, поэтому выпишем его для случая, когда заполнена только нижняя $\xi^{(-)}$ -подзона или только верхняя $\xi^{(+)}$ -подзона

$$(A + B - C)L - \varphi ABC L^3 = 1. \quad (\text{П. 6})$$

Здесь

$$\begin{aligned} A &= \pm \frac{2\epsilon_{d\lambda}}{f_{d\lambda}} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} (a_{\mathbf{p}}^{(-\alpha)})^2 \delta(\xi_{\mathbf{p}}^{(\alpha)}), \quad B = -\frac{2\epsilon_{\mathbf{p}}}{Df_{\mathbf{p}}} \sum_{\mathbf{p}\alpha} (d_{\mathbf{p}}^{(\alpha)})^2 \delta(\xi_{\mathbf{p}}^{(\alpha)}), \\ C &= \frac{V_0}{Dw^2} \sum_{\mathbf{p}\alpha} w_{\mathbf{p}}^2 a_{\mathbf{p}}^{(\alpha)} d_{\mathbf{p}}^{(-\alpha)} \delta(\xi_{\mathbf{p}}^{(\alpha)}), \quad \varphi = (f_{\mathbf{p}} - f_{d\lambda})^2 / f_{\mathbf{p}} f_{d\lambda}. \end{aligned} \quad (\text{П. 7})$$

Коэффициент при $L = \ln(i/T_0)$ есть безразмерная константа БКШ, содержащая кулоновское слагаемое C , которое всегда уменьшает возможные

значения T_c . Нелинейное слагаемое $\sim L^3$ определяет интерференцию кулоновского и кинематического взаимодействия.

Качественное исследование уравнения (П. 6) позволяет сделать следующие заключения.

1. В областях, где сверхпроводимость обусловлена притяжением обоих типов носителей $A > 0, B > 0$, кулоновское взаимодействие всегда уменьшает область существования сверхпроводящей фазы (например, для $n_d < 1$ и $n_p \leq 1$).

2. Если кинематическое взаимодействие одной из групп имеет отталкивательный характер ($A > 0, B < 0$ или наоборот), то кулоновское взаимодействие через нелинейные эффекты компенсирует линейную отталкивательную часть, а при $n_d > 1$ приводит к расширению области существования сверхпроводящей фазы для $1 < n_d < 4/3$.

3. В областях, где обе амплитуды имеют характер отталкивания $A < 0, B < 0$, кулоновское взаимодействие ни при каких обстоятельствах не приводит к сверхпроводимости.

Таким образом, в области $n_d < 1$ и $n_p < 1$ прямое кулоновское взаимодействие естественным образом ослабляет и даже компенсирует возможные $d-d$ - или $p-p$ -притяжения.

В области $n_d > 1$, но $n_p < 1$ гамильтониан (16) следует рассматривать как взаимодействие между d -частицами и p -дырками. Поэтому наиболее существенная, нелинейная, часть взаимодействия приводит к притяжению с эффективной константой $\lambda \sim \sqrt[3]{ABC}$. Ясно, что этот эффект приводит к еще большей d -асимметрии фазовой диаграммы.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Hubbard J. // Proc. Roy. Soc. 1963. V. A276. P. 238—257.
- [2] Zaitsev R. O. // Phys. Lett. A. 1988. V. 134. P. 199—201.
- [3] Кожевников В. Л. и др. // ФММ. 1987. Т. 63. С. 625.
- [4] Maple M. B. et al. // Physica C. 1990. V. 165. P. 469—473.
- [5] Emery V. J. // Phys. rev. Lett. 1987. V. 58. P. 2794—2787.
- [6] Hirsch J. E. // Physica C. 1989. V. 161. P. 185—194.
- [7] Зайцев Р. О. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 11. С. 3507—3510.
- [8] Зайцев Р. О. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 1. С. 233—243.

Институт атомной энергии
им. И. В. Курчатова
Москва

Поступило в Редакцию
30 июля 1990 г.