

О сверхпроводимости высокоспиновых соединений переходных металлов

Р. О. Зайцев¹⁾

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

Поступила в редакцию 26 января 2010 г.

После переработки 25 мая 2010 г.

На основе представления о сильном взаимодействии в одной и той же элементарной ячейке установлена возможность существования куперовской неустойчивости в соединениях переходных металлов. Построена фазовая диаграмма существования сверхпроводящего упорядочения в зависимости от степени недозаполнения (h_d) 3d-оболочек. Вычислено значение нефермионной константы БКШ.

При малой энергии амплитуда рассеяния для возбуждений с противоположными спинами положительна, так что, начиная с некоторой концентрации, система становится ферромагнитной. Таким образом удалось объяснить возникновение ферромагнетизма α -железа, кобальта и никеля [1]. При дальнейшем повышении энергии амплитуда рассеяния оказывается отрицательной, ферромагнетизм исчезает и система переходит в сверхпроводящее состояние [2].

В настоящей работе результаты, относящиеся к классической модели Хаббарда ($\kappa = 1$), обобщаются на случай максимального числа орбитальных состояний ($\kappa = 5$). Анализируется проблема возникновения сверхпроводимости при последовательном заполнении нижней 3d-подзоны. Амплитуда рассеяния вычисляется с учетом сильного электрон-электронного внутриатомного взаимодействия, в предположении о том, что его значение является наибольшим энергетическим параметром.

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

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

Для простоты вычислений предполагаем, что интеграл перескока не зависит ни от спина σ , ни от кристаллических индексов (i, k): $t_{i,k}(\mathbf{r}) = \delta_{i,k} t(\mathbf{r})$, так что уравнения можно записать только для фиксированного k .

В общем случае индексы (i, k) независимо пробегают пять значений: $xy, yz, zx, x^2 - y^2$ и $3z^2 - r^2$, од-

нако при написании уравнений мы выделим $3z^2 - r^2$ -состояние, что соответствует проекции $l_z = 0$.

Во всей 3d-группе переходных элементов и одно-орбитальные и разноорбитальные кулоновские матричные элементы имеют порядок нескольких эВ и велики по сравнению с интегралами перескока к ближайшим соседям²⁾.

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

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

Здесь индексы α и γ соответствуют взаимно-обратным переходам $s \rightarrow m$, то есть $\gamma(m, s) = -\alpha(s, m)$. Для наинизших высокоспиновых состояний коэффициенты $g_{\alpha}^{k,\sigma}$ выражаются через произведения спиновых и орбитальных коэффициентов векторного сложения, соответствующие отделению одной частицы (см. ниже). $X_{\mathbf{r}}^{\alpha}$ – X-операторы ферми-типа, удовлетворяющие нефермижидкостным перестановочным соотношениям:

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

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

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

²⁾ По этой причине соответствующие значения кулоновских матричных элементов считаются бесконечными, а оценка поляризационных эффектов и эффектов экранирования должна быть сделана в отдельной работе.

¹⁾ e-mail: Zaitsev_rogdai@mail.ru

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

$$D_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) = G_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p})f_{\beta};$$

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

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

При заданных номерах одночастичного перехода $\beta(m, s)$ каждый концевой множитель f_{β} равен сумме средних чисел заполнения начального и конечного состояний. В нашем приближении собственно-энергетическая часть есть сумма произведений концевого множителя на обобщенную матрицу перескоков, а также однопетлевой поправки:

$$f_{\alpha(s,m)} = n_s + n_m, \quad \Sigma_{\alpha}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) = f_{\alpha} t_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{p}) + \Sigma^{\alpha,\beta}, \quad (6)$$

$$t_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{p}) = g_{\alpha}^{k,\sigma} t_s^k(\mathbf{p}) g_{\beta}^{s,\sigma}.$$

Амплитуды двухчастичного рассеяния $\Gamma_{\alpha,\beta;\lambda,\nu}^0(\mathbf{p})$ определяются как коэффициенты при произведениях операторов $\hat{X}_{\lambda}\hat{X}_{\nu}$, полученных в результате вычисления двойных коммутаторов $\left\{ \hat{X}_{\alpha}, \left[\hat{X}_{\beta}, \hat{H} \right] \right\}$, где \hat{H} есть оператор Гамильтона (1), выраженный через X -операторы [3].

Покажем, что при заданном значении проекции спина и проекции момента дело сводится к нахождению четырех независимых вершин.

Зафиксируем индексы одночастичного перехода $\alpha(n, m)$ таким образом, что n -состояние есть $N - 1$ -частичное состояние с заданной проекцией полного спина $S^z - 1/2$, в то время как m -состояние есть N -частичное состояние с заданной проекцией полного спина S^z . Если рассеяние происходит на совокупности виртуальных переходов со спином “вверх”, тогда следует фиксировать переход между $N - 1$ -частичным d и N -частичным c -состояниями, а затем вычислить антикоммутатор:

$$\left\{ \hat{X}^{n,m}, \hat{X}^{c,d} \right\} = \delta_{m,c} \hat{X}^{n,d} + \delta_{d,n} \hat{X}^{c,m}. \quad (7)$$

Для того чтобы вычислить амплитуду рассеяния одночастичных возбуждений с противоположным знаком изменения проекции спина, необходимо задать переход между $N - 1$ -частичным a и N -частичным

b состояниями, принадлежащими к группе одночастичных переходов с группой “перевернутых” спинов, а затем вычислить коммутатор³⁾:

$$\left[\hat{X}^{a,b}, \left(\delta_{m,c} \hat{X}^{n,d} + \delta_{d,n} \hat{X}^{c,m} \right) \right] =$$

$$= \delta_{m,c} \left(\delta_{b,n} \hat{X}^{a,d} - \delta_{a,d} \hat{X}^{n,b} \right) +$$

$$+ \delta_{d,n} \left(\delta_{b,c} \hat{X}^{a,m} - \delta_{a,m} \hat{X}^{c,b} \right). \quad (8)$$

В нашем случае, состояния (a, n, d) и (b, m, c) принадлежат состояниям с различным числом электронов. Поэтому первое и четвертое слагаемые в правой части (8) должны быть отброшены, и это соотношение упрощается:

$$\left[\hat{X}^{a,b}, \left(\delta_{m,c} \hat{X}^{n,d} + \delta_{d,n} \hat{X}^{c,m} \right) \right] =$$

$$= -\delta_{m,c} \delta_{a,d} \hat{X}^{n,b} + \delta_{d,n} \delta_{b,c} \hat{X}^{a,m}. \quad (9)$$

Мы ограничиваемся рассмотрением переходов между высокоспиновыми состояниями, когда каждое состояние определяется числом частиц, проекцией полного спина и полного момента. Поскольку, в то же время, все одночастичные возбуждения соответствуют переходам с заданным изменением проекции спина и проекции момента, то в первом слагаемом правой части (9) следует считать, что $a = n$, а во втором слагаемом: $b = m$. В результате мы получим 4-вершинные части, определяющие кинематическое взаимодействие для двух диаграмм, которые представлены на рис.1а и рис.2а.

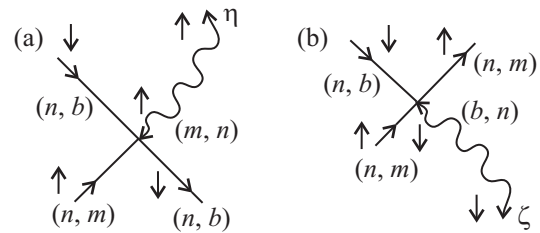


Рис.1. Графическое изображение вершинной части кинематического взаимодействия при заданной проекции n -состояния

Если же мы рассматриваем рассеяние на совокупности виртуальных переходов со спином “вниз”, тогда следует фиксировать переход между

³⁾ Появление коммутатора вместо антикоммутатора связано с тем, что операторы $\hat{X}^{n,d}$ и $\hat{X}^{c,m}$ принадлежат к операторам бозе-типа, каждый из которых отвечает переходам без изменения числа частиц.

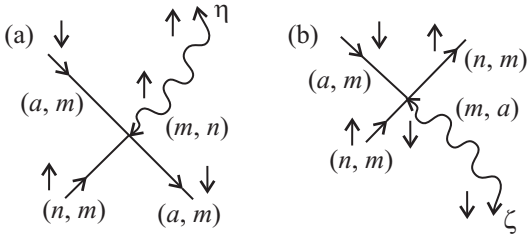


Рис.2. Графическое изображение вершинной части кинематического взаимодействия при заданной проекции m -состояния

N -частичным b и $N - 1$ -частичным a состояниями, а затем вычислить антикоммутиатор:

$$\{\hat{X}^{n,m}, \hat{X}^{b,a}\} = \delta_{m,b} \hat{X}^{n,a} + \delta_{a,n} \hat{X}^{b,m}. \quad (10)$$

Для того чтобы вычислить амплитуду рассеяния одночастичных возбуждений с противоположным знаком изменения проекции спина, необходимо задать переход между $N - 1$ -частичным c и N -частичным d состояниями, принадлежащими к той же группе одночастичных переходов со спином “вниз”, а затем вычислить коммутиатор:

$$\begin{aligned} & [\hat{X}^{c,d}, (\delta_{m,b} \hat{X}^{n,a} + \delta_{a,n} \hat{X}^{b,m})] = \\ & = \delta_{m,b} (\delta_{d,n} \hat{X}^{c,a} - \delta_{a,c} \hat{X}^{n,d}) + \\ & + \delta_{n,a} (\delta_{b,d} \hat{X}^{c,m} - \delta_{m,c} \hat{X}^{b,d}). \end{aligned} \quad (11)$$

Рассуждения аналогичные предыдущим показывают, что первое и четвертое слагаемые в правой части (11) должны быть отброшены, и вместо (11) имеем:

$$\begin{aligned} & [\hat{X}^{c,d}, (\delta_{m,b} \hat{X}^{n,a} + \delta_{a,n} \hat{X}^{b,m})] = \\ & = -\delta_{m,b} \delta_{a,c} \hat{X}^{n,d} + \delta_{n,a} \delta_{b,d} \hat{X}^{c,m}. \end{aligned} \quad (12)$$

Кроме того, для одночастичных переходов между высокоспиновыми состояниями следует считать, что $b = d = m$, а во втором слагаемом $a = c = n$. В результате мы получим 4-вершинные части, определяющие кинематическое взаимодействие для двух диаграмм, которые представлены на рис.1b и рис.2b.

Как показано Горьковым [4], для получения условия возникновения сверхпроводимости достаточно рассмотреть однородную систему лестничных уравнений. Поскольку в нашем случае нулевая вершинная часть зависит только от выходящих импульсов, соответствующие уравнения имеют вид

$$\Gamma_1(\alpha, \beta | \gamma, \psi) = -T \times \quad (13)$$

$$\times \sum_{\mathbf{p}, \omega, \eta, \zeta, \lambda, \nu} \Gamma^{(0)}(\alpha, \beta | \eta, \zeta; \mathbf{p}) G_{\omega}^{\eta, \lambda}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{\zeta, \nu}(-\mathbf{p}) \Gamma(\lambda, \nu | \gamma, \psi).$$

В соответствии с рис.1 и 2 вершинная часть разбивается на две части:

$$\Gamma(\alpha, \beta | \gamma, \psi) = \Gamma_1(\alpha, \beta | \gamma, \psi) + \Gamma_2(\alpha, \beta | \gamma, \psi). \quad (14)$$

Используя рис.1, напомним:

$$\begin{aligned} \Gamma_1(\alpha, \beta | \gamma, \psi) = & \left\{ T \sum_{\mathbf{p}, \omega, \eta, \lambda, \nu} t^{\bar{\alpha}, \eta}(\mathbf{p}) G_{\omega}^{\eta, \lambda}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{\beta, \nu}(-\mathbf{p}) + \right. \\ & \left. + T \sum_{\mathbf{p}, \omega, \zeta, \lambda, \nu} t^{\bar{\beta}, \zeta}(\mathbf{p}) G_{\omega}^{\alpha, \lambda}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{\zeta, \nu}(-\mathbf{p}) \right\} \Gamma(\lambda, \nu | \gamma, \psi), \end{aligned} \quad (15)$$

где индексы фиксированы в соответствии с рис.1:

$$\alpha \rightarrow \alpha(n, m), \quad \bar{\alpha} \rightarrow \bar{\alpha}(m, n), \quad \beta \rightarrow \beta(n, b), \quad \bar{\beta} \rightarrow \bar{\beta}(n, b).$$

Таким образом, β - и α -переходы имеют одинаковые начальные значения проекции полного спина. Индексы η и λ соответствуют всевозможным одночастичным переходам с положительным знаком изменения спина, в то время как ζ и ν соответствуют всем переходам с отрицательным знаком изменения спина.

Вершинную часть $\Gamma_2(\alpha, \beta | \gamma, \psi)$ напомним, используя рис.2:

$$\begin{aligned} \Gamma_2(\alpha, \beta | \gamma, \psi) = & - \left\{ T \sum_{\mathbf{p}, \omega, \eta, \lambda, \nu} t_{\mathbf{p}}^{\bar{\alpha}, \eta} G_{\omega}^{\eta, \lambda}(\mathbf{p}) G_{-\omega}^{\beta, \nu}(-\mathbf{p}) + \right. \\ & \left. + T \sum_{\mathbf{p}, \omega, \zeta, \lambda, \nu} t_{\mathbf{p}}^{\bar{\beta}, \zeta} G_{-\omega}^{\alpha, \lambda}(-\mathbf{p}) G_{\omega}^{\zeta, \nu}(\mathbf{p}) \right\} \Gamma(\lambda, \nu | \gamma, \psi). \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь индексы определяются в соответствии с рис.2, а β - и α -переходы имеют одинаковые конечные проекции полного спина.

$$\alpha \rightarrow \alpha(n, m), \quad \bar{\alpha} \rightarrow \alpha(m, n), \quad \beta \rightarrow \beta(a, m), \quad \bar{\beta} \rightarrow \bar{\beta}(m, a).$$

Множители $t_{\mathbf{p}}^{\bar{\alpha}, \nu}$ и матричные элементы функции Грина $G_{\omega}^{\alpha, \nu}(\mathbf{p})$ выражаются через коэффициенты g_{α} , амплитуду перехода к соседней ячейке $t_{\mathbf{p}}$ и одночастичную матрицу:

$$\begin{aligned} G_{\omega}^{\alpha, \nu}(\mathbf{p}) = & (i\omega + \mu)^{-1} \delta_{\alpha, \nu} + f t_{\mathbf{p}}^{\bar{\alpha}, \nu} (\det_{\omega, \mathbf{p}})^{-1}, \\ & t_{\mathbf{p}}^{\bar{\alpha}, \nu} = g_{\bar{\alpha}} t_{\mathbf{p}} g_{\nu}, \end{aligned} \quad (17)$$

где $\det_{\omega, \mathbf{p}} = (i\omega + \mu)(i\omega - \xi_{\mathbf{p}})$, $\xi_{\mathbf{p}} = f g^2 t_{\mathbf{p}} - \mu$, $g^2 = \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2$, f - концевой множитель.

С помощью этих определений удастся вычислить сумму, входящую в определение ядра интегрального уравнения для вершинной части:

$$\begin{aligned} \sum_{\eta} t_{\mathbf{p}}^{\bar{\alpha}, \eta} G_{\omega}^{\eta, \lambda}(\mathbf{p}) &= \frac{g_{\bar{\alpha}} t_{\mathbf{p}} g_{\lambda}}{(i\omega + \mu - fg^2 t_{\mathbf{p}})} = \\ &= t_{\mathbf{p}}^{\bar{\alpha}, \lambda} \frac{1}{(i\omega + \mu - fg^2 t_{\mathbf{p}})}. \end{aligned} \quad (18)$$

В рамках используемого логарифмического приближения одночастичную функцию Грина (17) заменим соответствующим полюсным приближением

$$G_{\omega}^{\alpha, \nu}(\mathbf{p}) \approx \frac{g_{\alpha} g_{\nu}}{g^2 (i\omega + \mu - fg^2 t_{\mathbf{p}})}. \quad (19)$$

Подставляя выражения (18) и (19) в правые части уравнений (16) и (17), получим уравнения с разделяющимися переменными.

В случае совпадающих значений проекции полного спина, относящихся к начальным n -состояниям, то есть $\alpha = \alpha(n, m)$, $\beta = \beta(n, b)$, уравнение (16) имеет вид:

$$\Gamma_1(\alpha, \beta) = \frac{2T}{g^2} g_{\alpha} g_{\beta} \sum_{\mathbf{p}, \omega} \frac{t_{\mathbf{p}}}{(\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2)} \sum_{\eta, \nu} g_{\lambda} g_{\nu} \Gamma(\lambda, \nu). \quad (20)$$

Если же совпадают конечные m -состояния $\alpha = \alpha(n, m)$, $\beta = \beta(a, m)$, уравнение (17) переписывается следующим образом:

$$\Gamma_2(\alpha, \beta) = -\frac{2T}{g^2} g_{\alpha} b_{\beta} \sum_{\mathbf{p}, \omega} \frac{t_{\mathbf{p}}}{(\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2)} \sum_{\eta, \nu} g_{\lambda} b_{\nu} \Gamma(\lambda, \nu). \quad (21)$$

Совокупность уравнений (14), (20) и (21) можно представить единым образом:

$$\Gamma(\alpha, \beta) = S_{\alpha, \beta} \frac{2T}{g^2} g_{\alpha} g_{\beta} \sum_{\mathbf{p}, \omega} \frac{t_{\mathbf{p}}}{(\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2)} \sum_{\eta, \nu} g_{\lambda} g_{\nu} \Gamma(\lambda, \nu), \quad (22)$$

где элементы матрицы $S(\alpha, \beta)$ отличны от нуля при следующих условиях:

$$S(\alpha(n, m), \beta(n, b)) = 1, \quad S(\alpha(n, m), \beta(a, m)) = -1. \quad (23)$$

Таким образом, $\Gamma(\alpha, \beta) = S_{\alpha, \beta} g_{\alpha} g_{\beta} Q$, а величина $Q \neq 0$ при условии

$$\begin{aligned} g^2 &= 2T \sum_{\mathbf{p}, \omega} \frac{t_{\mathbf{p}}}{(\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2)} \sum_{\alpha, \beta} S_{\alpha, \beta} g_{\alpha}^2 g_{\beta}^2 = \\ &= \sum_{\mathbf{p}} \frac{t_{\mathbf{p}} \text{th}(\xi_{\mathbf{p}}/2T)}{\xi_{\mathbf{p}}} \sum_{\alpha, \beta} S_{\alpha, \beta} g_{\alpha}^2 g_{\beta}^2. \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь и ниже величины $g^2 = \sum_k g_k^2$ и $\xi_{\mathbf{p}} = fg^2 t_{\mathbf{p}} - \mu$ определены для каждого целочисленного интервала изменения концентраций дырок h_d .

Поскольку интегрирование в (24) производится вблизи от поверхности Ферми $\xi_{\mathbf{p}} = 0$, то после введения плотности состояний на поверхности Ферми: $\nu_0(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(t_{\mathbf{p}} - \epsilon)$, уравнение (24) приобретает форму БКШ:

$$\Lambda \int_0^{\bar{\epsilon}} \frac{\text{th}(\xi/2T)}{\xi} d\xi = 1, \quad \Lambda = 2 \frac{\tau S_{\alpha, \beta} g_{\alpha}^2 g_{\beta}^2}{g^4 f} \nu_0(\tau), \quad (25)$$

где $\tau = \mu/f|t|g^2$, а энергетический параметр $\bar{\epsilon}$ не зависит от температуры и не может быть вычислен в рамках используемого логарифмического приближения. Таким образом, можно утверждать, что конечное значение T_c осуществляется во всей области концентраций, для которых $\mu > 0$. Граничной концентрации соответствует условие $\mu = 0$, для которого температура сверхпроводящего перехода обращается в нуль.

Для наиминимальных по энергии состояний с максимальным спином S коэффициенты разложения операторов рождения и уничтожения по X -операторам Хаббарда зависят только от числа дырочных состояний h и от коэффициентов векторного сложения:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\sigma, l_z}^+ &= \sum_{h=1}^{2l+1} \sqrt{h} \times \\ &\times \sum_{\Gamma_h, \Gamma_{h-1}} \langle S_{h-1}^z, \sigma | S_h^z \rangle \langle L_{h-1}^z, l_z | L_h^z \rangle \hat{X}^{\Gamma_{h-1}, \Gamma_h}. \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь

$$\langle S_{h-1}^z, \sigma | S_h^z \rangle = \sqrt{\frac{S_{h-1} + \sigma S_h^z + 1/2}{2S_{h-1} + 1}}, \quad (27)$$

а векторные коэффициенты $\langle L_{h-1}^z, l_z | L_h^z \rangle$ для d -электронов приведены в монографии [5].

Для каждого заданного интервала концентраций $[h-1] < h < [h]$ сумма квадратов спиновых коэффициентов (27) зависит только от максимального спина S_h :

$$b_S^2 = \sum_{S_h^z = -S_h}^{S_h^z = S_h} \frac{S_{h-1} + \sigma S_h^z + 1/2}{2S_{h-1} + 1} = \frac{2S_h + 1}{2}. \quad (28)$$

Сумма квадратов орбитальных коэффициентов также зависит только от L_h : $b_L^2 = (2L_h + 1)/(2l_d + 1)$, поэтому

$$g^2 = h \frac{(2S_h + 1)(2L_h + 1)}{2(2l_d + 1)}, \quad (29)$$

где $l_d = 2$.

Таблица 1

Интервалы $- >$	$1 < h < 2$	$2 < h < 3$	$3 < h < 4$	$4 < h < 5$
Переходы $- >$	${}^2D \rightarrow {}^3F$	${}^3F \rightarrow {}^4F$	${}^4F \rightarrow {}^5D$	${}^5D \rightarrow {}^6S$
$b_s^2 = (1 + 2S_h)/2$	3/2	2	5/2	3
$b_d^2 = (1 + 2L_h)/5$	7/5	7/5	1	1/5
$g^2 = hb_s^2b_d^2$	21/5	42/5	10	3
$(1 + 2S_h)/4S_h$	3/4	2/3	5/8	3/5
$W_{0k}^{(d)}(L_h)$	29/50	139/300	29/98	1/25
$S_{\alpha,\beta}g_\alpha^2g_\beta^2/h^2$	29/50 · 3/4	139/300 · 2/3	29/98 · 5/8	1/25 · 3/5
$S_{\alpha,\beta}g_\alpha^2g_\beta^2/g^4$	0.098	0.039	0.02959	0.0666

В соответствии с этими соотношениями и общим определением (22), (23) ненулевых элементов матрицы $S(\alpha, \beta)$ находим сумму

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha,\beta} S_{\alpha,\beta}g_\alpha^2g_\beta^2 = \\ & = h^2W_{0k}^{(d)}(L_h) \left\{ \sum_{L_z=-S_h+1}^{S_h} \frac{S_h + L_z}{2S_h} \frac{S_h - L_z + 1}{2S_h} - \right. \\ & \quad \left. - \sum_{L_z=-S_h+1}^{S_h-1} \frac{S_h + L_z}{2S_h} \frac{S_h - L_z}{2S_h} \right\} = \\ & = h^2W_{0k}^{(d)}(L_h) \frac{1 + 2S_h}{4S_h}. \end{aligned} \quad (30)$$

Таким образом, мы получили общую формулу для константы БКШ:

$$\begin{aligned} \Lambda & = \tilde{\lambda} \frac{\tau\nu_0(\tau)}{f}, \quad \tilde{\lambda} = 2 \frac{\sum_{\alpha,\beta} S_{\alpha,\beta}g_\alpha^2g_\beta^2}{g^4} = \\ & = 2W_{0k}^{(d)} \frac{(2l_d + 1)^2}{S_h(2S_h + 1)(2L_d + 1)^2}, \end{aligned} \quad (31)$$

где $l_d = 2$, $\tau = \mu/fg^2$, f – концевой множитель (см. (6) и ниже формулу (34)).

Орбитальный множитель $W_{0k}^{(d)}(L_h)$ есть сумма четвертых степеней орбитальных коэффициентов векторного сложения, взятых при $l_z = 0$. Используя явный вид коэффициентов векторного сложения [5] для заданных значений разности $k = L_h - L_{h-1}$, получим

$$\begin{aligned} W_{02}^{(d)}(L_h) & = \frac{2}{35} \frac{(2L_h + 1)(4L_h^4 - 8L_h^3 + 5L_h^2 - L_h + 3)}{(2L_h - 1)(2L_h - 3)L_h(L_h - 1)}, \\ & L_h = L_{h-1} + 2; \\ W_{01}^{(d)}(L_h) & = \frac{1}{35} \frac{(2L_h + 1)(L_h^2 + 3)(4L_h^2 - 7)}{L_h(L_h - 1)(2L_h - 1)(L_h + 1)}, \end{aligned}$$

$$L_h = L_{h-1} + 1;$$

$$\begin{aligned} W_{00}^{(d)}(L_h) & = \\ & = \frac{3}{35} \frac{(2L_h + 1)(4L_h^4 + 8L_h^3 - 11L_h^2 - 15L_h + 21)}{L_h(2L_h + 3)(2L_h - 1)(L_h + 1)}, \\ & L_h = L_{h-1}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_{0-1}^{(d)}(L_h) & = \\ & = \frac{1}{35} \frac{(2L_h + 1)(L_h^2 + 2L_h + 4)(4L_h^2 + 8L_h - 3)}{L_h(2L_h + 3)(L_h + 2)(L_h + 1)}, \\ & L_h = L_{h-1} - 1; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_{0-2}^{(d)}(L_h) & = \\ & = \frac{2}{35} \frac{(2L_h + 1)(4L_h^4 + 24L_h^3 + 53L_h^2 + 51L_h + 21)}{(L_h + 2)(L_h + 1)(2L_h + 5)(2L_h + 3)}, \\ & L_h = L_{h-1} - 2. \end{aligned} \quad (32)$$

Для четырех интересующих нас интервалов имеем таблицу 1.

Для того чтобы найти критическую концентрацию h_c , запишем уравнение состояния. В однопетлевом приближении оно записывается для каждого интервала изменения концентрации $[h_d] < h_d < [h_d] + 1$ в следующем виде:

$$h_d = [h_d] + R_N f_{(N-1,N)} \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}), \quad (33)$$

где концевые множители $f_{N-1,N}$ выражаются в виде линейной комбинации обратных кратностей вырождения R_{N-1} и R_N для $(N-1)$ - и N -дырочных состояний с максимальным спином:

$$f_{N-1,N} = \frac{h_d - [h_d]}{R_N} + \frac{[h_d] + 1 - h_d}{R_{N-1}}, \quad N = [h_d] + 1. \quad (34)$$

Критическая концентрация определяется условием $\mu = 0$, что в низкотемпературном пределе и для самодуальных решеток соответствует замене суммы по импульсам в формуле (33) на $1/2$.

Таблица 2

$1 < h < 2$	$2 < h < 3$	$3 < h < 4$	$4 < h < 5$
${}^2D \rightarrow {}^3F$	${}^3F \rightarrow {}^4F$	${}^4F \rightarrow {}^5D$	${}^5D \rightarrow {}^6S$
$52/31 < h_d < 2$	$18/7 < h_d < 3$	$184/53 < h_d < 4$	$130/31 < h_d < 5$

Отсюда с помощью (33) и (34) находим критическую концентрацию:

$$h_c = \frac{(N-1)R_{N-1} + NR_N}{R_{N-1} + R_N} = N - 1 + \frac{R_N}{R_{N-1} + R_N} = N - \frac{R_{N-1}}{R_{N-1} + R_N}. \quad (35)$$

С помощью этой формулы находим области существования сверхпроводимости для интервала $1 < h_d < 5$, см. таблицу 2. Система инвариантна относительно частично-дырочного преобразования, так что фазовую диаграмму для области $5 < h_d < 10$ можно получить с помощью преобразования частично-дырочной симметрии $h_d \rightarrow 10 - h_d$.

Как видно из рис.3, максимальное значение константы λ уменьшается с ростом числа дырочных со-

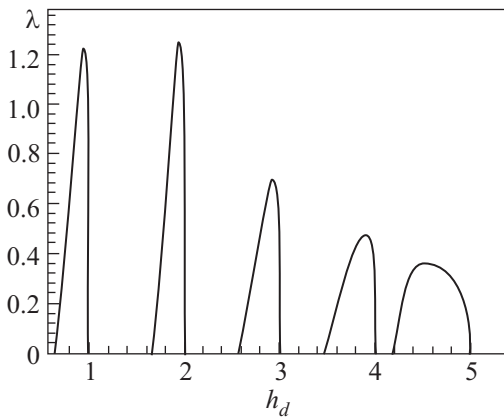


Рис.3. Зависимость константы БКШ от степени заполнения дырочной подзоны, вычисленная для полуэллиптической плотности состояний

стояний. При этом для каждого целочисленного интервала концентраций существует конечная область, внутри которой эффективная константа спаривания отрицательна, так что здесь сверхпроводимость не может существовать ни при каких температурах. Наличие таких областей является характерной особенностью изучаемого механизма сверхпроводимости.

Важно заметить, что в этой области, где амплитуда рассеяния электронов с противоположными спинами имеет отрицательный знак, следует ожидать

возникновения ферромагнитной неустойчивости. На рис.4 представлена концентрационная зависимость константы БКШ именно для областей $3 < h_d < 4$

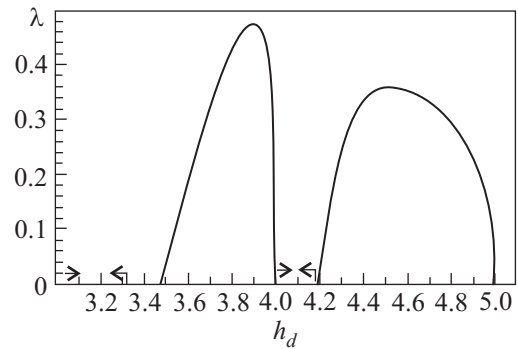


Рис.4. Зависимость константы БКШ от степени заполнения h_d . Стрелками обозначены области существования магнитного упорядочения [1]

и $4 < h_d < 5$, где в соединениях $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$, LiFeAs и $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$, $\text{FeSe}_{(1-x)}$ наблюдается высокотемпературная сверхпроводимость [6]. Стрелками отмечены области существования магнитной неустойчивости, теоретически обнаруженные в работе автора [1]. Наличие сверхпроводимости в конечной области концентрации дырок качественно согласуется с экспериментом [6]. Наиболее существенный вывод, который дает модель Хаббарда, состоит в том, что сверхпроводимость должна существовать внутри каждого целочисленного интервала изменения дырочных концентраций. Не менее важным следует считать вывод о наличии концентрационных областей, где сверхпроводимость отсутствует даже при наличии не зависящего от концентрации x вклада от электрон-фононного взаимодействия. Что же касается поляризационной части взаимодействия [7], то при наличии сильного электрон-электронного отталкивания соответствующий вклад может быть оценен по теории возмущений, что, по-видимому, не даст новых качественных результатов.

В заключение следует заметить, что основной результат настоящей работы (25) и (31) не содержит подгоночных параметров и допускает возможность обобщения и использования для системы p - и f -электронов.

Работа была поддержана грантом министерства образования и науки #РН ПВШ 2.1.1.5909.

1. Р. О. Зайцев, *Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма*, М.: Изд-во УРСС, 2004. Перевод: *Diagrammatic methods in the theory superconductivity and ferromagnetism*, Moscow: URSS, 2007.
2. R. O. Zaitsev, Phys. Lett. A **134**, 199 (1988).
3. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
4. Л. П. Горьков, ЖЭТФ **34**, 735 (1958).
5. Е. Кондон, Г. Шортли *Теория атомных спектров*, гл. III, М.: ИЛ, 1949.
6. Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев, *Высокотемпературные сверхпроводники на основе FeAs-соединений* Ижевск-Москва: Изд-во R&C Dynamics, 2010.
7. T. Takimoto, T. Hotta, and K. Ueda, Phys. Rev. B **69**, 104504 (2004).