Письма в ЖЭТФ, том 95, вып. 7, с. 423 – 428 © 2012 г. 10 апреля

Сверхпроводимость углеродных соединений σ-типа

Р. О. Зайцев[1)]

Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 16 января 2012 г.

После переработки 6 февраля 2012 г.

Изучается проблема сверхпроводимости σ-электронов в соединениях со структурой типа пчелиных сот. Уравнения сверхпроводимости и фазовая диаграмма получены на основе представления о том, что энергия Хаббарда является наибольшим энергетическим параметром.

Было обнаружено, что в ВТСП-системах имеется сильное электрон-электронное взаимодействие, которое приводит к так называемому кинематическому взаимодействию и в конечном счете определяет новый кинематический механизм сверхпроводимости [1, 2].

В системах с недозаполненной σ-оболочкой взаимодействие p-электронов, принадлежащих одному и тому же атому, имеет порядок 10 эВ [3]. По этой причине в системе σ-электронов должны проявляться эффекты кинематического взаимодействия. Ниже рассмотрена проблема возникновения сверхпроводящей неустойчивости при последовательном заполнении одно- и двухэлектронной σ-оболочки атомов, которые образуют решетку типа пчелиных сот.

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

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

В случае σ-электронов i, k независимо пробегают два значения: x и y. Индексы "a", "b" соответствуют различным подрешеткам.

Во всем втором ряду p-элементов и одноорбитальные, и разноорбитальные кулоновские матричные элементы имеют порядок 10 эВ и велики по сравнению с интегралами перескока к ближайшим соседям. По этой причине соответствующие значения кулоновских матричных элементов считаются бесконечными.

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

$$\hat{a}^+_{k,\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha g^{k,\sigma}_\alpha \hat{X}^\alpha_\mathbf{r}, \quad \hat{b}^+_{p,\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_\gamma g^{p,\sigma}_\gamma \hat{Y}^\gamma_\mathbf{r}, \qquad (2)$$

где $X^\alpha_\mathbf{r}$ – X-операторы ферми-типа, удовлетворяющие следующим перестановочным соотношениям:

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

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

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

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

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

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

При заданных номерах одночастичного перехода $\beta(m,s)$ каждый концевой множитель f_β равен сумме средних чисел заполнения начального и конечного состояния. В нашем приближении собственно-энергетическая часть есть сумма произведений концевого множителя и обобщенной матрицы перескоков, а также однопетлевой поправки:

$$f_{\alpha(s,m)} = n_s + n_m, \quad \Sigma^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) = f_\alpha t^\alpha_\beta(\mathbf{p}) + \Sigma^{\alpha,\beta}, \\ t^\alpha_\beta(\mathbf{p}) = g^{k,\sigma}_\alpha t^k_s(\mathbf{p}) g^{s,\sigma}_\beta. \qquad (6)$$

1) e-mail: Zaitsev_rogdai@mail.ru

Амплитуды двухчастичного рассеяния $\Gamma^0_{\alpha,\beta;\lambda,\nu}(\mathbf{p})$ 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.

В работе автора [2] было показано, что при заданных значениях проекции спина задача сводится к нахождению четырех независимых вершин, которые определяют простейший вклад в однопетлевые собственно-энергетические части.

Для написания уравнений сверхпроводимости запишем обратную функцию Грина с учетом наличия аномальных собственно-энергетических функций $\hat{\Sigma}^{an}$ и $\check{\Sigma}^{an}$ [4]:

$$\left[\hat{G}_\omega(\mathbf{p})\right]^{-1} = \begin{pmatrix} \left[\hat{G}^0_\omega(\mathbf{p})\right]^{-1} & -\hat{\Sigma}^{an} \\ -\check{\Sigma}^{(an)} & -\left[\hat{G}^0_{-\omega}(\mathbf{p})\right]^{-1} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Здесь $G^{(0)}$ – нулевая функция Грина, вычисленная в нуль-петлевом приближении для заданного положительного значения проекции спина:

$$\left\{\left[\hat{G}^0_\omega(\mathbf{p})\right]^{-1}\right\}^i_k = (i\omega_n + \mu)\delta_{ik} - f b_i b_k t_{\mathbf{p}}, \quad (8)$$

где $\omega_n = \pi T(2n+1)$, μ – химический потенциал, f – концевой множитель, определенный для каждого целочисленного интервала изменения концентраций, b_k – коэффициенты разложения операторов рождения и уничтожения по X-операторам Хаббарда.

Вычисление аномальных собственно-энергетических частей производится в соответствии с рис. 1a–d. Каждый из них содержит одну из вершин кинематического взаимодействия с множителем, пропорциональным произведению компоненты Фурье от интеграла перескока и аномальной гриновской функции. Соответствующие компоненты аномальной функции Грина определяются через обратную функцию Грина с помощью общего уравнения Дайсона–Горькова [5].

Собственно-энергетические части с противоположными знаками проекции спина отличаются знаком. Поэтому в согласии с рис. 1 можно написать

$$\left(\Sigma^{(\text{ан})}\right)^i_k = \mp 2 b_i T \sum_{\omega_n,\mathbf{p},s} t_{\mathbf{p}} b_s \left[G_{\omega_n}(\mathbf{p})\right]^s_k. \quad (9)$$

Знак “плюс” или “минус” берется в зависимости от того, какая проекция (начальная или конечная) сохраняется при продвижении вдоль всей диаграммы. Уравнения (7)–(9) образуют замкнутую систему однопетлевых уравнений сверхпроводимости.

Рассмотрим сначала область концентраций $0 < n_\sigma < 1$.

С учетом наличия переходов между пустым и двумя одночастичными ψ_x- и ψ_y-состояниями запишем обратную четырехкомпонентную функцию Грина:

$$\hat{G}^{-1}(\omega,\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} (E+\mu)\delta_{k_a,k'_a} & \left[\hat{T}_{ab}(\mathbf{p})\right]^{k_a}_{k'_b} & \Sigma^{(a)}_{an} & 0 \\ \left[\hat{T}_{ba}(\mathbf{p})\right]^{k_b}_{k_a} & (E+\mu)\delta_{k_b,k'_b} & 0 & \Sigma^{(b)}_{an} \\ \Sigma^{(a)}_{an} & 0 & (E-\mu)\delta_{k_a,k'_a} & -\left[\hat{T}_{ab}(-\mathbf{p})\right]^{k_a}_{k'_b} \\ 0 & \Sigma^{(b)}_{an} & -\left[\hat{T}_{ba}(-\mathbf{p})\right]^{k_b}_{k_a} & (E-\mu)\delta_{k_b,k'_b} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Используя параметры $\alpha = \left(\sqrt{3}ap_x + ap_y\right)/2$ и $\beta = \left(\sqrt{3}ap_x - ap_y\right)/2$, находим матрицу перескоков к ближайшим соседям [3]:

$$\hat{T}_{ab}(\mathbf{p}) = ft \times \begin{pmatrix} 1 + s^2 V_p(\mathbf{p}) & csV_m(\mathbf{p}) \\ csV_m(\mathbf{p}) & c^2 V_p(\mathbf{p}) \end{pmatrix},$$

где t – интеграл перескока, $f = 1 - 3n/4$ – концевой множитель,

$$V_p(\mathbf{p}) = \exp(i\alpha) + \exp(i\beta), \quad V_m(\mathbf{p}) = \exp(i\alpha) - \exp(i\beta), \quad (11)$$

$$c = \sqrt{3}/2, \quad s = 1/2, \quad \hat{T}_{ba}(\mathbf{p}) = \hat{T}^+_{ab}(\mathbf{p}).$$

Аномальная собственно-энергетическая часть выражается через величину параметра порядка $Q_a = Q_b = Q$:

$$\hat{\Sigma}^{(a)}_{an} = \hat{\Sigma}^{(b)}_{an} = \begin{pmatrix} Q & 0 \\ 0 & Q \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Запишем уравнение для нахождения величины Q в однопетлевом приближении (см. рис. 1):

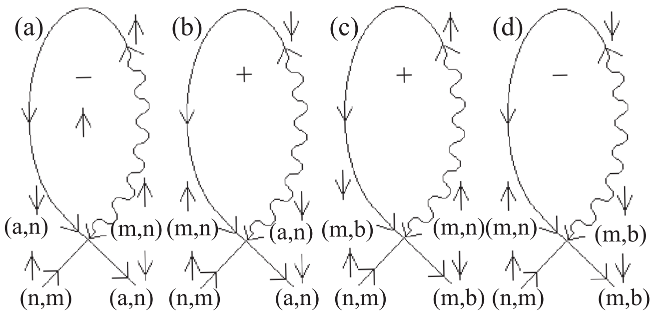

Рис. 1. Графическое изображение аномальной собственно-энергетической части при заданной проекции m- или n-состояний

$$Q{=}2tT\sum_{\mathbf{p}\omega}\left\{c^2V_p(\mathbf{p})\left[G_\omega(\mathbf{p})\right]_{3,5}+csV_m(\mathbf{p})\left[G_\omega(\mathbf{p})\right]_{4,5}\right\}. \tag{13}$$

В нормальной фазе (при $Q = 0$) в системе имеется четыре неперекрывающиеся ветви спектра:

$$\xi^{\pm}_{\mathbf{p}} = \pm\frac{1}{2}ft\sqrt{3+2\cos\alpha+2\cos\beta+2\mathrm{cos}(\alpha-\beta)}-\mu,$$

$$\xi^{\pm} = \pm\frac{3}{2}ft-\mu. \tag{14}$$

Две первые ветви отличаются от спектра π-электронов только множителем $1/2$. Кроме того, $f = 1-3n/4$, что соответствует четырехкратному вырождению одночастичных атомных состояний.

Для нахождения температуры сверхпроводящего перехода запишем правую часть (13) в линейном приближении по величине Q. В результате находим

$$1 = 2T\sum_{\omega_n,\nu,\mathbf{p}}\frac{W(\mathbf{p},\omega_n,\mu)}{\prod_k[\omega_n^2+(\xi^{(\nu)}_{\mathbf{p}})^2]} =$$

$$=\sum_{\nu,\mathbf{p}}\frac{A_\nu(\mathbf{p})}{\xi^{(\nu)}_{\mathbf{p}}}W(\mathbf{p},\xi^{(\nu)}_{\mathbf{p}},\mu)\mathrm{th}\left(\xi^{(\nu)}_{\mathbf{p}}/2T\right). \tag{15}$$

Выражение для $W(\mathbf{p},\omega_n,\mu)$ имеет вид полинома по ω_n. Однако в простейшем квазиклассическом приближении достаточно ограничиться вычислением этой функции при $\omega_n = 0$.

Далее мы используем возможность перехода в правой части (15) от переменных α,β к переменным $s = \cos\alpha+\cos\beta$, $\epsilon = \cos\alpha+\cos\beta+\cos(\alpha-\beta)$, $h = \cos\alpha\cos\beta$ и $\mu = \tau/ft$:

$$W(\mathbf{p},0,\mu) = \tau f^6t^7\frac{3}{64}\Pi(\tau,s,\epsilon),\ \ h = h(\epsilon,s) = \frac{(1+\epsilon)^2}{s-1-\epsilon}, \tag{16}$$

$$\Pi(\tau,s,\epsilon) = 16\left(2s^2+2+2s+h\right)\tau^4+$$

$$+8\left[(6\epsilon+5)h+7\epsilon^2+(-s+14)\epsilon+4s^2+7s+4\right]\tau^2+$$

$$+24h^2+(93+36\epsilon)h+18\epsilon^2+(6s+60)\epsilon+84+6s^2+36s. \tag{17}$$

Замечая, что на поверхности Ферми $\tau = (1/2)\sqrt{3+3\epsilon}$, получим

$$\Pi[\tau = (1/2)\sqrt{3+2\epsilon},s,\epsilon] = \tilde{\Pi}(s,\epsilon) =$$

$$= 4[(2\epsilon^2+12+10\epsilon)s^2++(13\epsilon+\epsilon^2+24)s+$$

$$+(27+7\epsilon^3+43\epsilon+31\epsilon^2)+6h^2+(33+7\epsilon^2+26\epsilon)h]. \tag{18}$$

Константа БКШ имеет вид произведения плотности состояний, вычисленной на поверхности Ферми, и безразмерной константы λ, которая определяется через выражение (18):

$$\lambda(\epsilon) = \frac{3}{16}\left[(2\epsilon^2+12+10\epsilon)\frac{\nu_2(\epsilon)}{\nu_0(\epsilon)}+\right.$$

$$+(13\epsilon+\epsilon^2+24)\frac{\nu_1(\epsilon)}{\nu_0(\epsilon)}+27+7\epsilon^3+43\epsilon+31\epsilon^2+$$

$$\left.+6\frac{R_2(1+\epsilon)}{\nu_0(\epsilon)}+(33+7\epsilon^2+26\epsilon)\frac{R_1(1+\epsilon)}{\nu_0(\epsilon)}\right]. \tag{19}$$

В области значений $-3/2<\epsilon<3$ имеем интегралы

$$\nu_k(\epsilon) = \int\limits_{-1+\max(\epsilon,-\sqrt{3+2\epsilon})}^{-1+\sqrt{3+2\epsilon}}\frac{(s^k/\pi^2)ds}{\sqrt{(-\epsilon+s+1)(-2\epsilon+s^2+2s-2)(-1-\epsilon+s)}},$$

$$R_k(x) = \int\limits_{-1+\max(\epsilon,-\sqrt{3+2\epsilon})}^{-1+\sqrt{3+2\epsilon}}\frac{(x^{2k}/\pi^2)ds}{(s-x)^k\sqrt{(-\epsilon+s+1)(-2\epsilon+s^2+2s-2)(-1-\epsilon+s)}}. \tag{20}$$

Каждое из этих выражений представляется в виде линейной комбинации полных эллиптических интегралов I, II и III рода. Поэтому окончательные результаты представляются в аналитической форме. Они приведены на рис. 2.

Интересующая нас часть плотности состояний, соответствующая заполнению верхней антисвязывающей части поверхности Ферми, имеет вид:

$$\rho^{(+)}(\epsilon) = \frac{4\nu_0(\epsilon)}{(ft)^7(3+2\epsilon)(3-\epsilon)^2},\quad f = 1-\frac{3}{4}n_\sigma. \tag{21}$$

В результате находим константу БКШ:

$$\Lambda(\epsilon) = \frac{3}{4f(\epsilon)(3+2\epsilon)(3-\epsilon)^2}[(2\epsilon^2+12+10\epsilon)\nu_2(\epsilon)+$$

$$+(13\epsilon+\epsilon^2+24)\nu_1(\epsilon)+(27+7\epsilon^3+43\epsilon+31\epsilon^2)\nu_0(\epsilon)+$$

$$+6R_2(1+\epsilon)+(33+7\epsilon^2+26\epsilon)R_1(1+\epsilon)]. \tag{22}$$

Электронная концентрация n_σ определяется через интегралы от плотности состояний $\nu_0(\epsilon)$, относящейся к пустой решетке:

$$n_\sigma = n_\sigma(\epsilon) = 4\frac{V_\mp(\epsilon)}{4+3V_\mp(\epsilon)}, \quad f(\epsilon) = \frac{4}{4+V_\mp(\epsilon)}. \quad (23)$$

При этом в области $-3/2 < \epsilon < -1$ имеем

$$V_-(\epsilon) = 2 + W_-(\epsilon), \quad W_-(\epsilon) = \int\limits_{-3/2}^{\epsilon} \nu_0^{(-)}(z)dz. \quad (24a)$$

При дальнейшем заполнении $(-1 < \epsilon < 3)$:

$$V_+(\epsilon) = \frac{9}{4} + W_+(\epsilon), \quad W_+(\epsilon) = \int\limits_{-1}^{\epsilon} \nu_0^{(+)}(z)dz. \quad (24b)$$

Таким образом, мы находим параметрическую зависимость λ и Λ от плотности n_σ (рис. 2).

Функция $\lambda(n_\sigma)$ обращается в нуль в крайних точках: при $n_- = 0.8$ и $n_+ = 12/13 \approx 0.923$. Вне этого интервала $\Lambda < 0$ и сверхпроводимость отсутствует. Максимальное значение достигается в вановской особой точке при $n_\sigma = 36/43 \approx 0.837$. В экспоненциально узкой области вблизи этой точки (отмечена штриховой линией на рис. 2) однородное состояние становится неустойчивым. Наступает расслоение, и возникают так называемые страйпы.

В области $1 < n_\sigma < 2$ система резонирует между четырьмя одночастичными состояниями со спином 1/2 и тремя наинизшими состояниями со спином 1. В соответствии с этим каждый оператор рождения или уничтожения представляется в виде линейной комбинации двух X-операторов Хаббарда:

$$\begin{aligned} \hat{a}^+_{x\sigma} &= \hat{X}^{y\sigma|\mathrm{II}(\sigma)} + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{X}^{y-\sigma|\mathrm{II}(0)}, \\ \hat{a}^+_{y\sigma} &= -\hat{X}^{x\sigma|\mathrm{II}(\sigma)} - \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{X}^{x-\sigma|\mathrm{II}(0)}. \end{aligned} \quad (25)$$

Концевой множитель $f = (n+2)/12$. Обратная одночастичная функция Грина представляется в виде матрицы 16×16:

$$\hat{G}^{-1}(\omega, \mathbf{p}) = \begin{pmatrix} (E+\mu)\delta_{k_a,k'_a} & -\left[\hat{T}_{ab}(\mathbf{p})\right]^{k_a}_{k'_b} & \Sigma^{(a)}_{an} & 0 \\ -\left[\hat{T}_{ba}(\mathbf{p})\right]^{k_b}_{k_a} & (E+\mu)\delta_{k_b,k'_b} & 0 & \Sigma^{(b)}_{an} \\ \Sigma^{(a)}_{an} & 0 & (E-\mu)\delta_{k_a,k'_a} & \left[\hat{T}_{ab}(-\mathbf{p})\right]^{k_a}_{k'_b} \\ 0 & \Sigma^{(b)}_{an} & \left[\hat{T}_{ba}(-\mathbf{p})\right]^{k_b}_{k_a} & (E-\mu)\delta_{k_b,k'_b} \end{pmatrix}, \quad (26)$$

$$\hat{T}_{ab}(\mathbf{p}) = ft \times \begin{pmatrix} c^2V_p(\mathbf{p})a_1^2 & c^2V_p(\mathbf{p})a_1a_2 & csV_m(\mathbf{p})a_1a_3 & csV_m(\mathbf{p})a_1a_4 \\ c^2V_p(\mathbf{p})a_1a_2 & c^2V_p(\mathbf{p})a_2^2 & csV_m(\mathbf{p})a_2a_3 & csV_m(\mathbf{p})a_2a_4 \\ csV_m(\mathbf{p})a_1a_3 & csV_m(\mathbf{p})a_2a_3 & [1+s^2V_p(\mathbf{p})]a_3^2 & [1+s^2V_p(\mathbf{p})]a_3a_4 \\ csV_m(\mathbf{p})a_1a_4 & csV_m(\mathbf{p})a_2a_4 & [1+s^2V_p(\mathbf{p})]a_3a_4 & [1+s^2V_p(\mathbf{p})]a_4^2 \end{pmatrix},$$

$$V_p(\mathbf{p}) = \exp(-i\alpha) + \exp(-i\beta), \quad V_m(\mathbf{p}) = \exp(-i\alpha) - \exp(-i\beta),$$

$$c = \sqrt{3}/2, \quad s = 1/2, \quad a_1 = -a_3 = 1, \quad a_2 = -a_4 = \sqrt{2}/2, \quad \hat{T}_{ba}(\mathbf{p}) = \hat{T}^+_{ab}(\mathbf{p}). \quad (27)$$

Различные компоненты аномальной собственно-энергетической части отличаются только произведениями множителей a_ia_k и выражаются через величину параметра порядка $Q_a = Q_b = Q$:

$$\hat{\Sigma}^{(a)}_{an} = \hat{\Sigma}^{(b)}_{an} = \begin{pmatrix} 0 & -a_1a_2Q & 0 & 0 \\ -a_1a_2Q & a_2^2Q & 0 & a_2a_4R \\ 0 & 0 & 0 & -a_3a_4Q \\ 0 & a_4a_2R & -a_3a_4Q & a_4^2Q \end{pmatrix}. \quad (28)$$

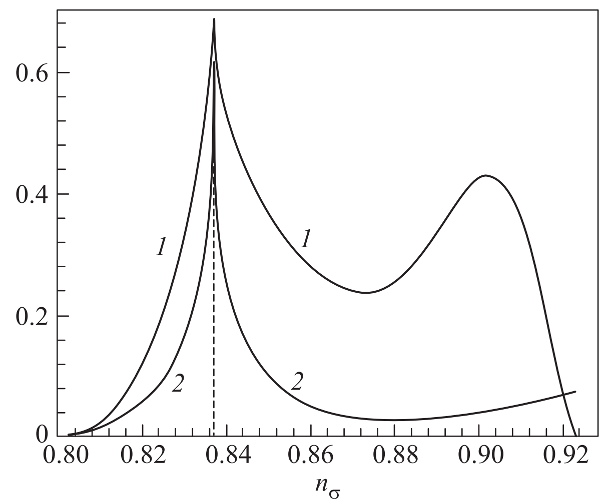

Рис. 2. Безразмерная константа λ в зависимости от концентрации σ-электронов ($0 < n_\sigma < 1$) (*1*). Концентрационная зависимость константы БКШ (*2*)

Уравнение для нахождения величины Q имеет вид:

$$a_1 a_2 Q =$$

$$= tT \sum_{\mathbf{p}\omega} \left(c^2 V_p(\mathbf{p}) a_1 \left\{ a_1 \left[G_\omega(\mathbf{p})\right]_{5,10} + a_2 \left[G_\omega(\mathbf{p})\right]_{6,10} \right\} + \right.$$

$$\left. + csV_m(\mathbf{p}) a_1 \left\{ a_3 \left[G_\omega(\mathbf{p})\right]_{7,10} + a_4 \left[G_\omega(\mathbf{p})\right]_{8,10} \right\} \right). \tag{29}$$

Уравнения для недиагональных по кристаллическим индексам величин R в пределе $T \to T_c$ приводят к выражениям, которые нечетны по импульсам. В конечном случае при интегрировании они обращаются в нуль. Поэтому сразу положим $R = 0$.

Окончательные результаты только множителями отличаются от того, который мы имели в области $0 < n_\sigma < 1$. Так, выражение для константы λ приводится к виду

$$\tilde{\lambda}(\epsilon) = \frac{729}{1024} \left[(2\epsilon^2 + 12 + 10\epsilon) \frac{\nu_2(\epsilon)}{\nu_0(\epsilon)} + \right.$$

$$+ (13\epsilon + \epsilon^2 + 24) \frac{\nu_1(\epsilon)}{\nu_0(\epsilon)} + 27 + 7\epsilon^3 + 43\epsilon + 31\epsilon^2 +$$

$$\left. + 6 \frac{R_2(1+\epsilon)}{\nu_0(\epsilon)} + (33 + 7\epsilon^2 + 26\epsilon) \frac{R_1(1+\epsilon)}{\nu_0(\epsilon)} \right]. \tag{30}$$

Для области заполнения антисвязывающей подзоны константа БКШ представляется в виде, аналогичном (22):

$$\tilde{\Lambda}(\epsilon) = \frac{1}{4f(\epsilon)(3+2\epsilon)(3-\epsilon)^2} \times$$

$$\times \left[(2\epsilon^2 + 12 + 10\epsilon)\nu_2(\epsilon) + (13\epsilon + \epsilon^2 + 24)\nu_1(\epsilon) + \right.$$

$$+ (27 + 7\epsilon^3 + 43\epsilon + 31\epsilon^2)\nu_0(\epsilon) + 6R_2(1+\epsilon) +$$

$$\left. + (33 + 7\epsilon^2 + 26\epsilon) R_1(1+\epsilon) \right], \tag{31}$$

где концевой множитель f определяется через концентрацию электронов.

Таким образом, в плане зависимости от параметра ϵ величина $\tilde{\lambda}(\epsilon)$ только множителем $243/64 \approx 3.8$ отличается от величины $\lambda(\epsilon)$ (20), относящейся к области $0 < n < 1$.

Для установления зависимости $n_\sigma(\epsilon)$ запишем уравнение состояний, относящееся к нормальной фазе:

$$n = 1 + \frac{3}{4} f \sum_{k,\mathbf{p}} n_F(\xi^k_{\mathbf{p}}),$$

$$\xi^{\pm}_{\mathbf{p}} = \pm \frac{3}{4} ft \sqrt{3 + 2\cos\alpha + 2\cos\beta + 2\cos(\alpha - \beta)} - \mu,$$

$$\xi^{\pm} = \pm \frac{9}{4} ft - \mu, \quad f = \frac{n+2}{12}. \tag{32}$$

В низкотемпературном пределе это уравнение переписывается через функции параметра ϵ:

$$n_\sigma = n(\epsilon) = 2 \frac{8 + U^{(+)}_{\mp}(\epsilon)}{16 - U^{(+)}_{\mp}(\epsilon)}, \quad f(\tau) = \frac{4}{16 - U^{(+)}_{\mp}(\epsilon)}. \tag{33}$$

Для положительных значений химического потенциала, когда заполнены две нижние подзоны, имеем

$$U^{(+)}_{-}(\epsilon) = 2 + \int\limits_{-3/2}^{\epsilon} \nu_0^{(-)}(z)dz, \tag{34a}$$

где $-3/2 < \epsilon < -1$.

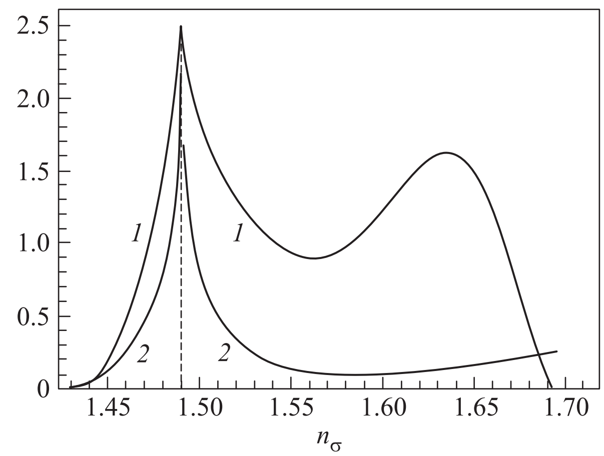

Рис. 3. Безразмерная константа λ в зависимости от концентрации σ-электронов ($1 < n_\sigma < 2$) (*1*). Концентрационная зависимость константы БКШ ($\Lambda = \lambda\rho$) (*2*)

При дальнейшем заполнении можно записать

$$U_{+}^{(+)}(\epsilon) = \frac{9}{4} + \int_{-1}^{\epsilon} \nu_0^{(+)}(z) dz, \qquad (34b)$$

где $-1 < \epsilon < 3$.

Сравнение кривых, изображенных на рис. 2 и 3, показывает, что они имеют одинаковые особенности. Сверхпроводимость может существовать в достаточно узком интервале концентраций, которые соответствуют заполнению антисвязывающих делокализованных состояний. В этом смысле σ-электроны качественно не отличаются от π-электронов [4]. Концентрационная зависимость константы БКШ имеет резкий максимум, обусловленный особенностью ван-Хова. Однако в узкой области вблизи этого максимума система переходит в состояние расслоения. Это фактически ограничивает величину максимально возможной температуры сверхпроводящего перехода, которую можно оценить по обычной формуле БКШ: $T_c = \bar{\epsilon} \exp(-1/\Lambda)$.

Работа была выполнена в рамках гос.задания # 2.1947.2011, по теме НИР Г306.

1. R. O. Zaitsev, Phys. Lett. A **134**, 199 (1988).
2. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **140**, 984 (2011).
3. А. А. Левин, *Введение в квантовую химию твердого тела*, М.: Изд-во химия, 1974 [A. A. Levin, *Solid state quantum chemistry*, N.Y.: Mc Grow-Hill, 1977].
4. Р. О. Зайцев, Письма в ЖЭТФ **94**, 224 (2011).
5. Л. П. Горьков, ЖЭТФ **34**, 735 (1958).