



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

Д17-88-76

Б-744  
Н.Н.Боголюбов, В.Л.Аксенов, Н.М.Плакида

**К ТЕОРИИ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ  
В МОДЕЛИ ОКСИДНЫХ МЕТАЛЛОВ**

Направлено в Оргкомитет Международной конференции по высокотемпературным сверхпроводникам, материалам и механизмам сверхпроводимости, Швейцария, 29 февраля - 4 марта 1988 года.

**1988**

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время было предложено большое число теоретических моделей для объяснения механизмов возникновения высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП), открытой Беднорцем и Мюллером<sup>/1/</sup>. Условно эти модели можно разделить на два класса: в первом из них рассматривается традиционный электрон-фононный механизм спаривания, который подтверждается наблюдением изотопического эффекта в купрате лантана — стронция, а во втором классе основное внимание уделяется учету кулоновских корреляций, как правило, в рамках простой модели Хаббарда (см.<sup>/2/</sup>). Экспериментальные исследования подтверждают наличие сильных кулоновских корреляций для валентных электронов в 3d-состояниях на ионах  $\text{Cu}^{2+}$  и в 2p-состояниях на ионах  $\text{O}^{2-}$ , гибридизация которых определяет сильно анизотропный электронный спектр. Помимо этого структурная неустойчивость этих соединений (структурные переходы, мягкие моды и т.д.) приводит к сильному ангармонизму колебаний ионов решетки, что также может быть причиной появления ВТСП (см.<sup>/3/</sup>). Для построения последовательной теории сверхпроводимости в новых оксидных соединениях необходим одновременный учет всех этих особенностей электронного и фононного спектров. В настоящей работе предложен такой подход в рамках упрощенной модели оксидных металлов.

## 2. ПОЛЯРНАЯ МОДЕЛЬ МЕТАЛЛА

Ввиду локализованного характера волновых функций электронов в 3d- и 2p-состояниях наиболее обоснованным методом построения электронного спектра системы является метод последовательной ортогонализации атомных одноэлектронных функций, предложенный Н.Н.Боголюбовым<sup>/4/</sup> в рамках полярной модели металла<sup>/5/</sup>.

Рассмотрим для простоты 2D-решетку в базисной плоскости  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  (или  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ), образованную ионами модели в узлах  $\vec{r} = n_1 \vec{a}_x + n_2 \vec{a}_y$  и ионами кислорода в узлах  $\vec{g}_\alpha = \vec{r} + \vec{r}_\alpha$ , где  $2\vec{r}_{x,y} = \vec{a}_{x,y}$ . Учитывая расщепление 3d-состояний на ионах меди в кристаллическом поле тетрагональной симметрии, будем рассматривать лишь d( $x^2 - y^2$ )-состояние электронов с энергией  $\epsilon_d^\circ$  и волновой функцией  $\Psi(\vec{r}, \vec{r})$  на узлах  $\vec{r}$ . 2p-состояния электронов с энергией  $\epsilon_p^\circ$  на узлах  $\vec{g}_\alpha = (\vec{g}_x, \vec{g}_y)$  будем описывать волновыми функциями  $\phi_\alpha(\vec{g}_\alpha, \vec{r})$  с симметрией ( $p_x, p_y$ ) соответственно. Пренебрегая всеми интегралами перекрытия кроме

ближайших соседей, для ортогонализированных волновых функций на узлах  $\vec{f}, \vec{g}_\alpha$  во втором порядке получим

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(\vec{f}, \vec{r}) &= (1 + \frac{3}{2}S^2) \Psi(\vec{f}, \vec{r}) - \frac{1}{2}S \sum_{\pm \vec{r}_\alpha} \phi_\alpha(\vec{f} + \vec{r}_\alpha, \vec{r}) + \frac{3}{8}S^2 \sum_{\pm \vec{a}_\alpha} \Psi(\vec{f} + \vec{a}_\alpha, \vec{r}), \\ \tilde{\phi}_\alpha(\vec{g}_\alpha, \vec{r}) &= \phi_\alpha(\vec{g}_\alpha, \vec{r}) - \frac{1}{2}S[\Psi(\vec{f}, \vec{r}) + \Psi(\vec{f} + \vec{a}_\alpha, \vec{r})] + \\ &+ \frac{3}{8}S^2 \sum_{\pm \vec{r}} \{ \phi_\beta(\vec{f} + \vec{r}_\beta) + \phi_\beta(\vec{f} + \vec{a}_\alpha + \vec{r}_\beta) \}, \end{aligned} \quad (2)$$

где интеграл неортогональности

$$S = \langle \Psi(\vec{f}, \vec{r}) | \phi_\alpha(\vec{f} \pm \vec{r}_\alpha, \vec{r}) \rangle \quad (3)$$

предполагается малой величиной  $S \ll 1$ .

Пользуясь ортонормированным (с точностью до  $S^2$ ) базисом одночастичных состояний (1), (2), полный гамильтониан системы  $H = H_0 + V$  можем записать в представлении вторичного квантования в виде

$$H = \sum_{ij\sigma} L_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijk\ell} \sum_{\sigma\sigma'} V(ij|k\ell) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma'}^+ a_{k\sigma} a_{\ell\sigma'}, \quad (4)$$

где функции

$$L_{ij} = \{ L_{fg}, L_{ff'}, L_{g,g'} \}$$

определяются энергией  $\epsilon_d^o, \epsilon_p^o$  и матричными элементами одночастичной части  $H_0$  гамильтониана  $H$  электронов в кристаллическом поле по волновым функциям (1), (2), а функция  $V(ij|k\ell)$  — матричными элементами кулоновского взаимодействия  $V(\vec{r} - \vec{r}')$  электронов. Отметим, что интеграл переноса  $L_{fg} \sim S$ , а  $L_{ff'}$  и  $L_{g,g'}$  помимо перенормированных энергий  $\epsilon_d$  при  $f = f'$  и  $\epsilon_p$  при  $g = g'$  содержат члены  $\sim S^2$  для следующих за ближайшими соседями узлов (полное представление см. в <sup>6/</sup>). При учете первых членов по  $S$  приходим к обобщенной модели Хаббарда:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i\sigma} \epsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{i \neq j} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} U_i n_{i\sigma} n_{i-\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma\sigma'} V_{ij} n_{i\sigma} n_{j\sigma'}, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $t_{ij} = t_{fg} - S$ , а  $U_i = (U_d, U_p)$ ,  $V_{ij} = V_{fg}$  — нулевого порядка по  $S$ . Учет колебаний решетки (при замене  $\vec{f} \rightarrow \vec{R}_f = \vec{f} + \vec{u}_f$ ,  $\vec{g}_\alpha \rightarrow \vec{R}_{g_\alpha} = \vec{g}_\alpha + \vec{u}_{g_\alpha}$ ,  $\vec{u}_f, \vec{u}_{g_\alpha}$  — смещения ионов) приводит к электрон-фононному взаимодействию в гамильтониане (4) или (5). Гамильтониан (4),

(5) может быть обобщен при учете большего числа атомных состояний, например  $(3z^2 - r^2)$ -состояний на узлах  $f$  и  $p_z$  — на узлах  $g_\alpha$  и более сложной решетки для  $YBa_2Cu_3O_7$ . Поскольку все матричные элементы в (4) определяются лишь небольшим числом микроскопических параметров, гамильтониан (4) или (5) составляет основу для последовательного построения электронного спектра оксидных металлов и исследования в них ВТСП. В частности, применение операторной формы теории возмущений по  $S$  в (4) или (5) (см. <sup>4/</sup>) позволяет получить эффективные обменные гамильтонианы (см. <sup>2/</sup>) с интегралом обмена  $J \sim t^2/U$  в случае сильной корреляции  $t \ll U$  (см. <sup>6/</sup>).

### 3. ФУНКЦИИ ГРИНА

Для исследования спектра электронных возбуждений и получения уравнений сверхпроводимости воспользуемся методом уравнений движения для двухвременных функций Грина <sup>7/</sup>, записанных в матричном виде

$$G_{ij}(t - t') = \langle\langle \Psi_{i\sigma}(t); \Psi_{j\sigma}^+(t') \rangle\rangle, \quad (6)$$

где приняты обозначения Намбу

$$\Psi_{i\sigma} = \begin{pmatrix} a_{i\sigma} \\ a_{i-\sigma}^+ \end{pmatrix}, \quad \Psi_{j\sigma}^+ = (a_{j\sigma}^+ a_{j-\sigma}), \quad i = \{\vec{f}, \vec{g}_\alpha\}. \quad (7)$$

Рассмотрим сначала модель (5) с электрон-фононным взаимодействием, связанным с флуктуацией интеграла переноса:  $t_{ij} \rightarrow t_{ij} + t_{ij}^\mu u_{ij}^\mu$  при колебаниях ионов  $u_{ij}^\mu = (\vec{u}_i - \vec{u}_j)_\mu$ . Пользуясь уравнениями движения для операторов (7), приходим к системе уравнений для фурье-компонент функций Грина (6) (см. <sup>8/</sup>):

$$(\omega r_0 - \epsilon_i r_3) G_{ij}(\omega) = \delta_{ij} r_0 + \sum_k t_{ik} r_3 G_{kj}(\omega) + \quad (8)$$

$$+ \sum_k t_{ik}^\mu r_3 \langle\langle u_{ik}^\mu \Psi_{k\sigma} | \Psi_{j\sigma}^+ \rangle\rangle + \sum_{k\sigma'} V_{ik}^{\sigma\sigma'} \langle\langle n_{k\sigma'} \Psi_{i\sigma} | \Psi_{j\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega,$$

где

$$r_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad r_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad V_{ik}^{\sigma\sigma'} = V_{ik} r_3 + U_i \delta_{ik} \begin{pmatrix} \delta_{-\sigma'\sigma} & 0 \\ 0 & \delta_{\sigma'\sigma} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

В зонном пределе ( $t_{ik} \gg U_i, V_{ik}$ ) кулоновское взаимодействие будем рассматривать по теории возмущений, вводя неприводимые части многофермионных операторов:

$$(n_{k\sigma'} a_{i\sigma})^{ir} = a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma} a_{i\sigma} -$$

$$-\{ \langle n_{k\sigma} \rangle a_{i\sigma} - \delta_{\sigma'\sigma} \langle a_{k\sigma}^+ a_{i\sigma} \rangle a_{k\sigma} + \delta_{\sigma'\sigma} \langle a_{k-\sigma} a_{i\sigma} \rangle a_{k-\sigma}^+ \}, \quad (10)$$

где помимо хартри-фоковских членов учитываются аномальные средние. Составляя далее уравнение движения для функции Грина от неприводимых частей операторов,  $\Gamma(t-t') = \langle \langle \{A(t)\}^{ir}; \Psi^+(t') \rangle \rangle$ , с помощью дифференцирования ее по второму времени  $t'$ , получим уравнение типа (8), где также введем операторы типа (10). В результате, собирая функции Грина от неприводимых частей в массовый оператор, получим уравнение Дайсона в виде

$$G_{ij}(\omega)^{-1} = \{ (\omega r_0 - \bar{\epsilon}_i r_3) \delta_{ij} - L_{ij} r_3 - \Sigma_{ij}^c - \Sigma_{ij}(\omega) \}, \quad (11)$$

где массовый оператор в приближении среднего поля:

$$\Sigma_{ij}^c = r_3 \{ -U_i \delta_{ij} \langle \Psi_{i-\sigma}^+ \Psi_{i\sigma}^+ \rangle + V_{ij} \langle \Psi_{i\sigma}^+ \Psi_{j\sigma}^+ \rangle \}, \quad (12)$$

$$\bar{\epsilon}_i = \epsilon_i + \sum_{k\sigma'} V_{ik} \langle n_{k\sigma'} \rangle,$$

а массовый оператор, обусловленный электрон-фононным и кулоновским взаимодействиями более высоких порядков имеет вид

$$\begin{aligned} \Sigma_{ij}(\omega) = & \sum_{kl} t_{ik}^\mu t_{jl}^\nu r_3 \langle \langle u_{ik}^\mu \Psi_{k\sigma} | \Psi_{l\sigma}^+ u_{lj}^\nu \rangle \rangle_\omega + \\ & + \sum_{kl} \sum_{\sigma'\sigma''} V_{ik}^{\sigma\sigma'} V_{jl}^{\sigma\sigma''} \langle \langle (n_{k\sigma} \Psi_{i\sigma})^{ir} | (\Psi_{j\sigma}^+ n_{l\sigma''})^{ir} \rangle \rangle_\omega. \end{aligned} \quad (13)$$

В следующем разделе обсуждается приближенное вычисление (13).

В другом пределе сильных кулоновских корреляций,  $t_{ij} \ll U_i$ , в качестве нулевого необходимо воспользоваться атомным пределом, а члены с интегралом переноса рассмотреть по теории возмущений. При этом необходимо рассматривать уравнение движения для многофермионных операторов в (8), имеющих смысл операторов Хаббарда /9/, например

$$[a_{i\sigma}(1-n_{i-\sigma}), H] = \epsilon_i a_{i\sigma}(1-n_{i-\sigma}) + \quad (14)$$

$$+ \sum_j t_{ij} \{ a_{i-\sigma} a_{i-\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{i-\sigma}^+ a_{i\sigma} a_{j-\sigma} + a_{i-\sigma} a_{i\sigma} a_{j-\sigma}^+ \}.$$

Возникающие в правой части (14) члены обусловлены кинематическим взаимодействием, связанным с ограничениями, налагаемыми проекционными операторами  $(1-n_{i-\sigma}, n_{i-\sigma})$ , выделяющими одночастичные и двухчастичные зоны. В диаграммной технике, построенной

на операторах Хаббарда, отдельным членам в (14) можно сопоставить определенные вершины (см. /10/). Чтобы учесть лишь члены первого порядка по  $t_{ij}$  в системе уравнений для функций Грина (6) и многочастичных функций от операторов типа  $n_{i-\sigma} a_{i\sigma}, (1-n_{i-\sigma}) a_{i\sigma}$  и т.д., в уравнениях (14) достаточно учесть лишь спаривание на разных узлах ( $i \neq j$ ) вида

$$\begin{aligned} a_{i-\sigma} a_{i-\sigma}^+ a_{j\sigma} & \rightarrow \langle a_{i-\sigma} a_{i-\sigma}^+ \rangle a_{j\sigma} - \langle a_{i-\sigma} a_{j\sigma} \rangle a_{i-\sigma}^+, \\ a_{i-\sigma} a_{i\sigma} a_{j-\sigma}^+ & \rightarrow \langle a_{i-\sigma} a_{i\sigma} \rangle a_{j-\sigma}^+ - \langle a_{i-\sigma} a_{j-\sigma}^+ \rangle a_{i\sigma}. \end{aligned} \quad (15)$$

В результате возникает замкнутая система уравнений для нормальных и аномальных функций Грина. Приведем здесь эту систему для простой одноузельной модели Хаббарда при  $U_i = U, V_{ij} = 0$  в (5) (см. /11/):

$$\begin{aligned} [1 - g(\omega) t(\vec{q})] G(\vec{q}, \omega) & = g(\omega) + \gamma(\omega) \Delta(\vec{q}) F(\vec{q}, \omega), \\ [1 - g(-\omega) t(\vec{q})] F(\vec{q}, \omega) & = -\gamma(-\omega) F^* - \gamma(-\omega) \Delta^*(\vec{q}) G(\vec{q}, \omega), \end{aligned} \quad (16)$$

$$\langle \langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle \rightarrow G(\vec{q}, \omega); \quad \langle \langle a_{i-\sigma}^+ | a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle \rightarrow F(\vec{q}, \omega),$$

где

$$g(\omega) = (1 - n/2) g_1(\omega) + (n/2) g_2(\omega), \quad \gamma(\omega) = g_1(\omega) - g_2(\omega),$$

$$g_1(\omega) = (\omega - \epsilon)^{-1}, \quad g_2(\omega) = (\omega - \epsilon - U)^{-1}$$

— функции Грина в атомном пределе,  $t_{ij} = 0$ .  $G(\vec{q}, \omega)$  и  $F(\vec{q}, \omega)$  — фурье-разложение функций Грина,  $t(\vec{q})$  — фурье-компонента интеграла переноса  $t_{ij}$ , а зависящая от волнового вектора щель  $\Delta(\vec{q})$  определяется уравнениями

$$\Delta(\vec{q}) = \Delta + t(\vec{q}) F; \quad (17)$$

$$\Delta = 2 \sum_j t_{ij} \langle a_{i\sigma} a_{j-\sigma} \rangle, \quad F = \langle a_{i-\sigma} a_{i\sigma} \rangle.$$

Параметры (17) связаны соотношением  $(2\epsilon + U)F = 2\Delta$ . Решение системы уравнений (16), (17) рассмотрено в разделе 5.

#### 4. ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Рассмотрим уравнение для функции Грина (11), пользуясь приближенным выражением для массового оператора (13) во втором порядке по электрон-фононному взаимодействию:

$$\sum_{ij}^{ph}(\omega) = \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{\omega - (\omega_1 + \omega_2)} \frac{1}{2} \left( \text{th} \frac{\omega_1}{2T} + \text{cth} \frac{\omega_2}{2T} \right) \times \quad (18)$$

$$\times \sum_{kl} t_{ik}^{\mu} t_{jl}^{\nu} \left[ -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle u_{ik}^{\mu} | u_{jl}^{\nu} \rangle \rangle_{\omega_2} \right] r_3 \left[ -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{kl}(\omega_1 + i\delta) \right] r_3.$$

Последний член в (23), описывающий кулоновское рассеяние, также может быть вычислен во втором порядке по  $V_{\sigma\sigma}^{ik}$  с помощью двухвременного расщепления корреляционных функций типа

$$\langle n_{k\sigma}(t) \Psi_{i\sigma}(t) \Psi_{j\ell}^+ n_{l\sigma'} \rangle \rightarrow \langle n_{k\sigma}(t) n_{l\sigma'} \rangle \langle \Psi_{i\sigma}(t) \Psi_{j\sigma} \rangle + \dots$$

При этом удастся учесть как процессы экранирования, так и процессы переноса заряда, возникающие в двухатомной системе, где  $i = (\vec{r}, \vec{g}_a)$ . Решая полученную систему уравнений в  $\vec{q}$ -пространстве, можно определить эффективное взаимодействие электронов, обусловленное электрон-фононным взаимодействием в (18). В результате приходим к известной самосогласованной системе уравнений для сверхпроводящей щели (см. /8/). Как отмечается в /3/, сильно ангармонические колебания ионов кислорода на связях Cu-O могут приводить к существенному увеличению константы связи и высоким значениям  $T_c \sim 100$  К при физически разумных параметрах модели оксидных сверхпроводников. При этом другие моды колебаний кислорода гармонического типа имеют высокую частоту,  $\omega \sim 600$  К, и соответственно малую величину константы связи,  $\lambda < 1$ , что обеспечивает лишь  $T_c \lesssim 40$  К /12/.

## 5. КИНЕМАТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

В пределе сильных кулоновских корреляций,  $U \gg t$ , в системе возникает притяжение дырок в нижней хаббардовской зоне при  $2/3 < n < 1$  или электронов в верхней хаббардовской зоне  $1 < n < 4/3$ , что может приводить к сверхпроводимости /10/. Рассмотрим уравнение для щели и температуры  $T_c$ , пользуясь полученной системой уравнений (16), (17). Вычисляя аномальные средние в (17) по функциям Грина в (16), получаем уравнение для параметра  $\Delta$  в виде (см. /11/)

$$\Delta = -\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{t(\vec{q}) U \Delta}{2\epsilon + U} \left\{ \frac{E_1^2(\vec{q}) - \epsilon^2 - (2\epsilon + U) U (1 - n/2)}{E_1(\vec{q}) [E_2^2(\vec{q}) - E_1^2(\vec{q})]} \text{th} \frac{E_1(\vec{q})}{2T} + \right. \quad (19)$$

$$\left. + \frac{E_2^2(\vec{q}) - \epsilon^2 - (2\epsilon + U) U (1 - n/2)}{E_2(\vec{q}) [E_1^2(\vec{q}) - E_2^2(\vec{q})]} \text{th} \frac{E_2(\vec{q})}{2T} \right\},$$

где

$$E_{1,2}^2(\vec{q}) = \frac{1}{2} [\epsilon_1^2(\vec{q}) + \epsilon_2^2(\vec{q})] \pm \frac{1}{2} \{ [\epsilon_1^2(\vec{q}) - \epsilon_2^2(\vec{q})]^2 - 4U^2 \Delta^2(\vec{q}) \}^{1/2}, \quad (20)$$

$$\epsilon_{1,2}(\vec{q}) = \epsilon + \frac{1}{2} [U + t(\vec{q})] \pm \frac{1}{2} \{ [U + t(\vec{q})]^2 - (1 - \frac{n}{2}) U t(\vec{q}) \}^{1/2}.$$

Энергия атомного уровня  $\epsilon$  отсчитывается от химического потенциала  $\mu$ :  $\epsilon = \epsilon_0 - \mu$ , который определяется из условия

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}\sigma} \langle n_{q\sigma} \rangle. \quad (21)$$

Уравнение (19) существенно упрощается в пределе  $U \rightarrow \infty$ , когда  $F = 2\Delta / (2\epsilon - U) \rightarrow 0$ . Для нижней зоны при  $n < 1$  получаем

$$1 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{(1 - n/2) t(\vec{q})}{E_2(\vec{q})} \text{th} \frac{E_2(\vec{q})}{2T}. \quad (22)$$

Решая далее систему уравнений (22), (21) для модельной плотности состояний с шириной зоны  $2W$ , находим выражение для  $T_c$  и определяем  $\Delta(T)$ . В логарифмическом приближении получаем /11/

$$T_c = \frac{4\gamma}{\pi} W \sqrt{\frac{n(n-1)}{2}} \exp \left\{ -\frac{2n}{3n-2} \right\} \quad (23)$$

и  $2\Delta(0) / T_c = 2\pi / \gamma \approx 3,5$ . Аналогичные уравнения можно получить для верхней зоны при  $1 < n < 4/3$ . При этом имеется симметрия между дырочным ( $n < 1$ ) и электронным случаями ( $n > 1$ ) при замене  $n \rightarrow 2 - n$ ,  $t(\vec{q}) \rightarrow -t(\vec{q})$ ,  $\epsilon_{1,2}(\vec{q}) \rightarrow -\epsilon_{2,1}(\vec{q})$ .

В целом результаты, полученные на основе метода уравнений движения для функций Грина /11/, согласуются с выводами теории /10/, основанной на диаграммной технике для хаббардовских операторов. В отличие от /10/, где возникают две щели  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$ , в нашем расчете имеется одна щель  $\Delta(\vec{q})$  с зависимостью от  $\vec{q}$  s-типа. Кроме того, показатель экспоненты в (23) имеет другую зависимость от  $n$  при той же самой величине критической концентрации  $x_c = 1 - n_c = 1/3$ ,  $T_c(n > n_c) = 0$ .

Таким образом, сильные кулоновские корреляции,  $U \gg t$ , приводят к дополнительному кинематическому взаимодействию для дырочных состояний  $2/3 < n < 1$  и электронных состояний  $1 < n < 4/3$ , которое обуславливает появление сверхпроводимости с достаточно высокой температурой перехода (23). В рамках предложенной схемы расчета нетрудно учесть кулоновское взаимодействие на разных узлах, электрон-фононное взаимодействие в виде (18), а также члены более высокого порядка по  $U, V$  аналогично (13). Влияние этих поправок на величину  $T_c$  предполагается рассмотреть в отдельной работе.

Резюмируя, отметим, что развитая в настоящей работе модель оксидного металла в рамках полярной модели позволяет из первых принципов вычислить параметры моделей (4) или (5). При этом метод уравнений движения для функций Грина дает возможность относительно просто получить уравнение для сверхпроводящей щели и  $T_c$  как в зонном, так и атомном пределах и исследовать роль различных механизмов ВТСП в рамках единого подхода. Применение развитой теории к новым сверхпроводникам на базе  $La_2CuO_4$  и  $YBa_2Cu_3O_7$  с учетом их реальной структуры, как нам представляется, позволит исследовать картину наблюдаемой в них ВТСП.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Bednors J.G., Muller K.M. – *Z. Phys. B.*, 1986, 64, p.189.
2. Fulde P. – *Physica Scripta*, 1987.
3. Plakida N.M., Aksenov V.L., Drechsler S.J.Lj – *Europhys. Lett.*, 1987, 4, p.1309.
4. Боголюбов Н.Н. *Лекції з квантової статистики*, Київ: Рад. школа, 1949. (Избранные труды. Киев: Наукова думка, 1970, т.2).
5. Shubin S.P., Wonsowsky S.V. – *Proc. Roy. Soc. A*, 1934, v.145, A854, p.159.
6. Плакида Н.М., Юшанхай В.Ю. ОИЯИ, P17-88-121, Дубна, 1988.
7. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. – *ДАН СССР*, 1959, 126, с.53.
8. Вуйичич Г.М., Куземский А.Л., Плакида Н.М. – *ТМФ*, 1982, 53, с.138; Kuzemsky A.L., Holas A., Plakida N.M. – *Physica*, 1983, 122B, p.168.
9. Hubbard J. – *Proc. Roy. Soc. A*, 1963, 276, p.238; *ibid.* 1964, 277, p.238.
10. Зайцев Р.О., Иванов В.А. – *ФТТ*, 1987, 29, с. 2554, с.31111.
11. Plakida N.M., Stasuk I.V. *JINR*, E17-88-96, Dubna, 1988.
12. Weber W. – *Phys. Rev. Lett.*, 1987, 58, p.1371; Weber W., Mattheiss L.F. – *Phys. Rev. B*, 1987, 36.

Рукопись поступила в издательский отдел  
28 января 1988 года.

Боголюбов Н.Н., Аksenov В.Л., Плакида Н.М. Д17-88-76  
К теории сверхпроводимости в модели оксидных металлов

Рассмотрена система сильносвязанных 3d- и 2p-электронов на основе полярной модели металла. С помощью метода функций Грина получены уравнения сверхпроводимости. Отмечено, что высокие  $T_c$  в оксидных металлах могут возникать за счет сильно ангармонических колебаний ионов кислорода, а также за счет кинематического притяжения электронов в случае сильных одноузельных кулоновских корреляций.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод авторов

Bogolubov N.N., Aksenov V.L., Plakida N.M. D17-88-76  
On the Theory of Superconductivity for a Model of Metal Oxides

A tight-binding system of 3d<sup>9</sup> and 2p<sup>6</sup> electrons is considered in the framework of a polar model for metals. By applying the Green function method an equation for a superconducting gap is derived. It is pointed out that high- $T_c$  in metal oxides can be caused by highly anharmonic oxygen vibrations and by kinematic attraction of electrons due to the strong single-site Coulomb correlations.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988