ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
Том 53, № 1
октябрь, 1982

УРАВНЕНИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ДЛЯ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ВАНЬЕ

Вуйичич Г. М. [1], Кuземский А. Л., Плакида Н. М.

В представлении Ванье получена система уравнений сверхпроводимости для сильно связанных электронов в переходном металле, который описывается гамильтонианом Хаббарда. Электрон-фононное взаимодействие записано с учетом модели «жестких ионов». Замкнутая система уравнений получена в пренебрежении перенормировкой вершины в массовом операторе.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы большой интерес вызывает исследование сверхпроводящих свойств переходных металлов, их сплавов и соединений [1]. В отличие от простых металлов, в переходных металлах помимо широкой s-зоны имеется частично заполненная относительная узкая d-зона. В ряде работ [2—5] было показано, что сильно связанные d-электроны в значительной степени ответственны за сверхпроводящие свойства переходных металлов. Даже в случае сильной корреляции кулоновское взаимодействие между сильно связанными электронами может приводить к возникновению куперовских пар в полупроводнике Мотта — Хаббарда [6].

Простейшей моделью, описывающей корреляцию сильно связанных электронов в переходных металлах и их соединениях, является модель Хаббарда [7], с помощью которой удается объяснить целый ряд электрических и магнитных свойств переходных металлов, их сплавов и соединений [8, 9]. Необходимо отметить, что гамильтониан Хаббарда представляет собой сильно упрощенный вариант полярной модели металла Шубина — Вонсовского — Боголюбова [10] и в этом смысле является начальным шагом к построению последовательной микроскопической теории переходных металлов и их соединений.

В настоящей работе выводится система уравнений сверхпроводимости для сильно связанных электронов переходного металла, взаимодействующих с фононами. Уравнения сверхпроводимости записаны в базисе локализованных волновых функций Ванье. Такое представление подчеркивает сильно связанный характер d-электронов, и, кроме того, оно необходимо при описании сверхпроводящих свойств неупорядоченных сплавов переходных металлов [1, 11—14] и аморфных сверхпроводников [14, 15].

При выводе уравнений сверхпроводимости используется метод уравнений движения для двухвременных функций Грина [16], в котором проце-

[1] Институт ядерных наук им. Б. Кидрича, Белград, СФРЮ.

дура расщепления проводится только для приближенного вычисления массового оператора матричной электронной функции Грина. При этом замкнутая система уравнений получается в пренебрежении перенормировкой вершины в электрон-ионном взаимодействии, как и в работах [17, 18]. Найденная система уравнений сверхпроводимости для сильно связанных электронов в локализованном базисе аналогична уравнениям Элиашберга [18] для блоховских электронов и позволяет изучать сверхпроводящие свойства переходных металлов и их сплавов в рамках единой системы уравнений.

2. ГАМИЛЬТОНИАН ЭЛЕКТРОН-ИОННОЙ МОДЕЛИ УЗКОЗОННОГО МЕТАЛЛА

Полный гамильтониан электрон-ионной системы представим в виде суммы

$$H=H_e+H_i+H_{e-i}, \tag{1}$$

где H_e — электронная часть гамильтониана, представляющая собой оператор Хаббарда [7]

$$H_e=\sum_{ij\sigma} t_{ij}a_{i\sigma}{}^{+}a_{j\sigma}+\frac{U}{2}\sum_{i\sigma} n_{i\sigma}n_{i-\sigma}. \tag{2}$$

Операторы $a_{i\sigma}{}^{+}$ и $a_{i\sigma}$ — ферми-операторы рождения и уничтожения электронов в узле i; U — энергия кулоновского отталкивания электронов с противоположными спинами на одном узле, $t_{ij}=N^{-1}\sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)]$ — интеграл перескока, $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ — зонная энергия.

Ионная подсистема описывается оператором

$$H_i=\frac{1}{2}\sum_{n}\frac{P_n{}^2}{2M_n}+\frac{1}{2}\sum_{nm}\Phi_{nm}{}^{\alpha\beta}u_n{}^{\alpha}u_m{}^{\beta}, \tag{3}$$

где $\mathbf{P}_n$ — оператор импульса, M_n — масса иона, $\mathbf{u}_n$ — смещение атома из равновесного положения в узле решетки $\mathbf{R}_n$.

Оператор электрон-ионного взаимодействия имеет вид

$$H_{e-i}=\sum_{\sigma}\sum_{n,i\neq j} V_{ij}{}^{\alpha}(\mathbf{R}_n{}^0)a_{i\sigma}{}^{+}a_{j\sigma}u_n{}^{\alpha}, \tag{4}$$

где

$$\sum_{n} V_{ij}{}^{\alpha}(\mathbf{R}_n{}^0)u_n{}^{\alpha}=\frac{\partial t_{ij}(\mathbf{R}_{ij}{}^0)}{\partial \mathbf{R}_{ij}{}^0}(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_j). \tag{5}$$

Удобно переписать операторы (2) и (4) с помощью операторов Намбу и матриц Паули:

$$H_e=\sum_{ij} t_{ij}\psi_i{}^{+}\tau_3\psi_j+\frac{U}{2}\sum_{i}(\psi_i{}^{+}\tau_3\psi_i)(\psi_i{}^{+}\tau_3\psi_i), \tag{6}$$

$$H_{e-i}=\sum_{n,\ i\neq j} V_{ijn}\psi_i{}^{+}\tau_3\psi_j u_n, \tag{7}$$

где

$$\psi_i=\begin{pmatrix} a_{i\uparrow} \\ a_{i\downarrow}^{+} \end{pmatrix}, \quad \psi_i^{+}=(a_{i\uparrow}^{+}, a_{i\downarrow}); \quad \tau_3=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \tau_0=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Заметим, что в рассматриваемой здесь модели металла s-электроны явно не учитываются. Вместо двух зон s- и d-электронов, как и в модели Хаббарда, рассматривается одна «эффективная» зона электронов, взаимодействующих с фононами. Однако косвенно влияние s-электронов учтено. Считается, что все три нормальных частоты фононов без учета d-электронов $\omega^0(q\nu)$ соответствуют акустическим частотам, а величина кулоновского отталкивания U перенормирована за счет экранировки s-электронами [3, 19].

3. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА

Рассмотрим уравнения движения для функций Грина электронов, которые представим в виде матрицы

$$G_{ij}(\omega)=\begin{bmatrix} \langle\langle a_{i\uparrow}|a_{j\uparrow}^{+}\rangle\rangle_\omega & \langle\langle a_{i\uparrow}|a_{j\downarrow}\rangle\rangle_\omega \\ \langle\langle a_{i\downarrow}^{+}|a_{j\uparrow}^{+}\rangle\rangle_\omega & \langle\langle a_{i\downarrow}^{+}|a_{j\downarrow}\rangle\rangle_\omega \end{bmatrix}=\langle\langle \psi_i|\psi_j^{+}\rangle\rangle_\omega. \tag{9}$$

Дифференцирование $G_{ij}(t-t')$ по первому времени дает для фурье-компонент следующее уравнение движения:

$$\sum_j (\omega\tau_0\delta_{ij}-t_{ij}\tau_3)\langle\langle\psi_j|\psi_{i'}^{+}\rangle\rangle_\omega=\delta_{ii'}\tau_0+ \tag{10}$$

$$+\sum_{nj} V_{ijn}\langle\langle u_n\tau_3\psi_j|\psi_{i'}^{+}\rangle\rangle_\omega+U\langle\langle(\psi_i^{+}\tau_3\psi_i)\tau_3\psi_i|\psi_{i'}^{+}\rangle\rangle_\omega.$$

Так же как и в [17], отделим перенормировку энергии электронов в приближении среднего поля Хартри — Фока — Боголюбова [20] (с учетом аномальных средних) от перенормировки в высших порядках, обусловленной неупругим рассеянием. Для этого введем далее неприводимые (ir) части функций Грина согласно следующему определению (для примера возьмем две функции Грина из четырех):

$$\langle\langle a_{i\uparrow}a_{i\downarrow}^{+}a_{i\downarrow}|a_{i\uparrow}^{+}\rangle\rangle_\omega=\langle\langle(a_{i\uparrow}n_{i\downarrow})^{\mathrm{ir}}|a_{i'\uparrow}^{+}\rangle\rangle_\omega+ \tag{11}$$

$$+\langle n_{i\downarrow}\rangle\langle\langle a_{i\uparrow}|a_{i'\uparrow}^{+}\rangle\rangle_\omega-\langle a_{i\uparrow}a_{i\downarrow}\rangle\langle\langle a_{i\downarrow}^{+}|a_{i'\uparrow}^{+}\rangle\rangle_\omega,$$

$$\langle\langle a_{i\uparrow}a_{i\downarrow}^{+}a_{i\downarrow}|a_{i'\downarrow}\rangle\rangle_\omega=\langle\langle(a_{i\uparrow}n_{i\downarrow})^{\mathrm{ir}}|a_{i'\downarrow}\rangle\rangle_\omega+ \tag{12}$$

$$+\langle n_{i\downarrow}\rangle\langle\langle a_{i\uparrow}|a_{i'\downarrow}\rangle\rangle_\omega-\langle a_{i\uparrow}a_{i\downarrow}\rangle\langle\langle a_{i\downarrow}^{+}|a_{i'\downarrow}\rangle\rangle_\omega.$$

Выбор неприводимых частей функций Грина в (11) и (12) задается следующими условиями:

$$\langle[(a_{i\uparrow}n_{i\downarrow})^{\mathrm{ir}}, \ \psi_i^{+}]_+\rangle=0. \tag{13}$$

Соотношение (13) позволяет однозначно ввести неприводимые части и обратить в нуль неоднородные члены в уравнениях для них. С учетом (11) и (12) уравнение (10) примет вид

$$\sum_j (\omega\tau_0\delta_{ij}-t_{ij}\tau_3-\Sigma_{i\sigma}^{c})\langle\langle\psi_j|\psi_{i'}^{+}\rangle\rangle=\delta_{ii'}\tau_0+ \tag{14}$$

$$+\sum_j \langle\langle (\rho_{ij}\tau_3\psi_j)^{\mathrm{ir}} | \psi_{i'}{}^+ \rangle\rangle,$$

где введены следующие обозначения:

$$(15)\qquad \rho_{ij}=U\rho_i\delta_{ij}+\sum_n V_{ijn}u_n(1-\delta_{ij}),\quad \rho_i=\psi_i{}^+\tau_3\psi_i=\sum_\sigma a_{i\sigma}{}^+a_{i\sigma}=\sum_\sigma n_{i\sigma}.$$

Величина $\Sigma_{i\sigma}{}^c$ представляет собой массовый оператор в приближении среднего поля

$$(16)\qquad \Sigma^c_{i\sigma}=U\begin{pmatrix} n_{i-\sigma} & -\langle a_{i\sigma}a_{i-\sigma}\rangle \\ -\langle a^+_{i-\sigma}a_{i\sigma}{}^+\rangle & -n_{i\sigma}\end{pmatrix}.$$

В представлении операторов Намбу

$$\psi_{i,-\sigma}=\begin{pmatrix} a_{i-\sigma} \\ a_{i\sigma}{}^+\end{pmatrix},\qquad \overset{+}{\psi}_{i,-\sigma}=(\overset{+}{a}_{i-\sigma}, a_{i\sigma})$$

массовый оператор (16) можно записать в виде

$$(17)\qquad \Sigma^c_{i\sigma}=-U\tau_3\langle\psi_{i,-\sigma}\overset{+}{\psi}_{i,-\sigma}\rangle\tau_3+\frac{U}{2}(\tau_0+\tau_3).$$

Для вычисления неприводимой матричной функции Грина в (14) запишем для нее уравнение движения по отношению ко второму времени t' (см., например, [17]). Для фурье-компоненты функции Грина получаем уравнение

$$(18)\qquad \sum_{j'} \langle\langle (\rho_{kj}\tau_3\psi_j)^{\mathrm{ir}} | \psi_{j'}{}^+\rangle\rangle_\omega (\omega\tau_0\delta_{i'j'}-t_{j'i'}\tau_3)=$$

$$=\sum_{mj'} V_{j'i'm}\langle\langle (\rho_{kj}\tau_3\psi_j)^{\mathrm{ir}} | \psi_{j'}{}^+\tau_3 u_m\rangle\rangle_\omega+$$

$$+\frac{U}{2}\langle\langle (\rho_{kj}\tau_3\psi_j)^{\mathrm{ir}} | (\psi_{i'}{}^+\tau_3\rho_{i'}+\rho_{i'}\psi_{i'}{}^+\tau_3)\rangle\rangle_\omega.$$

Процедуру выделения неприводимой части относительно операторов в правой части функции Грина в (17) можно провести аналогично тому, как это было проделано в (14). В результате получим

$$(19)\qquad \sum_{j'} \langle\langle (\rho_{kj}\tau_3\psi_j)^{\mathrm{ir}} | \psi_{j'}{}^+\rangle\rangle (\omega\tau_0\delta_{i'j'}-t_{j'i'}\tau_3-\Sigma^c_{i'\sigma})=$$

$$=\sum_{j'} \langle\langle (\rho_{kj}\tau_3\psi_j)^{\mathrm{ir}} | (\psi_{j'}{}^+\tau_3\rho_{j'i'})^{\mathrm{ir}}\rangle\rangle.$$

Для того чтобы решить систему уравнений (14), (19), введем нулевую функцию Грина

$$(20)\qquad \sum_j (\omega\tau_0\delta_{ij}-t_{ij}\tau_3-\Sigma^c_{i\sigma})G_{ji}{}^0(\omega)=\delta_{ii'}.$$

Использование (20) в (14) и (18) приводит к уравнению

$$G_{ii'}(\omega)=G_{ii'}{}^{0}(\omega)+\sum_{kk'} G_{ik}{}^{0}(\omega)\,T_{kk'}(\omega)\,G^{0}_{k'i'}(\omega). \tag{21}$$

Матрица рассеяния определяется неприводимой частью многочастичной функции Грина в (19):

$$T_{kk'}(\omega)=\sum_{jj'} \langle\langle(\rho_{kj}\tau_3\psi_j)^{\mathrm{ir}}|\,(\psi_{j'}{}^{+}\tau_3\rho_{j'k'})^{\mathrm{ir}}\rangle\rangle_{\omega}. \tag{22}$$

Если ввести массовый оператор $M_{kk'}$, который является связанной частью матрицы рассеяния

$$T_{kk'}(\omega)=M_{kk'}(\omega)+\sum_{mn} M_{km}(\omega)\,G_{mn}{}^{0}(\omega)\,T_{nk'}(\omega), \tag{23}$$

то уравнение (21) можно представить в виде уравнения Дайсона

$$G_{ii'}(\omega)=G_{ii'}{}^{0}(\omega)+\sum_{kk'} G_{ik}{}^{0}(\omega)\,M_{kk'}(\omega)\,G_{k'i'}(\omega). \tag{24}$$

Массовый оператор $M_{kk'}=\{T_{kk'}\}^{p}$ не содержит частей, которые можно разрезать по линии G_0, что указывается индексом «p» (собственная часть)

$$M_{kk'}=\sum_{jj'} \langle\langle(\rho_{kj}\tau_3\psi_j)^{\mathrm{ir}}|\,(\psi_{j'}{}^{+}\tau_3\rho_{j'k'})^{\mathrm{ir}}\rangle\rangle_{\omega}{}^{p}. \tag{25}$$

Таким образом, наиболее общее выражение для электронной функции Грина в локализованном базисе с учетом электрон-фононного взаимодействия в виде (4) можно записать в следующем матричном виде:

$$\bar{G}^{-1}=\bar{G}_0{}^{-1}-\bar{M}. \tag{26}$$

Вычисление полной функции Грина $\bar{G}$ сведено к нахождению $\bar{G}_0$ и $\bar{M}$.

4. ПРИБЛИЖЕННЫЙ РАСЧЕТ МАССОВОГО ОПЕРАТОРА

Явное выражение для массового оператора в (26) имеет вид

$$M_{ii'}(\omega)=\sum_{jj'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega-\omega'}(e^{\beta\omega'}+1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi}\, e^{-i\omega' t}\times \tag{27}$$

$$\times\begin{bmatrix} \langle\rho_{j'i\uparrow}(t)\,a^{+}_{j'\uparrow}(t)\,a_{j\uparrow}\rho_{ij\uparrow}\rangle^{p,\mathrm{ir}} & -\langle a_{j'\downarrow}(t)\,\rho_{i'j'\downarrow}(t)\,a_{j\uparrow}\rho_{ij\uparrow}\rangle^{p,\mathrm{ir}} \\ -\langle\rho_{j'i'\uparrow}(t)\,a^{+}_{j'\uparrow}(t)\,\rho_{ji\downarrow}a_{j\downarrow}{}^{+}\rangle^{p,\mathrm{ir}} & \langle a_{j'\downarrow}(t)\,\rho_{i'j'\downarrow}(t)\,\rho_{ji\downarrow}a_{j\downarrow}{}^{+}\rangle^{p,\mathrm{ir}} \end{bmatrix}.$$

Для получения замкнутой самосогласованной системы уравнений для массового оператора (27) необходимо использовать то или иное приближение с тем, чтобы выразить его через функцию Грина (9). Массовый оператор (27) описывает неупругое рассеяние электронов (упругая часть содержится в $\Sigma_{i\sigma}{}^{c}$ (16)) на флуктуациях плотности полного электрон-ионного заряда в решетке. По аналогии с работой [17] (см. также [19, 21]) найдем аналитическое выражение для массового оператора в приближении «двух взаимодействующих мод». Это приближение состоит в пренебрежении перенормировкой вершины, т. е. корреляцией в распространении выделенного электрона (дырки) и распространении флуктуаций плотности заряда. Этому приближению отвечает следующее представление в (27) высших корреляционных функций через низшие:

$$(28)\qquad \langle \rho_{j'i'\uparrow}(t)\, a_{j'\uparrow}^{+}(t)\, a_{j\uparrow}\rho_{ij\uparrow}\rangle^{p,\mathrm{ir}} \approx \langle \rho_{j'i'\uparrow}(t)\rho_{ij\uparrow}\rangle\langle a_{j'\uparrow}^{+}(t)\, a_{j\uparrow}\rangle.$$

Заметим, что одновременные средние уже учтены в массовом операторе $\Sigma_{i\sigma}^{c}$ (16).

Записывая далее спектральные представления для корреляционных функций в (28), массовый оператор (27) представим с учетом определения (15) в виде суммы

$$(29)\qquad M_{ii'}(\omega) = M_{ii'}^{1}(\omega) + M_{ii'}^{2}(\omega),$$

где

$$(30)\qquad M_{ii'}^{1} = \sum_{nn'}\sum_{jj'} V_{ijn}V_{j'i'n'} \iint\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1\, d\omega_2}{\omega-(\omega_1+\omega_2)}\, \frac{1}{2}\left(\mathrm{th}\frac{\beta\omega_1}{2} + \mathrm{cth}\frac{\beta\omega_2}{2}\right)\times$$
$$\times\left[-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\langle\langle u_n | u_{n'}\rangle\rangle_{\omega_2+i\varepsilon}\right]\left(-\frac{1}{\pi}\right)\tau_3\,\mathrm{Im}\langle\langle \psi_j | \psi_{j'}^{+}\rangle\rangle_{\omega_1+i\varepsilon}\tau_3.$$

Массовый оператор (30) имеет вид, характерный для взаимодействующей электрон-фононной системы [18, 19, 21]. Вклад $M_{ii'}^{2}$ имеет более сложную структуру:

$$(31)\qquad M_{ii'}^{2} = U^2 \iint\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1\, d\omega_2}{\omega-(\omega_1+\omega_2)}\, \frac{1}{2}\left(\mathrm{th}\frac{\beta\omega_1}{2} + \mathrm{cth}\frac{\beta\omega_2}{2}\right)\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix},$$

где

$$A = \left[-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\langle\langle n_{i\downarrow} | n_{i'\downarrow}\rangle\rangle_{\omega_2}\right]\left[-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\langle\langle a_{i\uparrow} | a_{i'\uparrow}^{+}\rangle\rangle_{\omega_1}\right];$$

$$B = \left[\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\langle\langle n_{i\downarrow} | n_{i'\uparrow}\rangle\rangle_{\omega_2}\right]\left[-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\langle\langle a_{i\uparrow} | a_{i'\downarrow}\rangle\rangle_{\omega_1}\right];$$

$$C = \left[\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\langle\langle n_{i\uparrow} | n_{i'\downarrow}\rangle\rangle_{\omega_2}\right]\left[-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\langle\langle a_{i\downarrow}^{+} | a_{i'\uparrow}^{+}\rangle\rangle_{\omega_1}\right];$$

$$D = \left[-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\langle\langle n_{i\uparrow} | n_{i'\uparrow}\rangle\rangle_{\omega_2}\right]\left[-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\langle\langle a_{i\downarrow}^{+} | a_{i'\downarrow}\rangle\rangle_{\omega_1}\right].$$

Из соотношений (30) и (31) видно, что, в отличие от электрон-ионной модели простого металла, учитывающей прямое кулоновское взаимодействие электронов [17], эффективное электрон-электронное взаимодействие, определяемое в (31) функцией Грина флуктуаций плотности заряда, не может быть в простых приближениях выражено через полную диэлектрическую проницаемость электрон-ионной системы для модели Хаббарда. Это является отражением одного из недостатков модели Хаббарда — пренебрежением обменным взаимодействием на разных узлах. Диэлектрическую функцию для модели Хаббарда можно формально записать для k, $\omega \neq 0$ через продольную динамическую проводимость [22]. Однако при k и $\omega \to 0$ получаемое таким образом выражение для диэлектрической проницаемости не определено. В полярной модели металла [10] электронная система описывается более последовательным образом. Поэтому вывод уравнений сверхпроводимости для полярной модели металла (с учетом электрон-фононного взаимодействия) представляет особый интерес.

С этим обстоятельством связаны известные трудности вычисления частотной зависимости корреляционной функции $\langle n_{i\sigma}(t) n_{j\sigma'} \rangle$ для модели Хаббарда. По существу, трудности эти аналогичны тем, которые возникают при вычислении корреляционной функции $\langle S_i^z(t) S_j^z \rangle$ в изотропном гейзенберговском ферромагнетике [23, 24]. При вычислении функции Грина $\langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle$ возникает функция Грина $\langle\langle \delta S^z S^+ | \delta S^z S^- \rangle\rangle$ (здесь $\delta S^z = S^z - \langle S^z \rangle$). Обычно при расцеплении $\langle \delta S_i^z(t) \delta S_j^z \rangle \langle\langle S^+ | S^- \rangle\rangle$ для корреляционной функции $\langle \delta S_i^z \delta S_j^z \rangle$ используется статическое приближение [24, 25]. Приближенный метод расчета корреляционной функции $\langle n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \rangle$ в статическом пределе обсуждается, например, в [26]. Дальнейший анализ полученной системы уравнений (26) и (29) для сильно связанных электронов в переходном металле может быть проведен известными методами (см., например, [27, 28]).

В заключение заметим, что для сильно связанных электронов переходного металла оператор электрон-фононного взаимодействия может быть выражен через небольшое число характерных параметров переходного металла [3, 19, 21]:

$$\frac{\partial t(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}{\partial (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} = q_0 t_{ij} \frac{\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|}.$$

Здесь q_0 — слейтеровский коэффициент, характеризующий экспоненциальное убывание d-функций [3]. Интеграл перескока t_{ij} для ближайших соседей z выражается через ширину зоны $W = 2tz$. Таким образом, полученная в настоящей работе самосогласованная система уравнений сверхпроводимости (26) и (29) в представлении Ванье позволяет с единой точки зрения исследовать реальные переходные металлы, их сплавы и соединения.

Литература

[1] *Вонсовский С. В., Изюмов Ю. А., Курмаев Э. З.* Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений. М.: Наука, 1977.
[2] *Fröhlich H.* Superconductivity and the many body problem. In: Perspectives in Modern Physics. Ed. R. E. Marshak. John Wiley and Sons, 1966, 539–552.
[3] *Barisic S., Labbe J., Friedel J.*— Phys. Rev. Lett., 1970, *25*, № 14, 919–922.
[4] *Appel J., Kohn W.*— Phys. Rev., 1971, *4B*, № 7, 2162–2174.
[5] *Appel J., Kohn W.*— Phys. Rev., 1972, *5B*, № 5, 1823–1830.
[6] *Bari R. A.*— Phys. Rev., 1973, *7B*, № 5, 2128–2132.
[7] *Hubbard J.*— Proc. Roy. Soc., 1963, *A276*, 238–257.
[8] *Куземский А. Л.*— ТМФ, 1978, *36*, № 2, 208–223.
[9] *Куземский А. Л.*— ЭЧАЯ, 1981, *12*, № 2, 366–423.
[10] *Боголюбов Н. Н.* Лекции по квантовой статистике. В кн.: Избранные труды в трех томах, т. 2. Киев: Наукова думка, 1970, 287–493.
[11] *Weinkauf A., Zittartz J.*— Solid State Commun., 1974, *14*, № 3, 365–368.
[12] *Weinkauf A., Zittartz J.*— J. Low. Temp. Phys., 1975, *18*, № 3, 4, 229–239.
[13] *Kerker G., Bennemann K. H.* Solid State Commun., 1974, *14*, № 4, 399–401.
[14] *Poon S. J.*— Solid State Commun., 1976, *18*, № 11, 1489–1491.

[15] *Poon S. J.*— Solid State Commun., 1980, *34*, № 7, 659–661.
[16] *Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В.*— ДАН СССР, сер. матем. и физ., 1959, *126*, № 1, 53–56.
[17] *Вуйичич Г. М., Петру З. К., Плакида Н. М.*— ТМФ, 1981, *46*, № 1, 91–98.
[18] *Элиашберг Г. М.*— ЖЭТФ, 1960, *39*, № 5, 1437–1441.
[19] *Холас А., Плакида Н. М., Куземский А. Л.* Самосогласованная теория электрон-фононного взаимодействия в переходных металлах. Сообщение Р17-80-741. Дубна: ОИЯИ, 1980.
[20] *Боголюбов Н. Н.*— ДАН СССР, сер. матем. и физ., 1958, *119*, № 2, 244–246.
[21] *Плакида Н. М., Холас А., Куземский А. Л.* Электрон-фононное взаимодействие в модели Хаббарда с сильной корреляцией. Сообщение Р17-80-773. Дубна: ОИЯИ, 1980.
[22] *Gasser W.*— Phys. stat. sol. (b), 1978, *89*, № 1, 165–169.
[23] *Тябликов С. В.* Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975.
[24] *Вакс В. Г., Ларкин А. И., Пикин С. А.*— ЖЭТФ, 1967, *53*, № 3, 1089–1106.
[25] *Plakida N. M.*— Phys. Lett., 1973, *A43*, № 9, 481–482.
[26] *Elk K.*— Phys. stat. sol. (b), 1979, *96*, 251–257.
[27] *Peter M. et al.*— Helv. Phys. Acta., 1974, *47*, № 7, 807–832.
[28] *Allen P. B.* Phonons and the Superconducting Transition Temperature. In: Dynamical Properties of Solids, Horton G. K. and Maradudin A. A. eds. North-Holland Publ. Company, 1980, ch. 2, 95–196.

Объединенный институт ядерных
исследований

Поступила в редакцию
23.IX.1981 г.

EQUATIONS OF SUPERCONDUCTIVITY FOR TRANSITION METALS IN THE WANNIER REPRESENTATION

Vujicic G. M., Kuzemsky A. L., Plakida N. M.

System of equations of superconductivity for the tight-binding electrons in the transition metal described by the Hubbard Hamiltonian is derived. The electron-phonon interaction is written down for the «rigid ion model». Neglecting the vertex corrections in the self-energy operator the closed system of equations is obtained.