



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 29 за 2018 г.



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

**Лахно В.Д.**

Сверхпроводящие свойства  
3D–газа ТИ–биполяронов  
низкой плотности

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Лахно В.Д. Сверхпроводящие свойства 3D–газа ТИ–биполяронов низкой плотности // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 29. 25 с. doi:[10.20948/prepr-2018-29](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-29)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-29>

**О р д е н а Л е н и н а**  
**ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ**  
**имени М.В.Келдыша**  
**Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к**

**В.Д. Лахно**

**Сверхпроводящие свойства 3D-газа  
ТИ-биполяронов низкой плотности**

**Москва – 2018**

***В.Д. Лахно***

**Сверхпроводящие свойства 3D-газа ТИ-биполяронов низкой плотности**

Рассматриваются термодинамические свойства трёхмерного бозе-конденсата трансляционно-инвариантных биполяронов (ТИ-биполяронов). Рассчитаны критическая температура перехода, энергия, теплоёмкость и теплота перехода газа ТИ-биполяронов. Полученные результаты применяются для объяснения экспериментов по высокотемпературным сверхпроводникам.

**Ключевые слова:** трансляционно-инвариантные биполяроны, высокотемпературная сверхпроводимость

***V.D. Lakhno***

**Superconducting properties of 3D low-density TI-bipolaron gas**

Consideration is given to thermodynamical properties of a three-dimensional Bose-condensate of translation-invariant bipolarons (TI-bipolarons). The critical temperature of transition, energy, heat capacity and the transition heat of TI-bipolaron gas are calculated. The results obtained are used to explain experiments on high-temperature superconductors

**Key words:** translation-invariant bipolarons (TI-bipolarons), high-temperature superconductivity (HTSC)

## **Оглавление**

1	Введение . . . . .	3
2	Гамильтониан Пекара-Фрёлиха. Канонические преобразования. . . . .	6
3	Энергетический спектр ТИ-биполярона . . . . .	9
4	Статистическая термодинамика газа ТИ-биполяронов низкой плотности . . . . .	10
5	Токовые состояния ТИ-биполяронного газа . . . . .	16
6	Сравнение с экспериментом . . . . .	17
7	Необходимые обобщения теории . . . . .	20
8	Заключительные замечания . . . . .	21
9	Приложение. Замечание об обозначениях . . . . .	22
	Библиографический список . . . . .	22

# 1. Введение

Теория сверхпроводимости является одним из самых красивых и давно сформировавшихся разделов физики конденсированных сред, который включает в себя как макроскопическую, так и микроскопическую теории, а также вывод макроскопических уравнений теории из микроскопического описания [1]. В этом смысле теория в своей основе представлялась в законченном виде, и её дальнейшее развитие должно быть связано с дальнейшей детализацией и рассмотрением различных специальных случаев.

Ситуация изменилась после открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) [2]. Неожиданным оказалось, что в оксидных керамиках корреляционная длина на несколько порядков меньше, чем в традиционных металлических сверхпроводниках, а отношение ширины запрещённой щели к температуре сверхпроводящего перехода намного больше [3]. С современным состоянием теории и эксперимента можно ознакомиться по книгам и обзорам [4]-[15].

На сегодняшний день основной вопрос связан с построением микроскопической теории, способной объяснить совокупность экспериментальных фактов, не укладывающихся в стандартную теорию БКШ. Можно ожидать, что построение такой теории, по-видимому, не затронет макроскопическую теорию, в основе которой лежит феноменологический подход.

При всей множественности современных версий микроскопического описания ВТСП: фононный, плазмонный, спиновый, экситонный и другие механизмы, – центральным пунктом построения микроскопической теории является эффект спаривания электронов (эффект Купера). Такая «бозонизация» электронов далее лежит в основе описания их сверхпроводящего конденсата.

Явление спаривания в широком смысле есть образование биэлектронных состояний, а в узком смысле, если в основу описания положен фононный механизм – есть образование биполяронных состояний. В течение длительного времени такому представлению препятствовала большая корреляционная длина, другими словами, размер куперовских пар в теории БКШ. Эта же причина долгое время препятствовала представлению о сверхпроводимости как о бозонном конденсате (см. примечание на стр. 1177 работы [16]). В немалой степени такому непониманию способствовало и стандартное представление о биполяронах как об очень компактных образованиях.

Наиболее ярко эту ситуацию иллюстрирует применение теории биполяронов малого радиуса (ПМР) для описания ВТСП [10], [17], [18]. В её основе лежит представление об образовании устойчивого связанного би-

поляронного состояния на одном узле решётки с последующим рассмотрением таких биполяронов малого радиуса как газа заряженных бозонов (как вариант – образование отдельных ПМР с последующим включением механизма БКШ образования бозонных состояний). Несмотря на элегантность такой картины, её реальное воплощение для ВТСП встречает непреодолимые трудности, связанные с невыполнимостью противоположных требований – необходимости большой константы электрон-фононного взаимодействия для образования биполяронных состояний малого радиуса с одной стороны, и требованием её малости для того, чтобы уменьшить массу биполярона, от которой зависит температура сверхпроводящего перехода [19]-[24]. Ясно, что с такими же трудностями будет сталкиваться теория ВТСП, основанная на представлении о ПМР, использующая любые другие (отличные от фононного) механизмы взаимодействия, упомянутые выше.

В качестве другого кандидата на роль фундаментальной заряженной бозонной частицы при описании ВТСП можно рассматривать биполяроны большого радиуса (ПБР) [25]-[29]. Исторически именно в этом состояло предложение, сделанное Оггом и Шафротом [25], [30], задолго до появления теории ПМР. Если рассматривать куперовские пары как своеобразные биполяронные состояния большого радиуса, то можно ожидать, что теория ПБР должна использоваться для решения проблемы ВТСП.

Как указывалось выше, основным препятствием для последовательного применения теории ПБР для объяснения высокотемпературной сверхпроводимости являлось представление о локализованности электронных пар в небольшой пространственной области, необходимости для этого достаточно большой константы электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ), и, как следствие, их большой эффективной массы.

В свете последних достижений в теории поляронов и биполяронов большого радиуса, а именно вследствие развития совершенно новой концепции делокализованных поляронных и биполяронных состояний – трансляционно-инвариантных поляронов (ТИ-поляронов) и биполяронов (ТИ-биполяронов) [31]-[37], представляется необходимым по-новому рассмотреть их роль в теории ВТСП.

Напомним основные результаты теории ТИ-поляронов и биполяронов, полученные в [31]-[37]. Отметим, что рассмотрение именно ЭФВ не является существенным для теории и может быть обобщено на любой вид взаимодействия.

Ниже мы коснёмся только основных моментов теории, важных для теории ВТСП. Самым главным результатом работ [31]-[37] является построение делокализованных поляронных и биполяронных состояний в пределе сильного ЭФВ. Теория ТИ-биполяронов строится на основе теории ТИ-поляронов [31], [32] и сохраняет справедливость базовых утвержде-

ний, доказанных для ТИ–поляронов. Важнейшим из них является теорема об аналитичности свойств основного состояния ТИ–полярона (соответственно ТИ–биполярона) в зависимости от константы ЭФВ  $\alpha$ . Главный вывод, вытекающий из этого положения, – отсутствие критического значения константы ЭФВ  $\alpha_c$ , ниже которого биполярное состояние становится невозможным из-за его распада на независимые поляронные состояния. Другими словами, если существует такое значение  $\alpha_c$ , при котором ТИ–биполярное состояние становится энергетически проигрышным относительно распада на отдельные поляроны, то в этой точке ничего не происходит, но при  $\alpha < \alpha_c$  состояние становится метастабильными. Таким образом, во всём интервале изменения  $\alpha$  мы можем рассматривать ТИ–биполяроны как заряженные бозоны, способные образовывать сверхпроводящий конденсат.

Другим важным свойством ТИ–биполяронов является возможность изменения корреляционной длины во всём диапазоне  $[0, \infty]$  в зависимости от параметров гамильтониана [34]. Таким образом, она может быть как много большей (как это имеет место в металлах), так и много меньшей характерного расстояния между электронами в электронном газе (как это имеет место в оксидных керамиках).

Подробное изложение теории ТИ-поляронов и биполяронов и описание их различных свойств дано в обзоре [37].

Исключительно важное свойство, которым обладают ТИ–поляроны и биполяроны, – наличие энергетической щели между их основным и возбуждёнными состояниями (§ 3).

Перечисленные свойства могут быть использованы для построения микроскопической теории ВТСП на основе ТИ–биполяронов.

Статья устроена следующим образом. В §2 в качестве исходного гамильтониана берётся Гамильтониан Пекара–Фрёлиха для биполярона. Кратко приводятся результаты трёх канонических преобразований для этого гамильтониана: Гейзенберга; Ли, Лоу и Пайнса; Боголюбова–Тябликова. В результате в этом разделе получены уравнения, определяющие спектр ТИ–биполярона.

В §3 проанализированы решения уравнений для спектра ТИ–биполярона. Показано, что в спектре имеется щель, отделяющая основное состояние ТИ–биполярона от его возбуждённых состояний, которые образуют квазинепрерывный спектр. Обосновывается представление об идеальном газе ТИ–биполяронов.

С использованием полученного спектра в §4 рассматриваются термодинамические характеристики идеального газа ТИ–биполяронов. Для различных значений параметров, которыми являются фононные частоты, вычислены величины критических температур бозе-конденсации, теплоты перехода в состояние конденсата, теплоёмкости и скачки теплоём-

кости в точке перехода.

В §5 обсуждается природа токовых состояний в бозе-конденсате ТИ-биполяронов. Показано, что переход из бестокового в токовое состояние является резким.

В §6 даётся сравнение с экспериментом.

В §7 рассмотрены вопросы расширения теории, которые позволили бы провести более детальные сравнения с экспериментальными данными по ВТСП материалам.

В §8 кратко суммированы полученные результаты.

## 2. Гамильтониан Пекара-Фрёлиха. Канонические преобразования

Следуя [33]-[37], при описании биполяронов будем исходить из гамильтониана Пекара-Фрёлиха:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta_{r_2} + \sum_k \hbar\omega_k^0 a_k^+ a_k + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) + \sum_k \left( V_k e^{i\vec{k}\vec{r}_1} a_k + V_k e^{i\vec{k}\vec{r}_2} a_k + H.c. \right), \quad U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = \frac{e^2}{\epsilon_\infty |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (1)$$

где  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  – координаты первого и второго электрона, соответственно;  $a_k^+, a_k$  – операторы рождения и уничтожения квантов поля с энергией  $\hbar\omega_k^0 = \hbar\omega_0$ ;  $m^*$  – эффективная масса электрона; величина  $U$  описывает кулоновское отталкивание между электронами;  $V_k$  – функция волнового вектора  $k$ :

$$V_k = \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0}{\epsilon V}} = \frac{\hbar\omega_0}{ku^{1/2}} \left( \frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2}, \quad u = \left( \frac{2m^*\omega_0}{\hbar} \right)^{1/2}, \quad \alpha = \frac{1}{2} \frac{e^2 u}{\hbar\omega_0 \tilde{\epsilon}}, \quad \tilde{\epsilon}^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1}, \quad (2)$$

где  $e$  – заряд электрона;  $\epsilon_\infty$  и  $\epsilon_0$  – высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости;  $\alpha$  – константа электрон-фононного взаимодействия;  $V$  – объём системы.

В системе центра масс гамильтониан (1) примет вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_e}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu_e}\Delta_r + \sum_k \hbar\omega_k^0 a_k^+ a_k + U(|\vec{r}|) + \sum_k 2V_k \cos \frac{\vec{k}\vec{r}}{2} \left( a_k e^{i\vec{k}\vec{R}} + H.c. \right), \quad \vec{R} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2, \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad M_e = 2m^*, \quad \mu_e = m^*/2. \quad (3)$$

В дальнейшем в этом разделе будем полагать  $\hbar = 1, \omega_k^0 = 1, M_e = 1$  (соответственно  $\mu_e = 1/4$ ).

Координаты центра масс  $\vec{R}$  могут быть исключены из гамильтониана (3) посредством канонического преобразования Гейзенберга [38]:

$$S_1 = \exp \left\{ -i \sum_k \vec{k} a_k^+ a_k \right\} \vec{R}, \quad S_1^{-1} a_k S_1 = a_k e^{-i\vec{k}\vec{R}}, \quad S_1^{-1} a_k^+ S_1 = a_k^+ e^{i\vec{k}\vec{R}}. \quad (4)$$

Соответственно, преобразованный гамильтониан примет вид:

$$\begin{aligned} \tilde{H} = S_1^{-1} H S_1 = & -2\Delta_r + U(|\vec{r}|) + \sum_k a_k^+ a_k + \sum_k 2V_k \cos \frac{\vec{k}\vec{r}}{2} (a_k + a_k^+) + \\ & + \frac{1}{2} \left( \sum_k \vec{k} a_k^+ a_k \right)^2 \end{aligned} \quad (5)$$

Из (5) следует, что точное решение биполяронной проблемы определяется волновой функцией  $\psi(r)$ , содержащей только относительные координаты  $r$  и, таким образом, являющейся трансляционно-инвариантной.

Усреднение  $\tilde{H}$  по  $\psi(r)$  приводит к гамильтониану  $\bar{H}$ :

$$\begin{aligned} \bar{H} = \frac{1}{2} \left( \sum_k \vec{k} a_k^+ a_k \right)^2 + \sum_k a_k^+ a_k + \sum_k \bar{V}_k (a_k + a_k^+) + \bar{T} + \bar{U}, \\ \bar{V}_k = 2V_k \left\langle \Psi \left| \cos \frac{\vec{k}\vec{r}}{2} \right| \psi \right\rangle, \quad \bar{U} = \langle \Psi | U(r) | \Psi \rangle, \quad \bar{T} = -2 \langle \Psi | \Delta_r | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (6)$$

Из (6) следует, что биполяронный гамильтониан отличается от поляронного гамильтониана заменой в последнем величины  $V_k$  на  $\bar{V}_k$  и добавлением к поляронному гамильтониану постоянных  $\bar{T}$  и  $\bar{U}$ .

С использованием канонического преобразования Ли, Лоу и Пайнса [39]:

$$S_2 = \exp \left\{ \sum_k f(k) (a_k^+ - a_k) \right\}, \quad (7)$$

где  $f_k$  – вариационные параметры, имеющие смысл величины смещения осцилляторов поля из своих равновесных положений:

$$S_2^{-1} a_k S_2 = a_k + f_k, \quad S_2^{-1} a_k^+ S_2 = a_k^+ + f_k, \quad (8)$$

для гамильтониана  $\tilde{\tilde{H}}$ :

$$\tilde{\tilde{H}} = S_2^{-1} \tilde{H} S_2 \quad (9)$$

получим:

$$\tilde{\tilde{H}} = H_0 + H_1,$$



$$\begin{aligned}
H_0 &= 2 \sum_k \bar{V}_k f_k + \sum_k f_k^2 + \frac{1}{2} \left( \sum_k \vec{k} f_k^2 \right)^2 + \mathcal{H}_0 + \bar{T} + \bar{U}, \\
\mathcal{H}_0 &= \sum_k \omega_k a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \sum_{k,k'} \vec{k} \vec{k}' f_k f_{k'} (a_k a_{k'} + a_k^+ a_{k'}^+ + a_k^+ a_{k'} + a_{k'}^+ a_k), \\
\omega_k &= 1 + \frac{k^2}{2} + \vec{k} \sum_{k'} \vec{k}' f_{k'}^2. \quad (10)
\end{aligned}$$

Гамильтониан  $H_1$  содержит линейные, тройные и четверные по операторам рождения и уничтожения члены. Его явный вид приведён в [31]-[33].

Далее, как показано в [31]-[32], использование канонического преобразования Боголюбова–Тябликова [40] для перехода от операторов  $a_k^+$ ,  $a_k$  к новым операторам  $\alpha_k^+$ ,  $\alpha_k$ :

$$\begin{aligned}
a_k &= \sum_{k'} M_{1kk'} \alpha_{k'} + \sum_{k'} M_{2kk'}^* \alpha_{k'}^+, \\
a_k^+ &= \sum_{k'} M_{1kk'}^* \alpha_{k'}^+ + \sum_{k'} M_{2kk'} \alpha_{k'}, \quad (11)
\end{aligned}$$

в которых  $\mathcal{H}_0$  – диагональный оператор, обращает в ноль математическое ожидание  $H_1$ .

В новых операторах  $\alpha_k^+$ ,  $\alpha_k$  гамильтониан (10) примет вид  $\tilde{\tilde{H}}$ :

$$\begin{aligned}
\tilde{\tilde{H}} &= E_{bp} + \sum_k \nu_k \alpha_k^+ \alpha_k, \\
E_{bp} &= \Delta E_r + 2 \sum_k \bar{V}_k f_k + \sum_k f_k^2 + \bar{T} + \bar{U}, \quad (12)
\end{aligned}$$

где  $\Delta E_r$  – так называемая "энергия отдачи". Общее выражение для  $\Delta E_r = \Delta E_r \{f_k\}$  было получено в [32]. Конкретный расчёт энергии основного состояния  $E_{bp}$  осуществляется посредством минимизации (12) по  $f_k$  и  $\psi$  и был проведён в [36].

Входящие в (12) перенормированные частоты  $\nu_k$  согласно [31], [32] определяются уравнением для величины  $s$ :

$$1 = \frac{2}{3} \sum_k \frac{k^2 f_k^2 \omega_k}{s - \omega_k^2}, \quad (13)$$

решения которого дают спектр значений  $s = \{\nu_k^2\}$ .

Из (11), (12) следует, что в результате канонического преобразования вместо исходной системы двух независимых электронов и свободного поля фононов получают новые "физические частицы": ТИ-биполярны ([31],

[32], [37]) с числом возбужденных состояний, в точности равным числу фоновых состояний.

Если концентрация биполяронов мала, то наличие других биполяронов не скажется на спектре отдельного биполярона. Это основное предположение, сделанное в статье, позволяющее рассматривать вместо многочастичной спектральной задачи одночастичную со спектром (14), (15).

### 3. Энергетический спектр ТИ-биполярона

Гамильтониан (12) удобно представить в виде:

$$\tilde{H} = \sum_{n=0,1,2,\dots} E_n \alpha_n^+ \alpha_n, \quad (14)$$

$$E_n = \begin{cases} E_{bp}, & n = 0; \\ \nu_n = E_{bp} + \omega_0 + \frac{k_n^2}{2}, & n \neq 0; \end{cases} \quad (15)$$

где в случае трёхмерного ионного кристалла  $\vec{k}_n$  – вектор с компонентами

$$k_{n_i} = \pm \frac{2\pi(n_i - 1)}{N_{a_i}}, \quad n_i = 1, 2, \dots, \frac{N_{a_i}}{2} + 1, \quad i = x, y, z, \quad (16)$$

$N_{a_i}$  – число атомов вдоль  $i$ -ой кристаллографической оси.

Докажем справедливость выражения для спектра (14), (15). Поскольку операторы  $\alpha_n^+$ ,  $\alpha_n$  подчиняются бозевским перестановочным соотношениям:

$$[\alpha_n, \alpha_{n'}^+] = \alpha_n \alpha_{n'}^+ - \alpha_{n'}^+ \alpha_n = \delta_{n,n'}, \quad (17)$$

то их можно считать операторами рождения и уничтожения ТИ-биполяронов. Энергетический спектр ТИ-биполяронов, согласно (13), определяется уравнением:

$$F(s) = 1, \quad (18)$$

где:

$$F(s) = \frac{2}{3} \sum_n \frac{k_n^2 f_{k_n}^2 \omega_{k_n}^2}{s - \omega_{k_n}^2}. \quad (19)$$

Уравнение (18) удобно решать графически (Рис. 1):

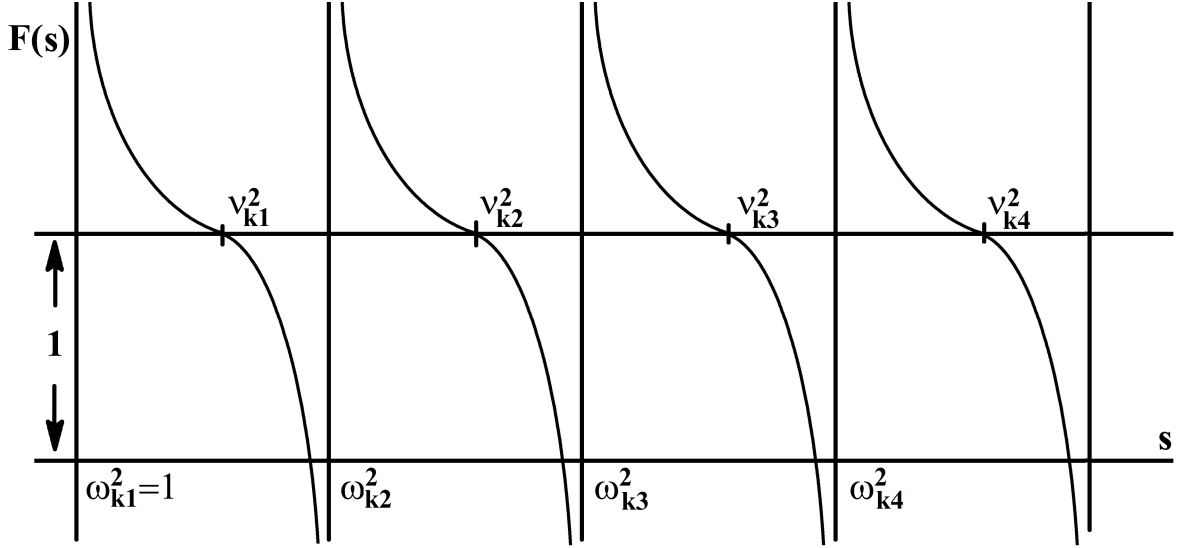


Рис. 1. Графическое решение уравнения (18).

Из рис. 1 следует, что частоты  $\nu_{k_n}$  лежат между частотами  $\omega_{k_n}$  и  $\omega_{k_{n+1}}$ . Таким образом, спектр  $\nu_{k_n}$ , как и спектр  $\omega_{k_n}$ , является квазинепрерывным:  $\nu_{k_n} - \omega_{k_n} = O(N^{-1})$ , что и доказывает справедливость (14), (15).

Отсюда следует, что спектр ТИ-биполярона имеет щель между основным состоянием  $E_{bp}$  и квазинепрерывным спектром, равную  $\omega_0$ .

Ниже мы рассмотрим случай низкой концентрации ТИ-биполяронов в кристалле. Тогда с хорошей точностью можно рассматривать их как идеальный бозе-газ, свойства которого определяются гамильтонианом (14).

## 4. Статистическая термодинамика газа ТИ-биполяронов низкой плотности

Рассмотрим идеальный бозе-газ ТИ-биполяронов, представляющий собой систему из  $N$  частиц, находящихся в объёме  $V$ . Обозначим через  $N_0$  число частиц в нижнем одночастичном состоянии, а через  $N'$  – число частиц в более высоких состояниях. Тогда:

$$N = \sum_{n=0,1,2,\dots} \bar{m}_n = \sum_n \frac{1}{e^{(E_n - \mu)/T} - 1}, \quad (20)$$

$$N = N_0 + N', \quad N_0 = \frac{1}{e^{(E_{bp} - \mu)/T} - 1}, \quad N' = \sum_{n_i \neq 0} \frac{1}{e^{(E_n - \mu)/T} - 1}. \quad (21)$$

Заменяя в выражении для  $N'$  (21) суммирование на интегрирование по квазинепрерывному спектру (14), (15) и полагая в (21)  $\mu = E_{bp}$ , получим из (20), (21) уравнение для определения критической температуры бозе-конденсации  $T_c$ :

$$C_{bp} = f_{\tilde{\omega}}(\tilde{T}_c), \quad (22)$$

$$f_{\tilde{\omega}}(\tilde{T}_c) = \tilde{T}_c^{3/2} F_{3/2}(\tilde{\omega}/\tilde{T}_c), \quad F_{3/2}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{e^{x+\alpha} - 1},$$

$$C_{bp} = \left( \frac{n^{2/3} 2\pi \hbar^2}{M_e \omega^*} \right)^{3/2}, \quad \tilde{\omega} = \frac{\omega_0}{\omega^*}, \quad \tilde{T}_c = \frac{T_c}{\omega^*},$$

где  $n = N/V$ . Связь обозначения  $F_{3/2}$  с другими обозначениями дана в приложении. На рис. 2 приведено графическое решение уравнения (22) для значений параметров  $M_e = 2m^* = 2m_0$ , где  $m_0$  – масса свободного электрона в вакууме,  $\omega^* = 5$  мэВ ( $\approx 58$ К),  $n = 10^{21}$  см $^{-3}$  и значений:  $\tilde{\omega}_1 = 0, 2$ ;  $\tilde{\omega}_2 = 1$ ;  $\tilde{\omega}_3 = 2$ ;  $\tilde{\omega}_4 = 10$ ,  $\tilde{\omega}_5 = 15$ ,  $\tilde{\omega}_6 = 20$ .

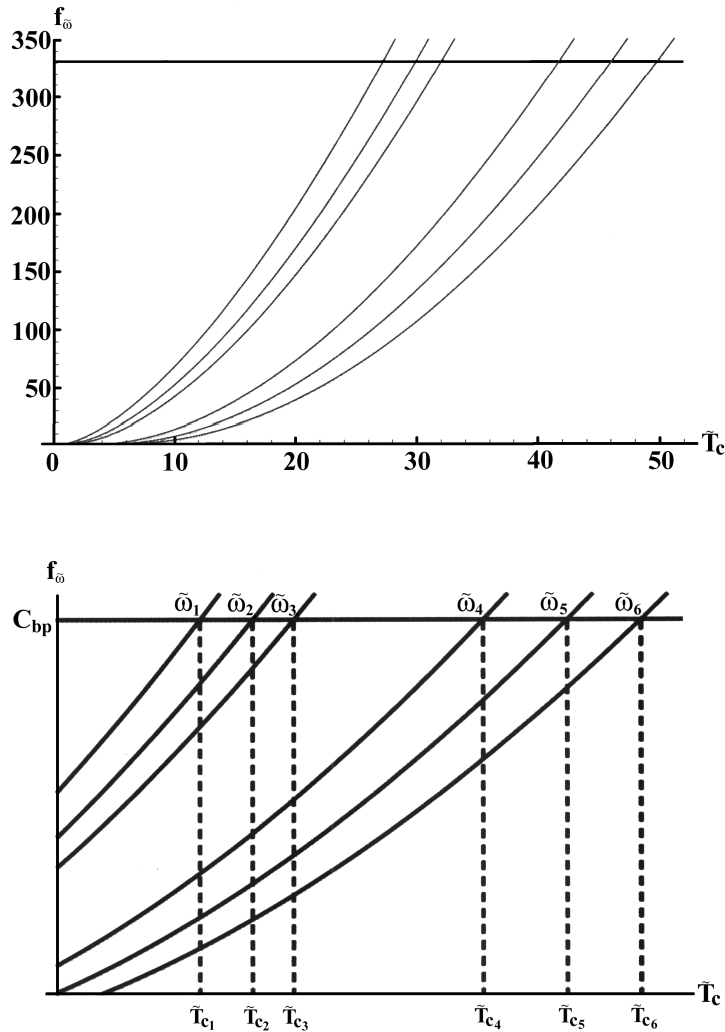


Рис. 2. Решения уравнения (22) с  $C_{bp} = 331, 35$  и  $\tilde{\omega}_i = \{0, 2; 1; 2; 10; 15; 20\}$ , которым соответствуют  $\tilde{T}_{c_i}$ :  $\tilde{T}_{c_1} = 27, 325$ ;  $\tilde{T}_{c_2} = 30, 0255$ ;  $\tilde{T}_{c_3} = 32, 1397$ ;  $\tilde{T}_{c_4} = 41, 8727$ ;  $\tilde{T}_{c_5} = 46, 1863$ ;  $\tilde{T}_{c_6} = 49, 9754$ .

Из рис. 2 следует, что критическая температура растёт с ростом фоновой частоты  $\omega_0$ . Соответствующие выбранным значениям параметров отношения критических температур  $T_{c_i}/\omega_{0i}$  приведены в таблице I. Из таблицы

И следует вывод о том, что критическая температура ТИ-биполярного газа всегда выше, чем в случае идеального бозе-газа (ИБГ). Из рис. 2 также следует, что увеличение концентрации ТИ-биполяронов  $n$  будет приводить к увеличению критической температуры, а увеличение массы электрона  $m^*$  – к её снижению. При  $\tilde{\omega} = 0$  результаты переходят в известный предел ИБГ. В частности, из (22) при  $\tilde{\omega} = 0$  следует выражение для критической температуры ИБГ:

$$T_c = 3,31\hbar^2 n^{2/3} / M_e. \quad (23)$$

Подчеркнём, однако, что в (23) входит  $M_e = 2m^*$ , а не масса биполярона. Это снимает проблему низкой температуры конденсации, возникающей как в теории ПМР, так и в теории ПБР, в которых в выражении (23) фигурирует масса биполярона [26]-[29]. Другой важный результат состоит в том, что критическая температура  $T_c$  для выбранных значений параметров значительно превосходит энергию щели  $\omega_0$ .

Из (20), (21) следует, что:

$$\frac{N'(\tilde{\omega})}{N} = \frac{\tilde{T}^{3/2}}{C_{bp}} F_{3/2} \left( \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}} \right), \quad (24)$$

$$\frac{N_0(\tilde{\omega})}{N} = 1 - \frac{N'(\tilde{\omega})}{N}. \quad (25)$$

На рис. 3 приведены температурные зависимости числа надконденсатных частиц  $N'$  и числа частиц, находящихся в конденсате  $N_0$ , для вышеуказанных значений параметров  $\tilde{\omega}_i$ . Из рис. 3 следует, что, как и следовало ожидать, число частиц в конденсате растёт с увеличением щели  $\omega_i$ .

Энергия ТИ-биполярного газа  $E$  определяется выражением:

$$E = \sum_{n=0,1,2,\dots} \bar{m}_n E_n = E_{bp} N_0 + \sum_{n \neq 0} \bar{m}_n E_n. \quad (26)$$

С использованием (14), (15) для удельной энергии (т.е. энергии, приходящейся на один ТИ-биполярон)  $\tilde{E}(\tilde{T}) = E/N\omega^*$ ,  $\tilde{E}_{bp} = E_{bp}/\omega^*$  из (26) получим:

$$\tilde{E}(\tilde{T}) = \tilde{E}_{bp} + \frac{\tilde{T}^{5/2}}{C_{bp}} F_{3/2} \left( \frac{\tilde{\omega} - \tilde{\mu}}{\tilde{T}} \right) \left[ \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}} + \frac{F_{5/2} \left( \frac{\tilde{\omega} - \tilde{\mu}}{\tilde{T}} \right)}{F_{3/2} \left( \frac{\tilde{\omega} - \tilde{\mu}}{\tilde{T}} \right)} \right], \quad (27)$$

$$F_{5/2}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} dx}{e^{x+\alpha} - 1},$$

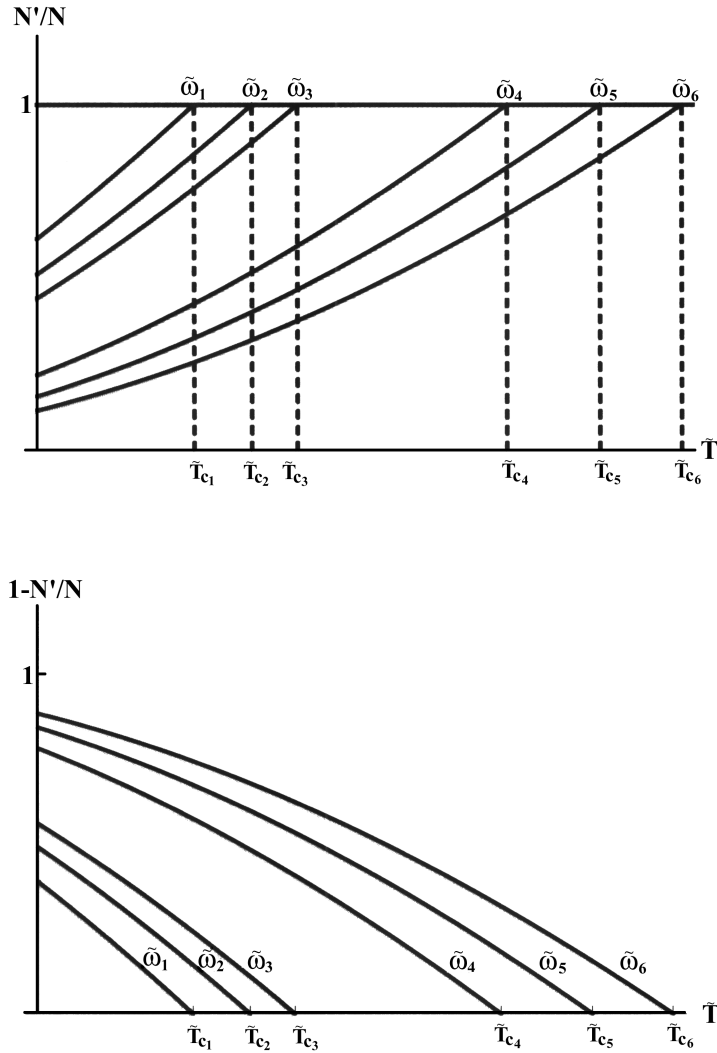


Рис. 3. Температурные зависимости относительного числа надконденсатных частиц  $N'/N$  и частиц, находящихся в конденсате  $N_0/N = 1 - N'/N$  для значений параметров  $\tilde{\omega}_i$ , приведённых на рис. 2.

где  $\tilde{\mu}$  определяется из уравнения:

$$\tilde{T}^{3/2} F_{3/2} \left( \frac{\tilde{\omega} - \tilde{\mu}}{\tilde{T}} \right) = C_{bp}; \quad (28)$$

$$\tilde{\mu} = \begin{cases} 0, & \tilde{T} \leq \tilde{T}_c; \\ \tilde{\mu}(\tilde{T}), & \tilde{T} \geq \tilde{T}_c. \end{cases}$$

Связь  $\tilde{\mu}$  с химическим потенциалом системы  $\mu$  даётся соотношением  $\tilde{\mu} = (\mu - E_{bp})/\omega^*$ . Из (27)-(28) также следуют выражения для свободной энергии:  $F = -2E/3$  и энтропии  $S = -\partial F/\partial T$ .

На рис. 4 приведены температурные зависимости  $\Delta E = \tilde{E} - \tilde{E}_{bp}$  для вышеуказанных значений параметров  $\omega_i$ . Точки излома на кривых  $\Delta E_i(\tilde{T})$  соответствуют значениям критических температур  $T_{c_i}$ .

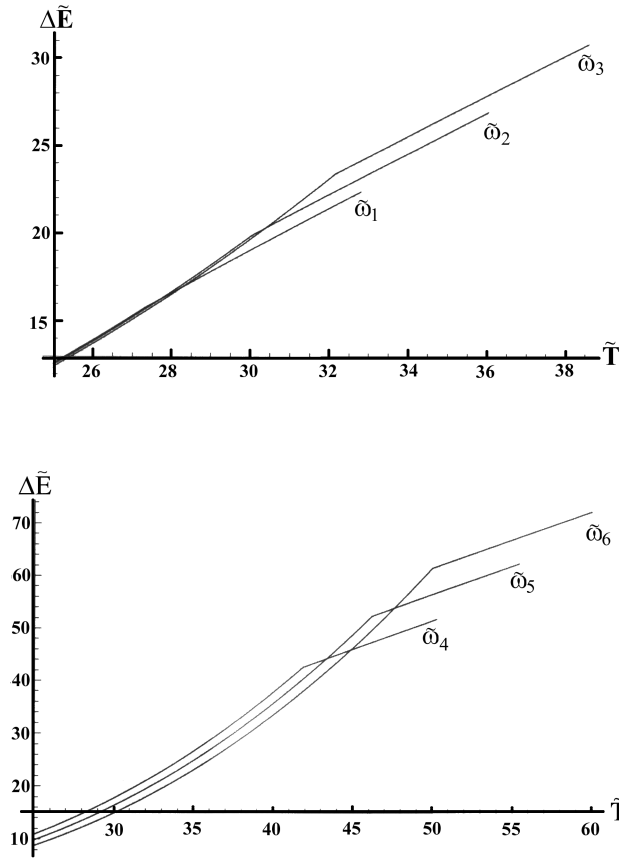


Рис. 4. Температурные зависимости  $\Delta E(\tilde{T}) = \tilde{E}(\tilde{T}) - \tilde{E}_{bp}$  для значений параметров  $\tilde{\omega}_i$ , приведённых на рис. 2, 3.

Полученные зависимости позволяют найти теплоёмкость ГИ-биполярного газа:  $C_v(\tilde{T}) = d\tilde{E}/d\tilde{T}$ . Из (27) для  $C_v(\tilde{T})$  при  $\tilde{T} \leq \tilde{T}_c$  получим:

$$C_v(\tilde{T}) = \frac{\tilde{T}^{3/2}}{2C_{bp}} \left[ \frac{\tilde{\omega}^2}{\tilde{T}^2} F_{1/2} \left( \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}} \right) + 6 \left( \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}} \right) F_{3/2} \left( \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}} \right) + 5 F_{5/2} \left( \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}} \right) \right], \quad (29)$$

$$F_{1/2}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{x}} \frac{dx}{e^{x+\alpha} - 1}.$$

Из (29) следует известная экспоненциальная зависимость теплоёмкости при низких температурах  $C_v \sim \exp(-\omega_0/T)$ , обусловленная наличием энергетической щели  $\omega_0$ .

На рис. 5 приведены температурные зависимости теплоёмкости  $C_v(\tilde{T})$  для вышеуказанных значений параметров  $\tilde{\omega}_i$ . В таблице I для значений параметров  $\tilde{\omega}_i$  приведены величины скачков теплоёмкости:

$$\Delta \frac{\partial C_v(\tilde{T})}{\partial \tilde{T}} = \left. \frac{\partial C_v(\tilde{T})}{\partial \tilde{T}} \right|_{\tilde{T}=\tilde{T}_c+0} - \left. \frac{\partial C_v(\tilde{T})}{\partial \tilde{T}} \right|_{\tilde{T}=\tilde{T}_c-0} \quad (30)$$

в точках перехода.

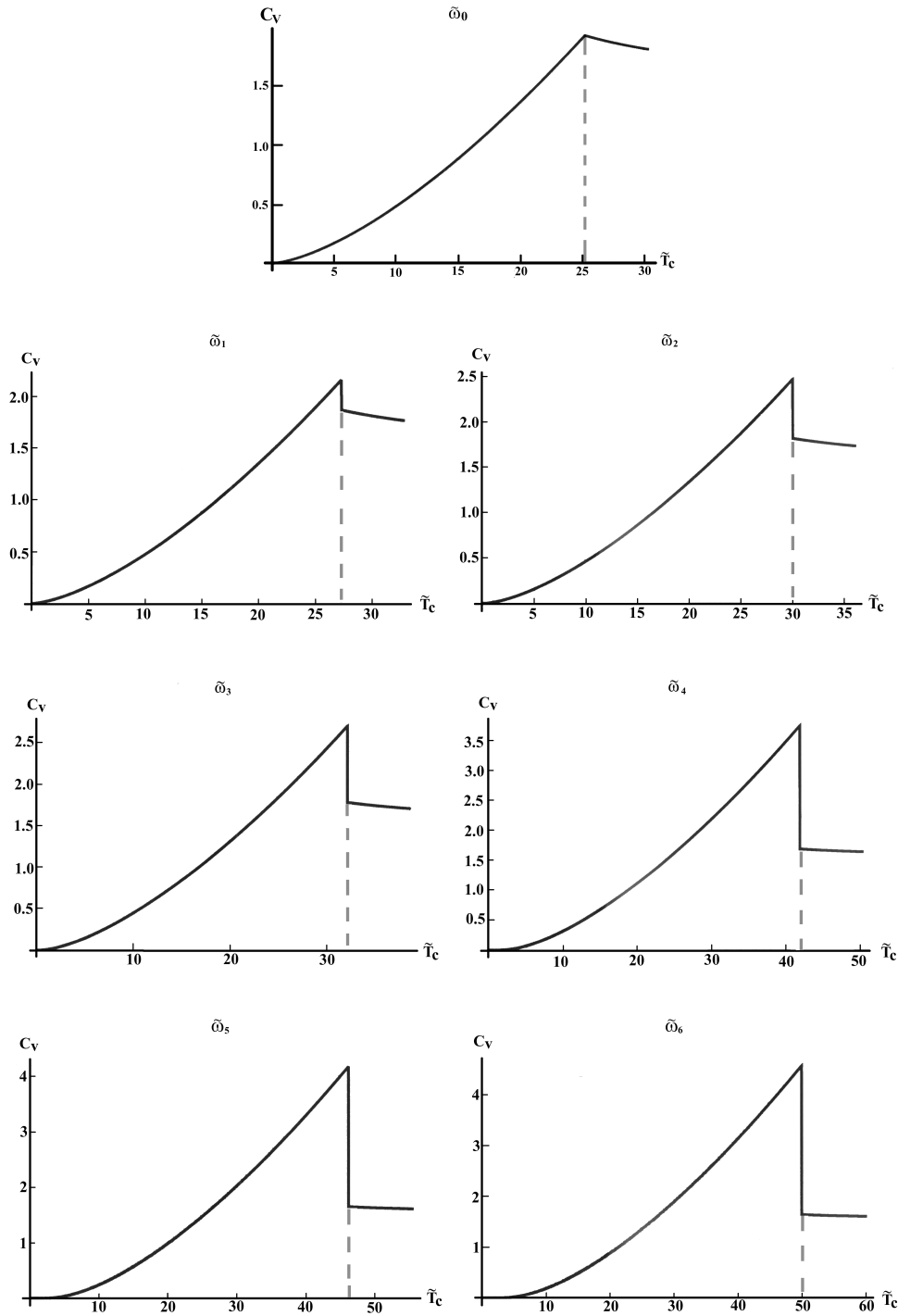


Рис. 5. Температурные зависимости теплоёмкости для различных значений параметров  $\omega_i$ :  $\omega_0 = 0$ ;  $\tilde{T}_{C_0} = 25, 2445$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c1}) = 1, 925$ ;  $\omega_1 = 0, 2$ ;  $\tilde{T}_{C_1} = 27, 325$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c1} - 0) = 2, 162$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c1} + 0) = 1, 868$ ;  $\omega_2 = 1$ ;  $\tilde{T}_{C_2} = 30, 0255$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c2} - 0) = 2, 465$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c2} + 0) = 1, 812$ ;  $\omega_3 = 2$ ;  $\tilde{T}_{C_3} = 32, 1397$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c3} - 0) = 2, 699$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c3} + 0) = 1, 777$ ;  $\omega_4 = 10$ ;  $\tilde{T}_{C_4} = 41, 8727$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c4} - 0) = 3, 740$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c4} + 0) = 1, 6779$ ;  $\omega_5 = 15$ ;  $\tilde{T}_{C_5} = 46, 1863$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c5} - 0) = 4, 181$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c5} + 0) = 1, 651$ ;  $\omega_6 = 20$ ;  $\tilde{T}_{C_6} = 49, 9754$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c6} - 0) = 4, 560$ ;  $C_v(\tilde{T}_{c6} + 0) = 1, 633$ .

Полученные зависимости позволяют найти скрытую теплоту перехода  $q = TS$ , где  $S$  – энтропия надконденсатных частиц. В точке перехода



эта величина равна:  $q = 2T_c C_v(T_c - 0)/3$ , где  $C_v(T)$  определяется формулой (29), и для вышеуказанных значений параметров  $\omega_i$  приведена в Таблице I.

Таблица I. Рассчитанные значения характеристик бозе-газа  
ТИ-биполяронов с концентрацией  $n = 10^{21} \text{ см}^{-3}$

i	0	1	2	3	4	5	6
$\tilde{\omega}_i$	0	0,2	1	2	10	15	20
$T_{ci}/\omega_{oi}$	$\infty$	136,6	30	16	4,2	3	2,5
$q_i/T_{ci}$	1,3	1,44	1,64	1,8	2,5	2,8	3
$-\Delta(\partial C_{v,i}/\partial \tilde{T})$	0,11	0,12	0,12	0,13	0,14	0,15	0,15
$C_{v,i}(T_c - 0)$	1,9	2,16	2,46	2,7	3,74	4,2	1,6
$(C_s - C_n)/C_n$	0	0,16	0,36	0,52	1,23	1,53	1,8
$n_{bpi} \cdot \text{см}^3$	$16 \cdot 10^{19}$	$9,4 \cdot 10^{18}$	$4,2 \cdot 10^{18}$	$2,0 \cdot 10^{18}$	$1,2 \cdot 10^{17}$	$5,2 \cdot 10^{14}$	$2,3 \cdot 10^{13}$

$\tilde{\omega}_i = \omega_i/\omega^*$ ,  $\omega^* = 5\text{мЭВ}$ ,  $\omega_i$  – энергия оптического фонона;  $T_{ci}$  – критическая температура перехода,  $q_i$  – скрытая теплота перехода из конденсатного в надконденсатное состояние;

$-\Delta(\partial C_{v,i}/\partial \tilde{T}) = \left. \partial C_{v,i}/\partial \tilde{T} \right|_{\tilde{T}=\tilde{T}_{ci}+0} - \left. \partial C_{v,i}/\partial \tilde{T} \right|_{\tilde{T}=\tilde{T}_{ci}-0}$  – скачок теплоёмкости при СП переходе,  $\tilde{T} = T/\omega^*$ ;  $C_{v,i}(T_c - 0)$  – теплоёмкость в СП фазе в критической точке;  $C_s = C_v(T_c - 0)$ ,  $C_n = C_v(T_c + 0)$ . Расчёты проведены для концентрации ТИ-биполяронов  $n = 10^{21} \text{ см}^{-3}$  и эффективной массы зонного электрона  $m^* = m_0$ .

В таблице приведены также значения концентраций ТИ-биполяронов  $n_{bpi}$  для ВТСП  $YBa_2Cu_3O_7$ , исходя из экспериментального значения температуры перехода  $T_c = 93\text{K}$  (§6).

## 5. Токовые состояния ТИ-биполярного газа

Выше мы рассмотрели равновесные свойства газа ТИ-биполяронов. Само по себе образование бозе-конденсата ещё не означает, что он обладает сверхпроводящими свойствами. Чтобы доказать такую возможность, рассмотрим полный импульс ТИ-биполярона:

$$\vec{P} = \hat{P}_1 + \hat{P}_2 + \sum \vec{k} a_k^+ a_k, \quad (31)$$

где  $\hat{P}_1$  и  $\hat{P}_2$  – импульс первого и второго электрона соответственно. Легко проверить, что  $\vec{P}$  коммутирует с гамильтонианом (1) и, следовательно, является сохраняющейся величиной, т.е. с-числом.

По этой причине для рассмотрения неравновесных свойств и, прежде всего, токовых состояний можно воспользоваться обобщением преобразования Гейзенберга (4), введя вместо (4) преобразование:

$$S_1(\mathcal{P}) = \exp \left\{ \vec{\mathcal{P}} - \sum_k \vec{k} a_k^+ a_k \right\}. \quad (32)$$

Общее выражение для функционала полной энергии ТИ-биполярона при  $\vec{\mathcal{P}} \neq 0$  дано в [31]. ТИ-биполяроны, находящиеся в конденсатном состоянии, имеют единую волновую функцию для всего конденсата и не термализуются в состоянии с  $\vec{\mathcal{P}} \neq 0$ . В надконденсатной части фононы, волновые векторы которых дают вклад в  $\vec{\mathcal{P}}$  (31), термализованы, и их суммарный импульс будет равен нулю.

Таким образом, все изменения при рассмотрении случая  $\vec{\mathcal{P}} \neq 0$  касаются только выражения для энергии основного состояния, которое становится зависящим от  $\vec{\mathcal{P}}$ , а спектр возбуждённых состояний (14), (15) остаётся неизменным. Отсюда следует вывод о резком переходе от бестокового к токовому состоянию при переходе через критическую точку, что находится в соответствии с экспериментом.

## 6. Сравнение с экспериментом

На рис. 4 показаны типичные зависимости  $E(\tilde{T})$ . Из них следует, что в точке перехода энергия является непрерывной функцией  $\tilde{T}$ . Это означает, что на сам переход энергию затрачивать не надо и переход является фазовым переходом 2-го рода в полном соответствии с экспериментом. В то же время переход бозе-частиц из конденсатного состояния в надконденсатное связан с энергозатратами, которые определяются величиной  $q$  (§4, Таблица I), определяющей скрытую теплоту перехода бозе газа, что делает такой переход фазовым переходом 1-го рода.

Рассмотрим в качестве примера ВТСП  $YBa_2Cu_3O_7$  с температурой перехода  $90 \div 93\text{K}$ , объём элементарной ячейки  $0,1734 \cdot 10^{-21}\text{см}^{-3}$ , концентрация дырок  $n \approx 10^{21}\text{см}^{-3}$ . Согласно оценкам [41], энергия Ферми равна:  $\epsilon_F = 0,37\text{эВ}$ . Концентрацию ТИ-биполяронов в  $YBa_2Cu_3O_7$  найдём из уравнения (22):

$$\frac{n_{bp}}{n} C_{bp} = f_{\tilde{\omega}}(\tilde{T}_c) \quad (33)$$

с  $\tilde{T}_c = 1,6$ . В таблице I приводятся значения  $n_{bp,i}$  для значений параметров  $\tilde{\omega}_i$ , приведённых в §4. Из таблицы I следует, что  $n_{bp,i} \ll n$ . Таким образом, только малая часть носителей тока находится в биполяронном состоянии, что оправдывает рассматриваемое нами приближение газа ТИ-биполяронов низкой плотности. Уровни энергии таких ТИ-биполяронов

лежат вблизи поверхности Ферми и описываются волновой функцией:

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_F\vec{r}/\sqrt{2}}\varphi(\vec{r}), \quad (34)$$

которая приводит к замене величины  $\bar{T}$ , фигурирующей в (6), на:

$$\bar{T} = -2 \langle \varphi | \Delta_r | \varphi \rangle + k_F^2, \quad (35)$$

то есть к отсчёту энергии от уровня Ферми (последний член в правой части (35) в размерных единицах равен  $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m^*$ ).

Согласно излагаемому подходу, для возникновения сверхпроводимости необходимо образование спаренных состояний. Условие образования таких состояний имеет вид:

$$|E_{bp}| \geq 2 |E_p|, \quad (36)$$

где  $E_p$  – энергия ТИ-полярона [36]. Условие (36) определяет величину псевдощели:

$$\Delta_1 = |E_{bp} - 2E_p|. \quad (37)$$

При  $\Delta_1 \gg \omega_0$  величина псевдощели может намного превышать как  $T_c$ , так и энергию щели (т.е.  $\omega_0$ ). Из выражения для спектра  $E_{bp}$  и  $E_p$  (14)-(15) вытекает, что угловая зависимость  $\Delta_1(\vec{k})$  полностью определяется симметрией изоэнергетической поверхности фононного волнового вектора  $\vec{k}$ . Ранее к этому выводу пришёл Беннет [42], доказавший, что основным источником анизотропии сверхпроводящих свойств является угловая зависимость фононного спектра, хотя определённый вклад вносит и анизотропия поверхности Ферми.

Из сказанного следует, что образование псевдощели, – это фазовый переход, предшествующий последующему фазовому переходу в сверхпроводящее состояние. Последние эксперименты [43] также свидетельствуют в пользу этого утверждения.

В работе [34] был проведён расчёт корреляционной длины для ТИ-биполяронов. Согласно [34], в ВТСП материалах её величина может меняться от нескольких ангстрем до нескольких десятков ангстрем, что также находится в согласии с экспериментом.

Особый интерес представляет определить характерную энергию фононов, ответственных за образование ТИ-биполяронов и сверхпроводящих свойств оксидных керамик. С этой целью воспользуемся сравнением рассчитанных значений скачков теплоёмкостей с экспериментальными данными.

Как известно, в теории БКШ скачок теплоёмкости равен

$$\left. \frac{C_s - C_n}{C_n} \right|_{T_c} = 1,43,$$

где  $C_s$  – теплоёмкость в сверхпроводящей фазе, а  $C_n$  – в нормальной фазе, и не зависит от параметров модельного гамильтониана. Как следует из численных расчётов, приведённых на рис. 5 и в таблице I, в отличие от теории БКШ, величина скачка зависит от фононной частоты. Таким образом, изложенный подход предсказывает существование изотопического эффекта для скачка теплоёмкости.

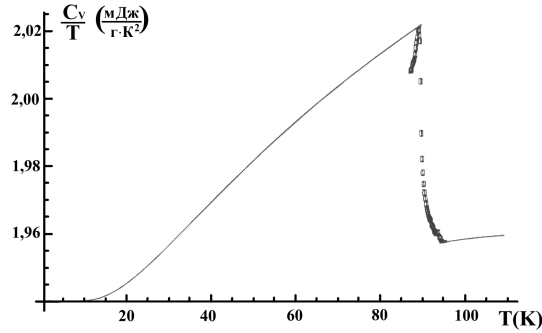


Рис. 6. Сравнение теоретической (сплошная линия) и экспериментальной [44] (прерывистая линия) зависимостей в области скачка теплоёмкости.

Как следует из рис. 6, скачок теплоёмкости, вычисленный теоретически (§4), совпадает с экспериментальным значением в  $YBa_2Cu_3O_7$  [44], при  $\tilde{\omega} = 1,5$ , то есть при  $\omega = 7,5$  мэВ. Это соответствует концентрации ТИ-биполяронов  $n_{bp} = 2,6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Таким образом, в отличие от широко распространённого мнения, что в оксидных керамиках за сверхпроводимость ответственны высокоэнергетичные фононы (с энергией  $70 \div 80$  мэВ [45]), в действительности за сверхпроводимость в ВТСП материалах должны быть ответственны мягкие фононные моды.

Отметим, что при расчёте температуры перехода считалось, что эффективная масса  $M_e$  в уравнении (22) не зависит от направления волнового вектора, то есть был рассмотрен изотропный случай.

В анизотропном случае, выбирая в качестве координатных главные оси вектора  $k$ , получим вместо эффективной массы  $M_e$  величину

$$(M_{ex}M_{ey}M_{ez})^{1/3}.$$

В слоистых ВТСП материалах значения эффективных масс, лежащих в плоскости слоёв  $M_{ex}$ ,  $M_{ey}$ , близки по величине. Полагая в этом случае

$$M_e = M_{ex} = M_{ey} = M_{\parallel}, M_{ez} = M_{\perp},$$

получим вместо величины  $C_{bp}$ , определяемой (22), величину  $\tilde{C}_{bp} = C_{bp}/\gamma$ ,  $\gamma^2 = M_{\perp}/M_{\parallel}$  – параметр анизотропии. Таким образом, учёт анизотропии

эффективных масс даёт для концентрации  $n_{bp}$  величину  $\tilde{n}_{bp} = \gamma n_{bp}$ . Следовательно, учёт анизотропии может на порядок и более увеличить оценку концентрации ТИ-биполяронов. Если для  $YBa_2Cu_3O_7$  принять оценку  $\gamma^2 = 30$  [45], то для концентрации ТИ-биполяронов получим:  $\tilde{n}_{bp} = 1,4 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , что оставляет в силе общий вывод: в рассматриваемом случае лишь малая часть носителей тока находится в ТИ-биполярном состоянии. Ситуация может измениться, если параметр анизотропии очень велик. Так, например, в слоистых ВТСП  $Bi-Sr-Ca-Cu-O$  параметр анизотропии  $\gamma > 100$ , соответственно концентрация ТИ-биполяронов в этих соединениях может быть одного порядка с полной концентрацией носителей тока.

Другой важный вывод, к которому приводит учёт анизотропии эффективных масс, – зависимость температуры перехода  $T_c$  не от  $n_{bp}$  и  $M_{\parallel}$  по отдельности, а только от их отношения, что непосредственно следует из (22).

## 7. Необходимые обобщения теории

Выше был рассмотрен случай идеального газа ТИ-биполяронов. При малой концентрации ТИ-биполяронов их кулоновское взаимодействие будет сильно заэкранировано, что оправдывает использование модели идеального газа.

Если концентрация ТИ-биполяронов велика (например  $n = 10^{21} \text{ см}^{-3}$ , как это считалось в §4), то такой бозе-газ уже нельзя считать идеальным. Учёт кулоновского взаимодействия между биполяронами становится необходимым. С этой целью можно воспользоваться теорией Боголюбова [46] для слабонеидеального бозе-газа, согласно которой спектр элементарных возбуждений бозона с импульсом  $k$  будет определяться выражением:

$$E(k) = \sqrt{k^2 u^2(k) + (k^2/2m_B)^2}, \quad (38)$$

где  $u(k) = \sqrt{n_B V(k)/m_B}$ ,  $V(k)$  – Фурье компонента потенциала парного взаимодействия между заряженными бозонами:  $V(k) = 4\pi e_B^2/\epsilon_0 k^2$ ,  $e_B$  и  $m_B$  – заряд и масса бозона,  $n_B$  – концентрация бозонов.

Отсюда получаем:

$$E(k) = \sqrt{(\hbar\omega_p)^2 + (k^2/2m_B)^2}, \quad \omega_p = \sqrt{4\pi e^2 n_B/\epsilon_0 m_B}, \quad (39)$$

$\omega_p$  – плазменная частота. Согласно (39), спектр возбуждений квазичастиц неидеального газа характеризуется конечной энергетической щелью, которая в длинноволновом пределе равна  $\omega_p$ . К такому же результату можно прийти, если кулоновское взаимодействие между заряженными бозонами рассматривать как результат электрон-плазмонного взаимодействия. Согласно [47], гамильтониан электрон-плазмонного взаимодействия по

своей структуре совпадает с фрёлиховским гамильтонианом, в котором вместо фононной частоты фигурирует плазменная частота. Это немедленно приводит к энергетической щели, равной плазменной частоте  $\omega_p$ , если в (39) положить:  $e_B = 2e$ ,  $m_B = 2m^*$ ,  $n_B = n/2$ , где  $n$  – концентрация электронов. Таким образом, при  $\omega_p < \omega_0$  энергетическая щель будет определяться  $\omega_p$ , а при  $\omega_p > \omega_0$  щель по-прежнему будет определяться  $\omega_0$ .

В действительности в реальных ВТСП имеются не только фононные и плазменные ветви, но и другие элементарные возбуждения, которые могут принимать участие в спаривании электронов, например спиновые флуктуации. Обобщение теории на случай взаимодействия с различными ветвями возбуждений, которые будут давать вклад в энергию основного состояния, величину щели и закон дисперсии ТИ-биполярона является актуальной задачей. Очевидно, учёт такого взаимодействия приведёт к увеличению энергии связи как ТИ-биполяронов, так и ТИ-поляронов. По этой причине априори без конкретных расчётов ничего нельзя сказать о том, как изменится условие стабильности ТИ-биполяронных состояний, определяемой условием (36).

Другой важной задачей является обобщение теории на случай промежуточной силы связи ЭФВ. Формально выражение для функционала энергии основного состояния ТИ-биполярона (12) применимо для любой величины константы связи ЭФВ. По этой причине такой расчёт не изменит спектр возбуждённых состояний ТИ-биполярона, однако изменит критерии выполнения условия стабильности ТИ-биполярона (36).

## 8. Заключительные замечания

В данной статье представлены выводы, вытекающие из последовательного трансляционно-инвариантного рассмотрения ЭФВ. Спаривание электронов при любой константе связи, основанное на таком рассмотрении, приводит к представлению о ТИ-поляронах и ТИ-биполяронах. Будучи бозонами, ТИ-биполяроны могут испытывать бозе-конденсацию, приводящую к сверхпроводимости. Перечислим основные результаты, к которым приводит такой подход. Прежде всего, изложенная теория снимает проблему большой величины эффективной массы биполярона (§4). Как следствие, снимаются формальные ограничения на величину критической температуры перехода. Теория количественно объясняет такие термодинамические свойства ВТСП, как наличие (§4) и величину (§6) скачка теплоёмкости, отсутствующего в теории бозе-конденсации идеального газа. Теория объясняет наличие большого отношения ширины псевдощели к  $T_c$  (§6). Теория объясняет небольшую величину корреляционной длины [34]. Теория объясняет наличие в ВТСП материалах щели (§3) и псевдощели (§6). Естественное объяснение получает угловая зависимость щели

и псевдощели (§6).

Соответственно, изотопический эффект автоматически вытекает из выражения (22), в котором в качестве щели фигурирует фононная частота  $\omega_0$ . Вывод о зависимости температуры перехода  $T_c$  от отношения  $n_{bp}/M_{\parallel}$  (§6) коррелирует с универсальным для всех ВТСП материалов законом Уемуры, согласно которому температура перехода связана с концентрацией носителей тока, поделённой на его эффективную массу [48].

Применение теории к 1D и 2D системам приводит к качественно новым результатам, поскольку наличие щели в спектре ТИ-биполярона автоматически снимает расходимости при малых импульсах, присущих теории идеального бозе-газа. Рассмотрение этих вопросов будет изложено автором отдельно. Случай 1D-полярона был рассмотрен в работе [49].

## 9. Приложение. Замечание об обозначениях

Функция  $F_{3/2}(\alpha)$  называется полилогарифм  $= Li_{3/2}(e^{-\alpha})$ , в математике это функция *PolyLog*, так что функция  $f_{\tilde{\omega}}$  в (22) будет:

$$f_{\tilde{\omega}} = \tilde{T}^{3/2} PolyLog \left[ 3/2, e^{-\tilde{\omega}/\tilde{T}} \right].$$

В общем случае функция *PolyLog* порядка  $s$  определяется как:

$$PolyLog [s, e^{-\alpha}] = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} \frac{t^{s-1}}{e^{t+\alpha} - 1} dt,$$

где  $\Gamma(s)$  – гамма-функция:  $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ ,  $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$ ,  $\Gamma(5/2) = 3\sqrt{\pi}/4$ .

Соответственно, встречающиеся в тексте функции  $F_{1/2}$ ,  $F_{3/2}$ ,  $F_{5/2}$  будут:

$$F_{1/2} = 2PolyLog \left[ 1/2, e^{-\tilde{\omega}/\tilde{T}} \right];$$

$$F_{3/2} = PolyLog \left[ 3/2, e^{-\tilde{\omega}/\tilde{T}} \right];$$

$$F_{5/2} = 3/2PolyLog \left[ 5/2, e^{-\tilde{\omega}/\tilde{T}} \right].$$

## Библиографический список

1. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Статистическая физика, часть 2, Теория конденсированного состояния М.: Наука, Физматлит, (1978).
2. J.G. Bednorz, K.A. Müller, Possible high  $T_c$  superconductivity in the Ba-La-Cu-O system // Z. Physik B - Condensed Matter 64, 189 (1986).
3. В.Л. Гинзбург, Сверхпроводимость: позавчера, вчера, сегодня, завтра // УФН 170, 619 (2000).

4. S.L. Kakani, S. Kakani, Superconductivity, Anshan, Kent, UK (2009).
5. T. Tohyama, Recent Progress in Physics of High-Temperature Superconductors // Jpn. J. Appl. Phys. 51, Article ID 010004 (2012).
6. S. Kruchinin, H. Nagao, S. Aono, Modern Aspects of superconductivity. Theory of superconductivity, World Sci., River Edge, NJ USA (2011).
7. K.P. Sinha, S.L. Kakani, Fermion local charged boson model and cuprate superconductors // Proceedings – National Academy of Sciences, India. Section A, Physical Sciences 72, 153 (2002).
8. K.N. Benneman, J.B. Ketterson, Superconductivity: Conventional and Unconventional Superconductors 1-2, Springer, New-York, NY, (2008).
9. J.R. Schrieffer, Theory of Superconductivity Westview Press, Oxford, UK (1999).
10. A.S. Alexandrov, Theory of Superconductivity from weak to strong coupling, IOP publishing, Bristol, UK (2003).
11. N.M. Plakida, High Temperature Cuprate Superconductors: Experiment, Theory and Applications, Springer, Heidelberg, Germany (2010).
12. I. Askerzade, Unconventional Superconductors 153, of Springer Series in Material Science, Springer, Berlin, Germany, (2012).
13. O. Gunnarsson, O. Rösch, Interplay between electron–phonon and Coulomb interactions in cuprates, J. Phys.: Condens. Matter 20, 043201 (2008).
14. T. Moriya, K. Ueda, Spin fluctuations and high temperature superconductivity // Adv. Phys. 49, 555 (2000).
15. D. Manske, Theory of Unconventional Superconductors, Springer, Heidelberg, Germany (2004).
16. J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, Theory of Superconductivity // Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
17. A.S. Alexandrov, N. Mott, Polarons & Bipolarons, World Sci. Pub. CO Inc, Singapore (1996).
18. А.С. Александров, А.Б. Кребс, Полярны в высокотемпературных сверхпроводниках // УФН 162, 1 (1992).



19. P.W. Anderson, Condensed matter: the continuous revolution // *Physics World* 8(12), 37 (1995).
20. N.F. Mott, High-temperature superconductivity debate heats up // *Physics World* 9(1), 16 (1996).
21. P.W. Anderson, reply to N.F. Mott // *Physics World* 9(1), 16 (1996).
22. E.V.L. de Mello, J. Ranninger, Dynamical properties of small polarons // *Phys. Rev. B* 55, 14872 (1997).
23. Yu.A. Firsov, V.V. Kabanov, E.K. Kudinov, A.S. Alexandrov, Comment on "Dynamical properties of small polarons" // *Phys. Rev. B* 59, 12132 (1999).
24. E.V.L. de Mello, J. Ranninger, Reply to "Comment on 'Dynamical properties of small polarons' " // *Phys. Rev. B* 59, 12135 (1999).
25. R.A. Ogg, Superconductivity in Solid Metal-Ammonia Solutions // *Phys. Rev.* 70, 93 (1946).
26. В.Л. Винецкий, Э.А. Пашицкий, Сверхтекучесть заряженного бозе-газа и биполяронный механизм сверхпроводимости // *Украинский физич. журн.* 20, 338 (1975).
27. Э.А. Пашицкий, В.Л. Винецкий, Плазмонный и биполяронный механизмы высокотемпературной сверхпроводимости // *Письма в ЖЭТФ* 46, Приложения, 124 (1987).
28. D. Emin, Formation, motion, and high-temperature superconductivity of large bipolarons // *Phys. Rev. Lett.* 62, 1544 (1989).
29. В.Л. Винецкий, Н.И. Каширина, Э.А. Пашицкий, Биполяронные состояния в ионных кристаллах и проблема высокотемпературной сверхпроводимости // *Украинский физич. журн.* 37, 77 (1992).
30. M.R. Schafroth, Superconductivity of a Charged Boson Gas // *Phys. Rev.* 96, 1149 (1954).
31. А.В. Тулуб, Учет отдачи в нерелятивистской квантовой теории поля // *Вестник ЛГУ* 15 (22), 104 (1960).
32. А.В. Тулуб, Медленные электроны в полярных кристаллах // *ЖЭТФ* 41, 1828 (1961).
33. В.Д. Лахно, Энергия и критическое значение параметра ионной связи трёхмерного биполярона большого радиуса // *ЖЭТФ* 137, 926 (2010).

34. V.D. Lakhno, Translation-invariant bipolarons and the problem of high-temperature superconductivity // Sol. St. Comm. 152, 621 (2012).
35. Н.И. Каширина, В.Д. Лахно, А.В. Тулуб, Теорема вириала и проблема основного состояния в теории полярона // ЖЭТФ 141, 994 (2012).
36. В.Д. Лахно, Трансляционно-инвариантная теория полярона (биполярона) и проблема квантования в окрестности классического решения // ЖЭТФ 143, 1033 (2013).
37. В.Д. Лахно, Анзац Пекара и проблема сильной связи в теории полярона // УФН 185, 317 (2015).
38. W. Heisenberg, Die Selbstenergie des Elektrons. (German) // Zs. für Physik 65, 4 (1930).
39. T. Lee, F. Low, D. Pines, The motion of slow electrons in a polar crystal // Phys. Rev. 90, 297 (1953).
40. С.В. Тябликов, Методы квантовой теории магнетизма, М.: Наука (1975).
41. Л.П. Горьков, Н.Б. Копнин, Высокотемпературные сверхпроводники с точки зрения эксперимента // УФН 156, 117 (1988).
42. A.J. Bennett, Theory of the Anisotropic Energy Gap in Superconducting Lead // Phys. Rev. 140, A1902 (1965).
43. Rui-Hua He, M. Hashimoto et al., From a Single-Band Metal to a High-Temperature Superconductor via Two Thermal Phase Transitions // Science 331, 1579 (2011).
44. N. Overend, M.A. Howson, I.D. Lawrie, 3D X-Y scaling of the specific heat of  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  single crystals // Phys. Rev. Lett. 72, 3238 (1994).
45. A. Marouchkine, Room-Temperature Superconductivity, Cambridge Int. Sci. Publ., Cambridge (2004).
46. Н.Н. Боголюбов, К теории сверхтекучести // Изв. АН СССР, Сер. физ. 11, 77 (1947).
47. V.D. Lakhno, in Polarons and Applications ed. by V.D. Lakhno, Wiley, Chichester (1994), p.514.
48. Y.J. Uemura et al., Universal Correlations between  $T_c$  and  $n_s/m^*$  (Carrier Density over Effective Mass) in High- $T_c$  Cuprate Superconductors // Phys.

Rev. Lett. 62, 2317 (1989); Basic similarities among cuprate, bismuthate, organic, Chevrel-phase, and heavy-fermion superconductors shown by penetration-depth measurements // 66, 2665 (1991).

49. V.D. Lakhno, Large-radius Holstein polaron and the problem of spontaneous symmetry breaking // Progr. Theor. Exp. Phys. 073I01 (2014).