Физика низких температур, 1995, т. 21, № 8, с. 810–815 УДК 538.945

# Некоторые особенности зонного спектра медно-оксидных ВТСП

М. Д. Медведев

*Одесский государственный университет им. И. И. Мечникова,*
*Украина, 270100, г. Одесса, ул. Петра Великого, 2*
E-mail: mdm@dtp.odessa.ua

Статья поступила в редакцию 15 декабря 1994 г., после переработки 14 марта 1995 г.

Доказана возможность существования высокой плотности одноэлектронных состояний на уровне Ферми квазидвумерного зонного спектра медно-оксидных ВТСП в случае слабых кулоновских корреляций зонных электронов и при их отсутствии.

Доказано можливість існування високої густини одноелектронних станів на рівні Фермі квазідвовимірного зонного спектра мідно-оксидних ВТНП у випадку слабких кулонівських кореляцій зонних електронів та при їх відсутності.

Несмотря на многочисленные попытки и значительные усилия современной науки решить проблему высокотемпературной сверхпроводимости, ей еще только предстоит приоткрыть завесу тайны над истинными причинами этого необычного природного явления. Единственным, что, кажется, не вызывает сомнений, является принадлежность медно-оксидных ВТСП к классу сильно коррелированных систем [1–3], что проявляется в близости сверхпроводящих составов к переходу металл–диэлектрик. Природа же сверхпроводящего состояния и механизм сверхпроводящего спаривания остаются до сих пор загадкой. Проведенные в рамках модели Хаббарда численные расчеты свойств ВТСП купратов в нормальном состоянии [4–7], например магнитной восприимчивости, коэффициента Холла [8], сдвига Найта [9], времени ядерной релаксации [10], оптической проводимости [11], плотности одноэлектронных состояний [12], показали хорошее согласование полученных результатов с экспериментом. Однако первоначально расчеты сверхпроводящего состояния для этой модели [13,14] указали на неустойчивость процесса образования куперовских пар.

Сложность рассмотрения ВТСП купратов связана с необходимостью учета конкурентного соединения магнитных и сверхпроводящих свойств для единой системы носителей заряда [15,16]. Сильное одноузельное кулоновское отталкивание на атомах меди приводит к существованию в этих соединениях диэлектрической фазы, обладающей дальним антиферромагнитным порядком из-за упорядочения спинов на узлах медной подрешетки. При переходе в металлическое состояние кулоновские корреляции ослабевают, дальний антиферромагнитный порядок разрушается, однако антиферромагнитные корреляции сохраняются на достаточно больших расстояниях.

Все вышеперечисленные особенности проблемы ВТСП привели к появлению множества моделей высокотемпературной сверхпроводимости: концепции резонирующих валентных связей, парамагнитного обмена, спинового мешка [17,18], анионной сверхпроводимости [19] и кислородных дырок, взаимодействующих с локализованными спинами [20], которые предполагают новую картину основного состояния сверхпроводника и отличный от БКШ [21] механизм сверхпроводящего спаривания.

Полученное, однако, сверхпроводящее состояние не может объяснить все особенности реальных ВТСП, в частности характер многих температурных зависимостей описывающих ВТСП параметров, что непосредственно связано с открытой проблемой симметрии сверхпроводящего состояния [22].

Настоящая работа основана на модельных построениях работ [23,24], согласно которым температура сверхпроводящего перехода $T_c$ значительно возрастает в результате расширения фазового пространства электронов проводимости, участвующих в формировании сверхпроводящего состояния, что является следствием специфической структуры спектра одноэлектронных возбуждений, в котором уровень Ферми расположен вблизи края зоны проводимости. Основной мотивацией данной статьи явилось желание показать, что подобная ситуация может реализоваться в медно-оксидных ВТСП и, как будет показано ниже, только в случаях отсутствия кулоновских корреляций зонных электронов, а также при наличии слабого

© М. Д. Медведев, 1995

кулоновского отталкивания на узлах медной подрешетки.

Следствием расширения фазового пространства будет дополнительное увеличение уже большой из-за квазидвумерного кристаллического строения медно-оксидных ВТСП плотности одноэлектронных состояний в окрестности уровня Ферми, что при «традиционном», фононном, механизме образования сверхпроводящего состояния приводит к значительному повышению критической температуры $T_c$.

В зонных расчетах антиферромагнитный порядок может быть учтен в виде волны спиновой плотности, образующейся как результат нестинга (nesting) ферми-поверхности — скоррелированности двух электронов на поверхности Ферми, волновые векторы которых отличаются на $2\mathbf{k}_F$ ($\mathbf{k}_F$ — волновой вектор электрона на поверхности Ферми) [25].

В настоящей работе в результате последовательно проведенных зонных расчетов в приближении сильной связи доказана возможность существования высокой плотности одноэлектронных состояний на уровне Ферми с учетом квазидвумерного характера зонного спектра медно-оксидных ВТСП при слабых кулоновских корреляциях зонных электронов и их отсутствии.

В настоящее время установлено, что за сверхпроводимость ВТСП купратов ответственны $CuO_2$-плоскости и CuO-цепочки, являющиеся источником подвижных носителей заряда, дырок для $CuO_2$-плоскостей. Остальные элементы кристаллической структуры сверхпроводника не играют существенной роли [26,27]. Поэтому для определения зонного спектра электронов воспользуемся базисными волновыми функциями

$$\Psi_j^{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} \varphi_j(\mathbf{r} - \mathbf{l}) \quad (j = d, x, y) ,$$

где $\varphi_j(\mathbf{r} - \mathbf{l})$ — волновые функции $d_{x^2-y^2}$-орбитали атома Cu и $p_x$-, $p_y$-орбиталей атома O соответственно, лежащие в плоскости $CuO_2$ (рис. 1); $\mathbf{l}$ — координата узла кристаллической решетки, соответствующего атому $j$ элементарной ячейки кристалла; $N$ — количество элементарных ячеек в объеме кристалла; $\mathbf{k}$ — волновой вектор электрона.

Кроме того, в результате сильного расщепления по энергии в кристаллическом поле $\pi$- и $\sigma$-орбиталей, образованных $p_x$- и $p_y$-орбиталями двух кислородных атомов элементарной ячейки $CuO_2$-плоскости, в зонных расчетах будем рассматривать только связывающую $\Psi_{p_-}^{\mathbf{k}} = (1/\sqrt{2})(\Psi_x^{\mathbf{k}} + \Psi_y^{\mathbf{k}})$ и антисвязывающую $\Psi_{p_+}^{\mathbf{k}} = (1/\sqrt{2})(\Psi_x^{\mathbf{k}} - \Psi_y^{\mathbf{k}})$ $\sigma$-орбитали [28,29].

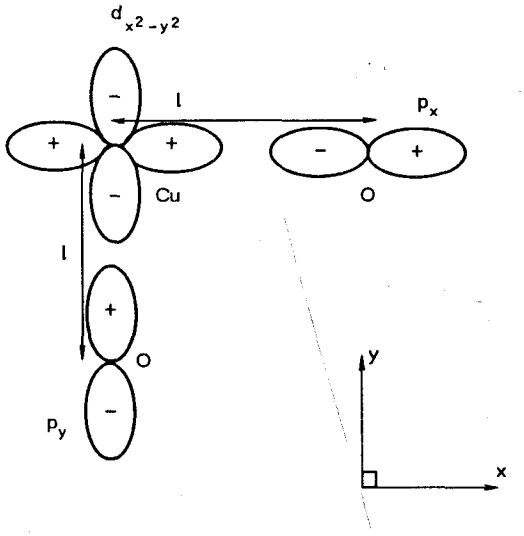


*Рис. 1.* $d_{x^2-y^2}$- и $p_\sigma$-орбитали элементарной ячейки $CuO_2$-плоскости ($l$ — расстояние между атомами Cu и O).

Гамильтониан $H$ зонного спектра электронов в базисе волновых функций $\Psi_{p_-}^{\mathbf{k}}$, $\Psi_{p_+}^{\mathbf{k}}$ и $\Psi_d^{\mathbf{k}}$ в приближении сильной связи и в отсутствие кулоновского отталкивания на узлах меди имеет вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Big\{ E_p^-(\mathbf{k}) a_{p^-}^+(\mathbf{k}) a_{p^-}(\mathbf{k}) + E_p^+(\mathbf{k}) a_{p^+}^+(\mathbf{k}) a_{p^+}(\mathbf{k}) +$$

$$+ E_d a_d^+(\mathbf{k}) a_d(\mathbf{k}) - i\sqrt{2} V_d \left(\sin k_x - \sin k_y\right) a_{p^+}^+(\mathbf{k}) a_d(\mathbf{k}) -$$

$$- i\sqrt{2} V_d \left(\sin k_x + \sin k_y\right) a_{p^+}^+(\mathbf{k}) a_d(\mathbf{k}) + \text{к.с.} \Big\} ,$$

где $a_i^+(\mathbf{k})$ и $a_i(\mathbf{k})$ ($i = p^-, p^+, d$) — операторы рождения и уничтожения одноэлектронных состояний, соответствующих рассматриваемым зонам $E_p^-(\mathbf{k})$, $E_p^+(\mathbf{k})$ и $E_d(\mathbf{k})$;

$$V_d = -\langle \varphi_d | H | \varphi_x \rangle = \langle \varphi_d | H | \varphi_y \rangle ; \; V_p = \langle \varphi_x | H | \varphi_y \rangle ;$$

$$E_p^{\pm}(\mathbf{k}) = E_p \pm 4V_p \sin k_x \sin k_y , \; 0 \le k_x , k_y < \pi ;$$

$k_x$ и $k_y$ — проекции вектора $\mathbf{k}a$ на оси координат $x$ и $y$ соответственно; $E_p$ и $E_d$ — значения энергий, соответствующие $p_x$- ($p_y$-) и $d_{x^2-y^2}$-атомным орбиталям.

Будем считать, что $V_d \ll V_p$, т.е. ширина кислородных зон $E_p^{\pm}(\mathbf{k})$ превосходит величину их гибридизации с плоской $E_d$-зоной.

В зависимости от положения уровня $E_d$ относительно зон $E_p$ возможны следующие три ситуации.

Зона $E_d$ может быть расположена далеко за пределами широких кислородных зон. В этом случае задача определения зонного спектра сводится к

применению теории возмущений. Это характерно для слабо допированного сверхпроводника в антиферромагнитной фазе, когда вырожденная по спину зона $E_d$ за счет сильного кулоновского отталкивания на узлах меди расщепляется на две невырожденные по спину зоны, одна из которых лежит выше, а другая ниже зон $E_p^{\pm}(\mathbf{k})$. В этом случае верхняя зона $E_d$ является пустой, а зоной проводимости является одна из полностью заполненных в недопированном состоянии кислородных зон, в которую в результате допирования сверхпроводника вносятся дырки. Гибридизация $E_d$- и $E_p^{\pm}(\mathbf{k})$-зон не приводит к повышению плотности электронных состояний на уровне Ферми, расположенном у верхнего края зоны проводимости. Поэтому мы будем рассматривать случай только слабых кулоновских корреляций зонных электронов.

Если зона $E_d$ лежит в глубине одной из кислородных зон, то их гибридизация также не приводит к повышению плотности одноэлектронных состояний на уровне Ферми, расположенном в середине одной из широких гибридизованных зон.

Иная ситуация возникает в случае зоны $E_d$, расположенной в окрестности максимума зоны $E_p^+(\mathbf{k})$:

$$E_d \approx E_p + 4V_p .$$

В результате гибридизации $E_d$- и $E_p^{\pm}(\mathbf{k})$-зон происходит образование двух новых гибридизованных $E_{\pm}(\mathbf{k})$-зон, разделенных узкой энергетической щелью порядка $2\sqrt{2}V_d$, что в базисе волновых функций $\Psi_+^{\mathbf{k}} = -ic(1/\sqrt{2})(\Psi_x - \Psi_y) + b\Psi_d$, $\Psi_-^{\mathbf{k}} = ib(1/\sqrt{2})(\Psi_x - \Psi_y) + c\Psi_d$ и $\Psi_{p-}^{\mathbf{k}}$ соответствует гамильтониану

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Big\{ E_+(\mathbf{k}) a_+^+(\mathbf{k}) a_+(\mathbf{k}) + E_-(\mathbf{k}) a_-^+(\mathbf{k}) a_-(\mathbf{k}) +$$

$$+ E_p^-(\mathbf{k}) a_{p-}^+(\mathbf{k}) a_{p-}(\mathbf{k}) +$$

$$+ ib(\mathbf{k})\sqrt{2}V_d\left(\sin k_x - \sin k_y\right) a_+^+(\mathbf{k}) a_{p-}(\mathbf{k}) +$$

$$+ ic(\mathbf{k})\sqrt{2}V_d\left(\sin k_x - \sin k_y\right) a_-^+(\mathbf{k}) a_{p-}(\mathbf{k}) + \text{к.с.}\Big\},$$

где $a_i^+(\mathbf{k})$ и $a_i(\mathbf{k})$ $(i = +, -)$ — операторы рождения и уничтожения соответствующих одноэлектронных состояний;

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\left(E_p^+(\mathbf{k}) + E_d\right) \pm$$

$$\pm \left[\frac{1}{4}\left(E_p^+(\mathbf{k}) - E_d\right)^2 + 2V_d^2\left(\sin k_x + \sin k_y\right)^2\right]^{1/2};$$

$$c(\mathbf{k}) = \left(\frac{1 + \lambda(\mathbf{k})}{2}\right)^{1/2}; \quad b(\mathbf{k}) = \left(\frac{1 - \lambda(\mathbf{k})}{2}\right)^{1/2};$$

$$\lambda(\mathbf{k}) = \frac{E_p^+(\mathbf{k}) - E_d}{2\left[1/4(E_p^+(\mathbf{k}) - E_d)^2 + 2V_d^2(\sin k_x + \sin k_y)^2\right]^{1/2}}.$$

Зона $E_+(\mathbf{k})$ имеет ширину порядка $V_d$ и является наполовину заполненной. Плотность одноэлектронных состояний у ее минимума

$$\rho\left(E_{+\,\min}\right) = \frac{V_p}{2\pi V_d^2 l^2}$$

превосходит плотность состояний у максимума зоны $E_p^+(\mathbf{k})$

$$\rho\left(E_{p\,\max}^+\right) = \frac{1}{2\pi V_p l^2},$$

так как $V_p/V_d \gg 1$.

Однако $\rho(E_{+\,\max})$ имеет величину порядка $\rho(E_{p\,\max}^+)$:

$$\rho\left(E_{+\,\max}\right) = \frac{1}{2\pi(V_p + \sqrt{2}V_d)l^2}.$$

Следовательно, гибридизация широкой $E_p^+(\mathbf{k})$-зоны с расположенной у верхнего ее края плоской $E_d$-зоной, образованной высоколокализованными атомными орбиталями, приводит к образованию нового зонного спектра с высокой плотностью одноэлектронных состояний у минимума зоны проводимости $E_+(\mathbf{k})$, в окрестности которого расположен уровень Ферми.

Полученные результаты справедливы для ВТСП купратов в передопированном состоянии, соответствующем их нормальной металлической фазе, когда кулоновские корреляции зонных электронов слабы и ими можно пренебречь.

Спектроскопические исследования медно-оксидных ВТСП свидетельствуют об отсутствии в них ионов меди в состоянии $Cu^{3+}$ [30]. Это интерпретируется как следствие сильного кулоновского отталкивания $U$, препятствующего локализации второй дырки в $d$-оболочке меди, что приводит к снятию вырождения по спину $s$ на отдельном медном узле:

$$E_{d,s} - E_{d,-s} = U\left(\langle n_{j,s}\rangle - \langle n_{j,-s}\rangle\right),$$

где $\langle n_{j,s}\rangle$ — среднее число заполнения узла $j$ электроном со спином $s$, и, следовательно, к появлению на нем отличного от нуля магнитного момента, который на соседних медных узлах должен иметь

противоположное направление. Таким образом, введение дальнего антиферромагнитного порядка, присущего диэлектрической фазе медно-оксидных ВТСП, приводит к удвоению периода кристаллической решетки и соответственно к увеличению вдвое количества атомов в элементарной ячейке кристалла. Учитывая также снятие вырождения по спину, получаем, что количество энергетических зон и базисных волновых функций гамильтониана $H$ возрастает в четыре раза.

Нестинг ферми-поверхности с волновым вектором нестинга $\mathbf{Q} = \pi/2(\mathbf{i}_x + \mathbf{i}_y)$, где $\mathbf{i}_x$ и $\mathbf{i}_y$ — соответственно единичные базисные векторы вдоль координатных направлений $x$ и $y$, также приводит к дальнему антиферромагнитному порядку в медной подрешетке [31], для которой матричный элемент $\Delta$ гамильтониана $H$ (усредненного с функциями $\Psi^{\mathbf{k}}_{d,s}$ и $\Psi^{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}_{d,s}$) отличен от нуля и равен

$$\langle \Psi^{\mathbf{k}}_{d,\pm s} \,|\, H \,|\, \Psi^{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}_{d,\pm s} \rangle = \pm \frac{\mathrm{U}}{2} \left( \langle n_{j,s} \rangle - \langle n_{j,-s} \rangle \right) = \Delta .$$

Все остальные матричные элементы гамильтониана $H$ на волновых функциях $\Psi^{\mathbf{k}}_{i,s}$ и $\Psi^{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}_{j,s}$ ($i, j = d, x, y$) равны нулю.

В базисе волновых функций $m\Psi^{\mathbf{k}}_{+} + n\Psi^{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}_{+}$, $n\Psi^{\mathbf{k}}_{+} - m\Psi^{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}_{+}$, $\Psi^{\mathbf{k}}_{-}$, $\Psi^{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}_{-}$, $\Psi^{\mathbf{k}}_{p-}$, $\Psi^{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}_{p-}$ для заданного направления спина $s$ гамильтониан $H$ принимает вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Big\{ E^{+}_{\Delta}(\mathbf{k}) a^{+}_{\Delta+}(\mathbf{k}) a_{\Delta+}(\mathbf{k}) + E^{-}_{\Delta}(\mathbf{k}) a^{+}_{\Delta-}(\mathbf{k}) a_{\Delta-}(\mathbf{k}) + E_{-}(\mathbf{k}) a^{+}_{-}(\mathbf{k}) a_{-}(\mathbf{k}) +$$

$$+ E_{-}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) a^{+}_{-}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) a_{-}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) + E^{-}_{p}(\mathbf{k}) a^{+}_{p-}(\mathbf{k}) a_{p-}(\mathbf{k}) + E^{-}_{p}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) a^{+}_{p-}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) a_{p-}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) - nh_1 a^{+}_{\Delta+}(\mathbf{k}) a_{-}(\mathbf{k}) -$$

$$- mh_2 a^{+}_{\Delta+}(\mathbf{k}) a_{-}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) + mh_4 b(\mathbf{k}) a^{+}_{\Delta+}(\mathbf{k}) a_{p-}(\mathbf{k}) + nh_5 b(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) a^{+}_{\Delta+}(\mathbf{k}) a_{p-}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) + mh_1 a^{+}_{\Delta-}(\mathbf{k}) a_{-}(\mathbf{k}) -$$

$$- nh_2 a^{+}_{\Delta-}(\mathbf{k}) a_{-}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) + nh_4 b(\mathbf{k}) a^{+}_{\Delta-}(\mathbf{k}) a_{p-}(\mathbf{k}) - mh_5 b(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) a^{+}_{\Delta-}(\mathbf{k}) a_{p-}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) + h_3 a^{+}_{-}(\mathbf{k}) a_{-}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) +$$

$$+ h_4 c(\mathbf{k}) a^{+}_{-}(\mathbf{k}) a_{p-}(\mathbf{k}) + h_5 c(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) a^{+}_{-}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) a_{p-}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) + \text{к.с.} \Big\},$$

где

$$h_1 = \Delta c(\mathbf{k}) b(\mathbf{k}+\mathbf{Q}); \; h_2 = -\Delta b(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}+\mathbf{Q}); \; h_3 = \Delta c(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}+\mathbf{Q});$$

$$h_4 = i\sqrt{2} V_d \left( \sin k_x - \sin k_y \right); \; h_5 = i\sqrt{2} V_d \left( \cos k_x - \cos k_y \right);$$

$$E^{\pm}_{\Delta}(\mathbf{k}) = \frac{E_{+}(\mathbf{k}) + E_{+}(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}{2} \pm \left[ \frac{1}{4} \left( E_{+}(\mathbf{k}) - E_{+}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) \right)^2 + \Delta^2 \left( b(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) b(\mathbf{k}) \right)^2 \right]^{1/2};$$

$$m = \sqrt{(1+\mu)/2}, \; n = \sqrt{(1-\mu)/2}; \; \mu(\mathbf{k}) = \frac{E_{+}(\mathbf{k}) - E_{+}(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}{\left[ \left( E_{+}(\mathbf{k}) - E_{+}(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) \right)^2 + 4\Delta^2 b^2(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) b^2(\mathbf{k}) \right]^{1/2}}.$$

При изменении направления спина $\Delta$ изменяет знак на противоположный. Однако из вида оператора $H$ следует, что вырождение по спину сохраняется.

Рассмотрим случай $\Delta \ll V_d$.

В результате введения не равного нулю $U$ происходит расщепление зоны $E_{+}(\mathbf{k})$ на две новые (полностью пустую $E^{+}_{\Delta}(\mathbf{k})$- и полностью заполненную $E^{-}_{\Delta}(\mathbf{k})$-зоны, разделенные узкой энергетической щелью, равной $2\Delta$).

Ширина зоны $E^{-}_{\Delta}(\mathbf{k})$ имеет порядок величины $V_d^2/V_p$.

Вносимые в результате допирования дырки занимают состояния у верхнего края зоны $E^{-}_{\Delta}(\mathbf{k})$, плотность электронных состояний в окрестности которого должна повышаться по сравнению со случаем $\Delta = 0$ из-за вытеснения в зону $E^{-}_{\Delta}(\mathbf{k})$ электронных состояний, лежащих в области диэлектрической щели.

Последовательный расчет плотности одноэлектронных состояний зоны $E^{-}_{\Delta}(\mathbf{k})$ приводит к следующим результатам: для $\Delta < 9V_d^2/14V_p$ точка $(\pi/4, \pi/4)$ соответствует локальному максимуму зоны $E^{-}_{\Delta}(\mathbf{k})$:

$$\rho\left(E^{-}_{\Delta\max}\right) = \frac{V_p}{2\pi l^2 V_d^2}\left\{1 + \left|\frac{9V_d^2}{2V_p\Delta} - 7\right|^{-1/2}\right\};$$

при $\Delta \geq 9V_d^2/14V_p$ локальный максимум $(\pi/4, \pi/4)$ переходит к седловую точку;

в случае $\Delta \leq (2V_d^2/V_p)(2/(\sqrt{2}+1))^{1/2}$ точка (0,0) является локальным минимумом зоны $E^{-}_{\Delta}(\mathbf{k})$:

$$\rho\left(E^{-}_{\Delta\,min}\right) = \left[2\pi l^2\left|\frac{V_d^2}{V_p} - \frac{\Delta^2 V_p}{8V_d^2}\left(1+\sqrt{2}\right)\right|\right]^{-1/2};$$

для больших значений $\Delta$ точка (0,0) становится локальным максимумом.

Согласно экспериментальным данным [32,33], уровень Ферми медно-оксидных ВТСП представляет собой «карман», расположенный в координатной плоскости $(k_x, k_y)$ в окрестности точки $(\pi/4, \pi/4)$. Следовательно, $\Delta < 9V_d^2/14V_p$, а уровень Ферми лежит в окрестности максимума $(\pi/4, \pi/4)$ зоны $E^{-}_{\Delta}(\mathbf{k})$. Кроме того, уровень Ферми находится в области седловой точки, как указано авторами работы [34]. Поэтому, согласно полученным результатам, введение слабого кулоновского отталкивания на узлах меди в ВТСП купратах может привести к значительному увеличению плотности одноэлектронных состояний на уровне Ферми.

Ширина зоны $E^{-}_{\Delta}(\mathbf{k})$ и разность $E_F - E_{+\,min}$ имеют величину $V_d^2/V_p$, что значительно меньше дебаевской энергии $\hbar\omega_D$ и, тем более, ширины $8V_p$ кислородных зон $E^{\pm}_{p}(\mathbf{k})$. Следствием этого являются высокие значения плотности одноэлектронных состояний в окрестности минимума зоны $E_{+}(\mathbf{k})$ и в зоне $E^{-}_{\Delta}(\mathbf{k})$ по сравнению с $\rho(E^{+}_{p\,max})$, а также расширение области фазового пространства зонных электронов, формирующих сверхпроводящее состояние, что в стандартной теории БКШ должно привести к увеличению $T_c$.

Однако слабые кулоновские корреляции зонных электронов, свойственные передопированным медно-оксидным ВТСП, соответствуют не дальнему, а ближнему антиферромагнитному порядку, рассмотрение которого является сложной задачей. Поэтому полученная нами диэлектризация зонного спектра электронов в результате введения дальнего антиферромагнитного порядка является «фиктивной» в области сильного допирования. Переход к ближнему антиферромагнитному порядку приведет к сглаживанию особенностей вычисленной нами плотности одноэлектронных состояний. Можно надеяться, что ее значение останется все-таки большим и будет соответствовать в стандартной теории БКШ высокой температуре сверхпроводящего перехода. Кроме того, $\hbar\omega_D$ превосходит ширину зоны $E^{-}_{\Delta}(\mathbf{k})$. Это приводит к исчезновению характерной для теории БКШ прямой пропорциональности значений $\omega_D$ и $T_c$ и, следовательно, к возможно слабому проявлению изотопического эффекта в ВТСП купратах [35,36].

Предложенный в работе взгляд на проблему высокотемпературной сверхпроводимости не претендует на полное и всеобъемлющее описание этого явления. Он основан на желании показать преувеличенность в отношении особенности ВТСП по сравнению с обычной сверхпроводимостью. Согласно полученным в работе результатам, в формировании высокотемпературной сверхпроводимости решающее значение имеют особенности спектра одноэлектронных возбуждений медно-оксидных ВТСП, что, наряду с другими характерными для ВТСП чертами, приводит к высокой температуре сверхпроводящего перехода.

В заключение автор выражает свою признательность В. П. Кушниру и В. М. Адамяну за полезные дискуссии и конструктивные замечания.

1. M. Michielsen, H. De Raedt, and T. Schneider, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1410 (1992).
2. G. Dopf, A. Muramatsu, and W. Hauke, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 353 (1992).
3. R. Lal and S. K. Joshi, *Phys. Rev.* **B45**, 361 (1992).
4. A. Moreo, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, S. R. White, and N. E. Bicker, *Phys. Rev.* **B41**, 2313 (1990).
5. A. Moreo, E. Dagotto, T. Jolicoeur, and J. Riera, *Phys. Rev.* **B42**, 6283 (1990).
6. N. Bulut and D. J. Scalapino, *Phys. Rev.* **B45**, 5577 (1992).
7. M. S. Hybertsen, E. B. Stechel, W. M. C. Foulkes, and M. Schluter, *Phys. Rev.* **B45**, 10032 (1992).
8. E. Dagotto, A. Nazarenko, and M. Bouinsegui, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 728 (1994).
9. S. E. Barrett, *Phys. Rev.* **B41**, 6283 (1990).
10. R. E. Walstedt, B. S. Shastry, and S.-W. Cheong, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3610 (1994).
11. N. Bulut, D. J. Scalapino, and S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 748 (1994).
12. E. Dagotto, A. Moreo, F. Ortalani, J. Riera, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1918 (1991).
13. E. Dagotto and R. Shrieffer, *Phys. Rev.* **B43**, 8705 (1991).
14. G. Fano, A. Parola, and F. Ortolani, *Phys. Rev.* **B42**, 6877 (1990).
15. E. Monosakis, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 1 (1991).
16. P. Monthoux, A. V. Balatsky, and D. Pines, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3448 (1991).
17. D. Belitz and T. R. Kirkpatriek, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 261 (1994).
18. Ю. А. Изюмов, *УФН* **161**, 1 (1991).
19. А. П. Протогенов, *УФН* **162**, 1 (1992).
20. В. М. Локтев, *ФНТ* **19**, 375 (1993).
21. В. Л. Гинзбург, Е. Т. Максимов, *СФХТ* **5**, 1543 (1992).
22. M. Takigawa, J. L. Smith, and W. L. Hults, *Los Alamos Report NO LA-UR-91-1228* (1991).
23. В. М. Адамян, Б. С. Павлов, *ФТТ* **34**, 628 (1992).
24. В. М. Адамян, М. В. Медведев, *СФХТ* **7**, 1359 (1994).
25. H. Won and K. Maki, *Phys. Rev.* **B49**, 15305 (1994).
26. R. Bar-Deroma, J. Felsteiner, R. Brener, J. Ashkenazi, and D. van der Marel, *Phys. Rev.* **B45**, 2361 (1992).

27. J. Fink, N. Nucker, H. Romberg, M. Alexander, and P. Adelmann, *Europhys. J. Sol. St. Inorg. Chem.* **27**, 221 (1990).
28. F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev.* B37, 3659 (1988).
29. В. М. Локтев, *Металлофизика* 3, 11 (1990).
30. J. A. Yarmoff, D. R. Clarke, and W. Drude, *Phys. Rev.* B36, 3967 (1987).
31. J. Rossat-Mignod, L. P. Regnault, C. Vettier, P. Bourges, P. Burlet, J. Bussy, and Y. Henry, *Physica* C185, 86 (1991).
32. J. R. Cooper and A. Carriington, *Preprint* (1992).
33. Z. Liu and E. Monousakis, *Phys. Rev.* B45, 2425 (1992).
34. D. S. Dessau, Z.-X. Shen, D. M. King, D. S. Marshal, L. W. Lombardo, P. H. Dickinson, A. G. Loeser, J. DiCarlo, C.-H. Park, A. Kapitulnik, and W. E. Spicer, *Phys. Rev. Lett.* 71, 2781 (1993).
35. Н. М. Плакида, *Высокотемпературные сверхпроводники, Лекции для молодых ученых*, Дубна (1990).
36. M. Ronay, M. A. Frisch, and T. R. McCuire, *Phys. Rev.* B45, 355 (1992).

## Some specific features of band spectrum of copper-oxide HTSC

M. D. Medvedev

High-density one-electron states are proved to exist at the Fermi level of quasi-two-dimensional band spectrum of copper-oxide HTSC with or without Coulomb correlations of band electrons.