

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
КОМИ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР — СВЕРДЛОВСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

Серия препринтов научных докладов
Проблемы высокотемпературной сверхпроводимости
Выпуск 5

А.В.Заборов, М.В.Садовский

СПАРИВАНИЕ НА СОСЕДНИХ УЗЛАХ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Доклады на семинаре
"Высокотемпературная сверхпроводимость"
15 января 1988 г., г.Свердловск

Сыктывкар 1988

USSR ACADEMY OF SCIENCES
URAL BRANCH
KOMI SCIENTIFIC CENTRE — SVERDLOVSK SCIENTIFIC CENTRE

Series of scientific reports
Problems of high-temperature superconductivity
Issue 5

A.V.Zaborov, M.V.Sadovskii

NEAREST NEIGHBOUR PAIRING IN HUBBARD MODEL

Report on seminar
"High — T_c superconductivity"
January 15, 1988, Sverdlovsk

Syktvykar 1988

УДК 537.312.62

СПАРИВАНИЕ НА СОСЕДНИХ УЗЛАХ В МОДЕЛИ ХАББАРДА. Заборов А.В., Садовский М.В. Серия препринтов научных докладов "Проблемы высокотемпературной сверхпроводимости". Коми научный центр — Свердловский научный центр УрО АН СССР, 1988 г., вып. 5, — С. 28.

В работе анализируется возможность куперовского спаривания электронов на соседних узлах в модели Хаббарда с сильным отталкиванием на одном узле. В то же время оказывается, что найденное состояние является энергетически невыгодным — его энергия выше энергии соответствующего нормального состояния. Обсуждается значение этого вывода для ряда аналогичных моделей, рассмотренных другими авторами.

UDK 537.312.62

NEAREST NEIGHBOUR PAIRING IN HUBBARD MODEL. Zaborov A.V., Sadovskii M.V. Series of preprints of Scientific reports "Problems of high-temperature superconductivity". Komi Scientific Centre and Sverdlovsk Scientific Centre of the Ural Branch, USSR Academ. Sci., 1988, issue 5, pp. 28.

We consider a possibility of Cooper-pairing at the neighbour sites in the Hubbard model with strong one-site repulsion of the electrons. However, the ground state energy of this state is always higher than that of the normal state causing serious doubts in the reality of the similar models of high- T_c superconductivity.

Редколлегия

академик Г.А.Месяц (отв. редактор), В.И.Бобровский (отв. секретарь),
В.Л.Кожевников, А.В.Мирмельштейн, М.В.Садовский,
Г.И.Вовк (ред. англ. текста)

© Уральское отделение АН СССР, 1988

ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальное открытие высокотемпературной сверхпроводимости металлооксидов стимулировало теоретический поиск новых механизмов сверхпроводимости [18]. Среди этих попыток выделяется направление, связанное с возможным электронным механизмом, действующим в рамках стандартной модели Хаббарда [1-3, 6, 7, 9, 10, 13]. Доказательство существования сверхпроводимости в модели с исходным отталкивательным взаимодействием электронов могло бы иметь принципиальное значение.

Интересная модель сверхпроводящего состояния в рамках модели Хаббарда с бесконечным отталкиванием на узле $/U \rightarrow \infty/$ была предложена Зайцевым Р.О. и Ивановым В.А. [1-3], причем появление этого состояния связывалось с "кинематическим" взаимодействием, обусловленным невозможностью одновременного пребывания двух электронов на одном и том же узле. В большинстве других работ [6-10, 13] сверхпроводящее состояние так или иначе связывается с существованием эффективного обменного взаимодействия электронов на соседних узлах $\sim t^2/U$, где t — интеграл переноса, возникающего в модели Хаббарда в первом порядке теории возмущений по t/U [11] и приводящего к антиферромагнитным корреляциям, либо к состоянию обычного антиферромагнетизма, либо к состоянию "резонансных валентных связей" $/RVB/$ [6, 7, 13]. В отличие от этих моделей в схеме, основанной на учете кинематического взаимодействия [1-3], характерный масштаб температуры сверхпроводящего перехода определяется параметром $t \gg t^2/U$.

Сильным стимулом для поиска сверхпроводящего состояния в модели Хаббарда явились расчеты методом Монте-Карло [13], в которых была отмечена некоторая тенденция к синглетному куперовскому спариванию на соседних узлах. Следует заметить, что проведенные к настоящему времени более подробные монте-карловские расчеты привели к отказу от сделанных в работе [13] утверждений (см. [14]).

В данной работе будет рассмотрен вопрос о возможности

синглетного куперовского спаривания на соседних узлах, аналогичного введенному в [13]. При этом мы будем работать непосредственно с гамильтонианом Хаббарда, не используя канонического преобразования к эффективному обмену [11]. Рассмотрение будет основано на стандартном методе двухвременных функций Грина, использованному еще в основополагающей работе Хаббарда [15]. Будет показано, что в простейшем приближении "Хаббард-1" удастся получить самосогласованные решения, описывающие спаривание на соседних узлах. Температура перехода в это состояние оказывается весьма близкой к полученной в работах [1-3], а область существования решений совпадает с найденной в этих же работах. После завершения этой работы нам стал известен препринт [17], в котором эти результаты получены, по существу, таким же методом. К сожалению, ни в работах [1-3], ни в [17] не был проанализирован важнейший вопрос об энергии основного состояния в рассматриваемой модели "сверхпроводящего" состояния. Как будет показано ниже, соответствующий анализ приводит к выводу об энергетической невыгодности "сверхпроводящего" состояния такого типа. Более подробное обсуждение и выводы будут приведены в заключительной части работы.

1. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

Рассмотрим обычную модель Хаббарда, описываемую гамильтонианом [15]:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + U \sum_i a_{i\uparrow}^{\dagger} a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} a_{i\uparrow} \quad (1)$$

где $a_{i\sigma}^{\dagger}$, $a_{i\sigma}$ операторы рождения и уничтожения электронов с проекцией спина σ на узлах решетки i, j , t_{ij} — интеграл переноса, отличный от нуля между ближайшими соседями, $U > 0$ — энергия отталкивания на одном узле.

Введем стандартную двухвременную функцию Грина [4]:

$$G_{ij}(t-t') = -i\theta(t-t') \langle [a_{i\uparrow}(t), a_{j\uparrow}^{\dagger}(t')] \rangle_+ \equiv \langle\langle a_{i\uparrow}^{\dagger} | a_{j\uparrow} \rangle\rangle \quad (2)$$

и выпишем уравнение движения для соответствующего фурье-образа по времени (μ — химический потенциал):

$$(E+\mu) G_{ij}(E) = \delta_{ij} + \sum_k t_{ik} G_{kj}(E) + U \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} a_{i\uparrow}^{\dagger} | a_{j\uparrow} \rangle\rangle \quad (3)$$

Аналогичным образом запишем второе уравнение цепочки [15]:

$$(E+\mu-U) \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} a_{i\uparrow}^{\dagger} | a_{j\uparrow} \rangle\rangle = \langle n_{i\downarrow} \rangle \sigma_{ij} + \sum_k t_{ik} \left\{ \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} a_{k\uparrow} | a_{j\uparrow} \rangle\rangle + \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{k\downarrow} a_{i\uparrow} | a_{j\uparrow} \rangle\rangle \right\} - \sum_k t_{ki} \langle\langle a_{k\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} a_{i\uparrow} | a_{j\uparrow} \rangle\rangle \quad (4)$$

Расщепление цепочки проведем в приближении "Хаббард-1" [15], учтя, однако, аномальные средние, соответствующие куперовскому спариванию на соседних узлах [13]:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} a_{k\uparrow} | a_{j\uparrow} \rangle\rangle &\simeq \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle\langle a_{k\uparrow} | a_{j\uparrow} \rangle\rangle + \langle a_{i\downarrow} a_{k\uparrow} \rangle \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} | a_{i\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{k\downarrow} a_{i\uparrow} | a_{j\uparrow} \rangle\rangle &\simeq \langle a_{k\downarrow} a_{i\uparrow} \rangle \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\langle n_{i\downarrow} \rangle = \langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} \rangle$. При этом в отличие от [17] мы пренебрегаем аномальными средними типа $\langle a_{i\downarrow} a_{i\uparrow} \rangle$, соответствующими куперовскому спариванию на одном узле, что представляется очевидным с физической точки зрения, ввиду наличия сильного отталкивания на одном узле. Мы также пренебрегаем аномальными средними типа $\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{k\uparrow} \rangle$, ответственными за антиферромагнетизм, и считаем, что $\langle n_{i\uparrow} \rangle = \langle n_{i\downarrow} \rangle = \frac{1}{2} n$ (n — концентрация электронов), т.е. пренебрегаем возможностью ферромагнитного упорядочения. Таким образом, мы исходим из парамагнитного основного состояния нормальной (несверхпроводящей) фазы, что, конечно, проблематично ввиду известных возможностей магнитного упорядочения в модели Хаббарда [5]. Вопрос о возможном взаимном влиянии разных типов такого упорядочения и сверхпроводимости гораздо более сложен и требует отдельного исследования.

В результате расщепления (5) уравнение (4) приобретает вид:

$$(E+\mu-U) \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} a_{i\uparrow}^{\dagger} | a_{i\uparrow} \rangle\rangle = \frac{1}{2} n \delta_{ij} + \frac{1}{2} n \sum_k t_{ik} G_{kj}(E) + \Delta F_{ij}(E), \quad (6)$$

где

$$\Delta = \sum_k t_{ik} \left\{ \langle a_{i\downarrow} a_{k\uparrow} \rangle - \langle a_{i\uparrow} a_{k\downarrow} \rangle \right\} \quad (7)$$

$F_{ij}(E)$ — аномальная функция Горькова:

$$F_{ij}(E) = \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle, \quad (8)$$

для которой следует аналогичным образом выписать уравнение движения и произвести в нем расщепление типа (5). Тогда полу-

чим:

$$(E - \mu)F_{ij}(E) = - \sum_k t_{ik} F_{kj}(E) - U \langle\langle a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}^+ a_{j\uparrow}^+ \rangle\rangle \quad (9)$$

$$(E - \mu + U) \langle\langle a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}^+ a_{j\uparrow}^+ \rangle\rangle = - \frac{1}{2} n \sum_k t_{ki} F_{kj}(E) + \Delta^* G_{ij}(E). \quad (10)$$

После перехода к импульсному представлению уравнения (3), (6), (9) и (10) дают:

$$G(Ek) = G_*(Ek) + \frac{U\Delta}{(E - \xi_{1k})(E - \xi_{2k})} F(Ek) \quad (11)$$

$$F(Ek) = - \frac{U\Delta^*}{(E + \xi_{1k})(E + \xi_{2k})} G(Ek), \quad (12)$$

где

$$G_*(Ek) = \frac{E + \mu - U(1 - \frac{n}{2})}{(E - \xi_{1k})(E - \xi_{2k})} \quad (13)$$

— функция Грина приближения "Хаббард-1" [15] (нормальная фаза),

$$\xi_{1,2k} = \frac{1}{2}(U + \epsilon_k) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(U - \epsilon_k)^2 + 2U\epsilon_k n} - \mu \quad (14)$$

— спектр хаббардовских зон,

$$\epsilon_k = \begin{cases} -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) & \text{(квадратная решетка)} \\ -2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a), & \text{(ПК- решетка)} \end{cases} \quad (15)$$

где a — постоянная решетки.

Параметр Δ имеет при этом вид:

$$\Delta = \frac{2}{N} \sum_k \epsilon_k \langle a_{-k\downarrow} a_{k\uparrow} \rangle \quad (16)$$

и, как мы увидим ниже, играет роль сверхпроводящей щели.

Решение системы уравнений (11), (12) дает:

$$G(Ek) = [E + \mu - U(1 - \frac{n}{2})] [E + \xi_{1k}] [E + \xi_{2k}] \frac{1}{\text{Det}} \quad (17)$$

$$F(Ek) = - \Delta^* U [E + \mu - U(1 - \frac{n}{2})] \frac{1}{\text{Det}}, \quad (18)$$

где

$$\text{Det} = (E^2 - E_{1k}^2)(E^2 - E_{2k}^2) \quad (19)$$

$$E_{1,2k}^2 = \frac{1}{2}(\xi_{1k}^2 + \xi_{2k}^2) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\xi_{1k}^2 - \xi_{2k}^2)^2 - 4U^2|\Delta|^2}. \quad (20)$$

Заметим, что в пределе $U \rightarrow \infty$, уравнения (17) — (20) заметно упрощаются и приобретают вид, вполне аналогичный известным уравнениям Горькова:

$$G(Ek) = (1 - \frac{n}{2}) \frac{1}{2} (1 + \frac{\xi_k}{E_k}) \frac{1}{E - E_k} + (1 - \frac{n}{2}) \frac{1}{2} (1 - \frac{\xi_k}{E_k}) \frac{1}{E + E_k} \quad (21)$$

$$F(Ek) = - (1 - \frac{n}{2}) \frac{\Delta^*}{2E_k} \left\{ \frac{1}{E - E_k} - \frac{1}{E + E_k} \right\}, \quad (22)$$

где

$$E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2} \quad (23)$$

$$\xi_k = (1 - \frac{n}{2}) \epsilon_k - \mu. \quad (24)$$

Отсюда, в частности, видно, что параметр Δ имеет смысл энергетической щели.

2. КРИТИЧЕСКАЯ ТЕМПЕРАТУРА И ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЩЕЛЬ

Из уравнений (17), (18) легко получить систему уравнений для определения параметра порядка Δ и химпотенциала μ при заданном заполнении зоны n . Ввиду громоздкости общих уравнений ограничимся рассмотрением наиболее важных частных случаев.

Температура перехода $T_c = \beta_c^{-1}$ может быть найдена из условия $\Delta = 0$ и определяется совместным решением уравнений:

$$1 = U [U(1 - \frac{n}{2}) - \mu] \frac{1}{N} \sum_k \frac{\epsilon_k}{\xi_{1k} \xi_{2k} (\xi_{1k}^2 - \xi_{2k}^2)} \quad (25)$$

$$n = \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{\xi_{1k} - \xi_{2k}} \left\{ [\xi_{1k} + \mu - U(1 - \frac{1}{2})] f(\xi_{1k}) - [\xi_{2k} + \mu - U(1 - \frac{n}{2})] f(\xi_{2k}) \right\} \quad (26)$$

В уравнении (26), определяющем химпотенциал, $f(z)$ — обычная функция распределения Ферми.

Дальнейшие вычисления проведем используя модельную плотность состояний (W — полуширина исходной зоны):

$$N(\epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2w}; & -w \leq \epsilon \leq w \\ 0; & |\epsilon| > w \end{cases}, \quad (27)$$

допускающую проведение всех расчетов в аналитическом виде. Модель прямоугольной зоны (27) качественно ближе к двумерному случаю, реализующемуся в металлооксидных сверхпроводниках. При этом, однако, теряется известная особенность Ван-Хова в центре зоны [18].

В пределе $U \rightarrow \infty$ уравнения (25), (26) существенно упрощаются:

$$\frac{n/2}{1-n/2} = \frac{1}{2w} \int_{-w}^w d\epsilon f \left\{ \beta_c \left[\left(1 - \frac{n}{2}\right) \epsilon - \mu \right] \right\} \quad (28)$$

$$\frac{1}{1-n/2} = \frac{1}{2w} \int_{-w}^w d\epsilon \frac{\epsilon}{\left(1 - \frac{n}{2}\right) \epsilon - \mu} \operatorname{th} \left\{ \frac{1}{2} \beta_c \left[\left(1 - \frac{n}{2}\right) \epsilon - \mu \right] \right\} \quad (29)$$

В этом случае достаточно простой вид имеют и уравнения для Δ и μ при температуре $T = 0$:

$$1 = \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{1}{2w} \int_{-w}^w d\epsilon \frac{\epsilon}{\sqrt{\left[\left(1 - \frac{n}{2}\right) \epsilon - \mu\right]^2 + |\Delta|^2}} \quad (30)$$

$$1 - \frac{3}{2}n = \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{1}{2w} \int_{-w}^w d\epsilon \frac{\left(1 - \frac{n}{2}\right) \epsilon - \mu}{\sqrt{\left[\left(1 - \frac{n}{2}\right) \epsilon - \mu\right]^2 + |\Delta|^2}} \quad (31)$$

Решение уравнения (28) дает при $T \rightarrow 0$:

$$\mu_0 = \left(\frac{3}{2}n - 1\right)w, \quad (32)$$

т.е. обычное выражение для химпотенциала в приближении "Хаббард-1" [12]. Нетривиальное решение (29) существует в области $2/3 < n < 1$, критическая температура дается выражением:

$$T_c = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \gamma w \sqrt{n(1-n)} \exp \left\{ -\frac{n}{\frac{3}{2}n - 1} \right\}, \quad (33)$$

где $\ln \gamma = 0,577$ — постоянная Эйлера. Зависимость T_c от n , определяемая (33), показана на рис.1. Выражение (33) дает для T_c результаты, количественно весьма близкие к зависимости T_c от n , найденные для модели $U \rightarrow \infty$ в работах [1, 2], и совпадает с аналогичным выражением работы [17]. Полученная зависимость привлекательна с точки зрения объяснения зависимости T_c от концентрации Sr в системе $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [1-3].

При $T = 0$ из (31) получаем $2/3 < n < 1$:

$$\mu = \left(\frac{3}{2}n - 1\right)w \sqrt{1 + \frac{|\Delta|^2}{2n(1-n)w^2}}, \quad (34)$$

а из (30), используя $|\Delta|/w \ll 1$, находим:

$$\frac{|\Delta|}{T_c} = \frac{\pi}{\gamma} \left\{ 1 - \frac{4n}{\frac{3}{2}n - 1} \exp \left[-\frac{2n}{\frac{3}{2}n - 1} \right] \right\}^{-1/2} \quad (35)$$

так, что фундаментальное для теории сверхпроводимости отношение $2|\Delta|/T_c$ изменяется от БКШ значения 3.52 до 3.82 при изменении n от $2/3$ до 1. Величина T_c , согласно (33), достигает максимального значения $T_c(\text{Max}) = 0.039 W$ при $n = 0.93$, при этом имеем $2|\Delta|/T_c(\text{Max}) = 3.69$.

В случае произвольного отталкивания U анализ уравнений (25), (26) довольно громоздок. Можно показать, что "нижняя" критическая концентрация n_c , ограничивающая область существования "сверхпроводящего" решения, определяется уравнением:

$$n_c(n_c - 1)W + U\left(\frac{3}{2}n_c - 1\right) = 0. \quad (36)$$

Соответствующая зависимость n_c от U/W показана на рис.2, при $U \rightarrow \infty$, $n_c \rightarrow 2/3$, в общем случае конечных U область существования "сверхпроводимости" сужается.

В первом порядке по малому параметру W/U анализ уравнений (25), (26) показывает, что T_c определяется следующим приближенным уравнением:

$$1 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n}{2}\right) \int_{-w}^w d\epsilon \operatorname{th} \left\{ \frac{1}{2} \beta_c \frac{2-n}{2} (\epsilon - \epsilon_0) \left[1 - \frac{n}{2} (\epsilon + \epsilon_0) \frac{w}{U}\right] \right\} \times$$

$$\times \left\{ 1 - \frac{w}{U} \frac{(2-n)n\epsilon - (1-n)(3n-2)}{2-n} \right\} \left\{ \frac{2-n}{2} (\epsilon - \epsilon_0) \left[1 - \frac{n}{2} (\epsilon + \epsilon_0) \frac{w}{U}\right] \right\}^{-1}, \quad (37)$$

где

$$\epsilon_0 = \frac{2}{2-n} \left[\frac{3}{2}n - 1 + \frac{W}{U} \frac{2n^2(n-1)}{2-n} \right] \quad (38)$$

Результаты численного решения этого уравнения для ряда значений параметра U/W приведены на рис.1. При $n \rightarrow 1$ уравнение (37) не дает корректного описания T_c , в этой области нужно решать точные уравнения (25), (26).

Из приведенного рассмотрения видно, что в данной модели учет конечности U приводит к сужению области существования аномальных решений и общему снижению T_c .

3. ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Сверхпроводящее состояние является устойчивым, если его энергия ниже энергии нормального состояния. К сожалению, в работах [2-3] и [17] этот вопрос не исследовался. В то же время, уже из найденного нами выражения для химпотенциала "сверхпроводящей" фазы (34), возникают большие сомнения в отношении энергетической выгодности этого состояния*. В самом деле, если следуя Херрингу [12], мы определим энергию основного состояния как:

$$E = \int_0^n dn \mu (n, T=0) \quad (39)$$

из уравнений (32), (34), то немедленно получим, что энергия найденного нами "сверхпроводящего" состояния выше энергии нормального состояния "Хаббард-1".

Такой способ рассмотрения вызывает некоторые сомнения в связи с тем, что в нашем случае имеет место фазовый переход по концентрации при $n_c = 2/3$. Кроме того, легко видеть, что этот расчет дает для проигрыша энергии выражение, не обращающееся в нуль при $n \rightarrow 1$, что вызывает возражения ввиду $\Delta \rightarrow 0$ при $n \rightarrow 1$. Херрингом [12] отмечалось, что различные способы вычисления энергии основного состояния, базирующиеся на приближенных выражениях для функций Грина, могут приводить к различным результатам. Поэтому мы проведем более детальное рассмотрение путем прямого вычисления среднего гамильтониана (1) в рамках использованной схемы расщепления:

$$E = \sum_{ij\sigma} t_{ij} \langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle + U \sum_i \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle \quad (40)$$

Выражая соответствующие средние через функции Грина, определенные с помощью (3), (6), в пределе $U \rightarrow \infty$ находим:

$$E = (1 - \frac{n}{2}) \int d \in N(\epsilon) \in (1 - \frac{\xi}{E}) - \frac{1}{2} (1 - \frac{n}{2}) \int d \in N(\epsilon) \left\{ (1 - \frac{\xi}{E}) \frac{n\epsilon}{2} + \frac{|\Delta|^2}{E} \right\}, \quad (41)$$

где $\xi = (1 - \frac{n}{2}) \in - \mu$, $E = \sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}$. В модели прямоугольной зоны (27) получаем:

$$E = \frac{1}{8w} \frac{2-n/2}{1-n/2} \left\{ [(1 - \frac{n}{2})w + \mu] Q_- + [(1 - \frac{n}{2})w - \mu] Q_+ \right\}$$

* В дальнейшем мы ограничиваемся случаем $U \rightarrow \infty$, качественно аналогичные выводы сохраняются и для конечных значений U .

$$+ \frac{1}{8w} |\Delta|^2 \frac{n/2}{1-n/2} \ln \left| \frac{(1 - \frac{n}{2})w - \mu + Q_-}{-(1 - \frac{n}{2})w - \mu + Q_+} \right|, \quad (42)$$

где

$$Q_{\pm} = \sqrt{[(1 - n/2)w \pm \mu]^2 + |\Delta|^2}. \quad (43)$$

Для $\Delta = 0$, отсюда с использованием (32), имеем:

$$E_0 = \frac{2 - \frac{n}{2}}{1 - \frac{n}{2}} \frac{n}{2} (n-1)w. \quad (44)$$

При $n \rightarrow 0$ (44) совпадает с результатом вычисления E_0 с помощью (39) и (32) [12], что несколько ниже правильного результата, полученного в газовом приближении [16], однако при $n \rightarrow 1$ (44) дает правильный предел $E_0 \rightarrow 0$, что выгодно отличает наш способ вычислений от результата Херринга [12], занижающего энергию основного состояния "Хаббард-1" и при $n \rightarrow 1$.

Энергия "сверхпроводящего" состояния (42), с учетом (33) — (35), оказывается при всех концентрациях в области $2/3 < n < 1$ выше энергии нормального состояния (44). В низшем порядке по $|\Delta|^2/w^2$ (42) сводится к:

$$E = E_0 + \frac{7}{8} \frac{n^2 - 2n + 8/7}{(2-n)(3n-2)} \frac{|\Delta|^2}{w}, \quad (45)$$

что дает очень хорошую аппроксимацию общего выражения (42).

Заметим, что пренебрежение Δ — зависимость химпотенциала (34) позволяет получить из (42) выигрыш энергии в интервале концентраций $0.86 < n < 1$. В работах [1-3] и [17] Δ — зависимость μ не учитывалась.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное рассмотрение показывает, что найденное выше "сверхпроводящее" состояние в модели Хаббарда является термодинамически невыгодным. В то же время ситуация с нетривиальным решением, описывающим это состояние, представляется необычной. В принципе, могут реализоваться две возможности:

- 1) состояние абсолютно неустойчиво (максимум энергии основного состояния);
- 2) состояние метастабильно (локальный минимум энергии

основного состояния).

В рамках сделанных расчетов отличить эти случаи нельзя, для этого требуется рассчитать спектр коллективных колебаний системы. Если спектр окажется устойчивым, это будет сильным указанием на наличие метастабильного состояния, в противном случае получим абсолютную неустойчивость (максимум энергии). Не исключено, что в метастабильной ситуации учет каких-либо дополнительных взаимодействий приведет к стабилизации найденного решения. Следует также иметь в виду, что более корректное рассмотрение требует учета возможности магнитного упорядочения в нормальной фазе (антиферромагнетизм, ферромагнетизм, RVB?), что также может изменить вывод о невыгодности найденного состояния. Тем не менее, полученные результаты приводят к серьезным сомнениям относительно реальности рассмотренной модели сверхпроводимости. Поскольку тип спаривания, рассмотренный выше, практически совпадает с введением для описания RVB — состояния в работе [8], существование энергетически невыгодных решений такого типа в первом порядке по t заставляет сомневаться в реальности решений, найденных в [8], где учитывалось взаимодействие $t^2/U \ll t$.

Естественно, что наша работа не означает отрицания возможности построения модели высокотемпературной сверхпроводимости на основе гамильтониана Хаббарда. Речь шла лишь об одном из возможных вариантов такого рассмотрения.

Авторы признательны Б.М.Летфулову, принимавшему активное участие в работе на начальном этапе, а также Д.И.Хомскому, К.А.Кикоину, Ю.В.Копяеву, В.Ф.Елесину и В.И.Белиничеру за полезные обсуждения.

Институт электрофизики УрО АН СССР,
620219 Свердловск ГСП-387

Introduction

Experimental discovery of high- T_c superconductivity in certain metallic oxides has stimulated the theoretical search of new mechanisms of superconductivity [1]. Among the most interesting we shall concentrate upon the idea of possible electronic mechanism in the standard Hubbard model [1-3, 6-10, 13]. The proof of the superconductivity for the model with the initial strong repulsion of electrons would be of major importance.

A curious model of superconducting state in the Hubbard model with an infinite one-site repulsion ($U \rightarrow \infty$) was proposed by Zaitsev and Ivanov [1-3], where the emergence of superconductivity was attributed to "kinematic" interaction, due to the constraint prohibiting the presence of two electrons at the same site.

The majority of other works [6-10, 13] try to connect superconductivity to the existence of superexchange interaction of electrons at the nearest neighbour sites $\sim t^2/U$ (where t is the transfer integral), appearing in the first order of perturbation theory over t/U [10] and leading to antiferromagnetic correlations either in the form of usual antiferromagnetism or the resonating valence bond state (RVB) [6, 7, 13]. The kinematic interaction model [1-3] gives the T_c value proportional to $t \gg t^2/U$, thus leading to much more strong effects, in principle, than in Ref. [6-10, 13].

The strong indications for the search of superconductivity in the Hubbard model were produced by the Monte-Carlo calculations of Ref. [13], where a certain tendency for a singlet Cooper pairing of electrons at the nearest neighbour sites was observed. Note, however, that the latest more extensive calculations indicate the absence of this type of pairing [14].

The present paper discusses the possibility of the singlet pairing of the type introduced in Ref. [13]. We shall work with the Hubbard hamiltonian, without the use of the canonical transformation to the effective exchange interaction [11]. We apply the standard formalism of two-time thermodynamic Green's functions, used previously in the basic paper by Hubbard [15]. We shall demonstrate that in the simplest "Hubbard-I" approximation it is possible to get the selfconsistent equations for the nearest ne-

neighbour pairing. The transition temperature T_c seems to be very close to that found in Ref. [1-3], and the concentration region for the existence of this anomalous solution is the same. After the completion of this work we became aware of the preprint [17] where the equivalent results were obtained by the same method. Unfortunately both in Ref [1-3,6,7,13] and in Ref.[17] the crucial problem of ground state energy for the proposed "superconducting" state was not analysed. As we shall see below this state is actually higher in energy than the normal state we start with, thus being thermodynamically unstable. More discussion will be presented in the Conclusion.

I. Equations of Motion

Consider the usual hamiltonian of the Hubbard model [15]:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + U \sum_i a_{i\uparrow}^{\dagger} a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} \quad (1)$$

where $a_{i\sigma}^{\dagger}$, $a_{j\sigma}$ are the creation and annihilation operators of electrons with spin projection σ at the lattice sites i and j , t_{ij} is the transfer integral between the nearest neighbours, $U > 0$ is the one-site repulsion energy. Introduce the standard two-time Green's function [4]:

$$G_{ij}(t-t') = -i\theta(t-t') \langle [a_{i\uparrow}(t), a_{j\uparrow}^{\dagger}(t')]_{+} \rangle \equiv \langle\langle a_{i\uparrow} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \quad (2)$$

and write down the equations of motion for the appropriate Fourier-transform over time (μ - is the chemical potential):

$$(E + \mu) G_{ij}(E) = \delta_{ij} + \sum_k t_{ik} G_{kj}(E) + U \langle\langle a_{i\downarrow} a_{i\downarrow} a_{i\uparrow} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \quad (3)$$

Analogously derive the second equation in the chain [15]:

$$(E + \mu - U) \langle\langle a_{i\downarrow} a_{i\downarrow} a_{i\uparrow} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle = \langle n_{i\downarrow} \rangle \delta_{ij} + \sum_k t_{ik} \{ \langle\langle a_{i\downarrow} a_{i\downarrow} a_{k\uparrow} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle + \langle\langle a_{i\downarrow} a_{k\uparrow} a_{i\uparrow} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \} - \sum_k t_{ki} \langle\langle a_{k\downarrow} a_{i\downarrow} a_{i\uparrow} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \quad (4)$$

The decoupling will be performed according to the "Hubbard-I" approximation [15], however we shall take into account the anomalous averages due to nearest neighbour pairing [13]:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} a_{k\uparrow} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle &\approx \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle\langle a_{k\uparrow} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle + \langle a_{i\downarrow} a_{k\uparrow} \rangle \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \\ \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{k\downarrow} a_{i\uparrow} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle &\approx \langle a_{k\downarrow} a_{i\uparrow} \rangle \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \end{aligned} \quad (5)$$

where $\langle n_{i\downarrow} \rangle = \langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} \rangle$. Here, opposite to Ref.17, we neglect the anomalous averages like $\langle a_{i\downarrow} a_{i\uparrow} \rangle$ corresponding to the Cooper pairing at the same site, which is obvious physically due to the strong one-site repulsion ($U > 0$). We also neglect the anomalous averages such as $\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{k\uparrow} \rangle$ responsible for antiferromagnetic ordering and use $\langle n_{i\uparrow} \rangle = \langle n_{i\downarrow} \rangle = \frac{1}{2} n$ (n is the number of electrons per site) thus neglecting the possible ferromagnetic ordering. Thus we start with the paramagnetic ground state for the normal (non-superconducting) phase, which is problematic, due to known magnetic instabilities in the Hubbard model [5]. The problem of interplay of these instabilities and superconductivity is much more difficult and demands the separate study.

After the decoupling (5) equation (4) takes the form:

$$(E + \mu - U) \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} a_{i\downarrow} a_{i\uparrow} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle = \frac{1}{2} n \delta_{ij} + \frac{1}{2} n \sum_k t_{ik} G_{kj}(E) + \Delta F_{ij}(E) \quad (6)$$

where $\Delta = \sum_k t_{ik} \{ \langle a_{i\downarrow} a_{k\uparrow} \rangle - \langle a_{i\uparrow} a_{k\downarrow} \rangle \}$ and $F_{ij}(E)$ is the anomalous Gorkov's function:

$$F_{ij}(E) \equiv \langle\langle a_{i\downarrow}^{\dagger} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \quad (8)$$

for which we must write the appropriate equation of motion and perform decoupling similar to (5). Then we obtain:

$$(E - \mu) F_{ij}(E) = - \sum_k t_{ik} F_{kj}(E) - U \langle\langle a_{i\uparrow}^{\dagger} a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^{\dagger} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle \quad (9)$$

$$(E - \mu + U) \langle\langle a_{i\uparrow}^{\dagger} a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^{\dagger} | a_{j\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle = - \frac{1}{2} n \sum_k t_{ki} F_{kj}(E) + \Delta^* G_{ij}^*(E) \quad (10)$$

After the transformation to the momentum representation Eqs. (3), (6) and (9), (10) give:

$$G(E_k) = G_*(E_k) + \frac{U\Delta}{(E-\xi_{1k})(E-\xi_{2k})} F(E_k) \quad (II)$$

$$F(E_k) = -\frac{U\Delta^*}{(E+\xi_{1k})(E+\xi_{2k})} G(E_k) \quad (I2)$$

where $G_*(E_k) = \frac{E+\mu-U(1-\eta/2)}{(E-\xi_{1k})(E-\xi_{2k})}$ (I3)

is the Green's function of the normal phase in the "Hubbard-I" approximation [15],

$$\xi_{1,2k} = \frac{1}{2}(U+\epsilon_k) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(U-\epsilon_k)^2 + 2U\epsilon_k n} - \mu \quad (I4)$$

is the spectrum of the Hubbard bands,

$$\epsilon_k = \begin{cases} -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) & \text{(Square lattice)} \\ -2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) & \text{(SC lattice)} \end{cases} \quad (I5)$$

where a is the lattice constant.

Parameter Δ is determined now as:

$$\Delta = \frac{2}{N} \sum_k \epsilon_k \langle a_{-k\uparrow} a_{k\uparrow} \rangle \quad (I6)$$

and actually, as we shall see below, is just the energy gap.

The solution of (II) and (I2) give:

$$G(E_k) = [E+\mu-U(1-\frac{n}{2})][E+\xi_{1k}][E+\xi_{2k}] \frac{1}{\text{Det}} \quad (I7)$$

$$F(E_k) = -\Delta^* U [E+\mu-U(1-\frac{n}{2})] \frac{1}{\text{Det}} \quad (I8)$$

where $\text{Det} = (E^2 - E_{1k}^2)(E^2 - E_{2k}^2)$ (I9)

$$E_{1,2k}^2 = \frac{1}{2}(\xi_{1k}^2 + \xi_{2k}^2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\xi_{1k}^2 - \xi_{2k}^2)^2 - 4U^2|\Delta|^2} \quad (20)$$

Note that for $U \rightarrow \infty$ these equations simplify considerably and

reduce to Gorkov type equations:

$$G(E_k) = (1-\frac{n}{2})\frac{1}{2}(1+\frac{\xi_k}{E_k})\frac{1}{E-E_k} + (1-\frac{n}{2})\frac{1}{2}(1-\frac{\xi_k}{E_k})\frac{1}{E+E_k} \quad (21)$$

$$F(E_k) = -(1-\frac{n}{2})\frac{\Delta^*}{2E_k} \left\{ \frac{1}{E-E_k} - \frac{1}{E+E_k} \right\} \quad (22)$$

where $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2}$ (23)

$$\xi_k = (1-\frac{n}{2})\epsilon_k - \mu \quad (24)$$

Now we clearly see that Δ is just the energy gap.

2. Transition temperature and energy gap

From (I7) and (I8) we can easily obtain the equations determining the order parameter Δ and chemical potential μ for the given band occupation n . Due to the cumbersome form of these general equations we shall limit ourselves to most important special cases.

Transition temperature $T_c = \beta_c^{-1}$ can be found from the condition $\Delta = 0$ and is determined by:

$$1 = U [U(1-\frac{n}{2}) - \mu] \frac{1}{N} \sum_k \frac{\epsilon_k}{\xi_{1k}\xi_{2k}(\xi_{1k}^2 - \xi_{2k}^2)} \cdot \left\{ \xi_{1k} \text{th} \left(\frac{1}{2}\beta_c \xi_{2k} \right) - \xi_{2k} \text{th} \left(\frac{1}{2}\beta_c \xi_{1k} \right) \right\} \quad (25)$$

$$n = \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{\xi_{1k} - \xi_{2k}} \left\{ [\xi_{1k} + \mu - U(1-\frac{n}{2})] f(\xi_{1k}) - [\xi_{2k} + \mu - U(1-\frac{n}{2})] f(\xi_{2k}) \right\} \quad (26)$$

Here in Eq.(26) determining the chemical potential $f(z)$ is the usual Fermi distribution.

In the following we shall use the rectangular density of states (w - is the halfwidth of the band):

$$N(\epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2w} ; & -w \leq \epsilon \leq w \\ 0 ; & |\epsilon| > w \end{cases} \quad (27)$$

which allows analytical calculation. This model is qualitatively valid for two-dimensional case which is realised in oxide superconductors. However, this approximation drops the notorious Van Hove singularity in the middle of the band [18].

For $U \rightarrow \infty$ Eqs. (25), (26) simplify to:

$$\frac{n/2}{1 - n/2} = \frac{1}{2w} \int_{-w}^w d\epsilon f \{ \beta_c [(1 - n/2)\epsilon - \mu] \} \quad (28)$$

$$\frac{1}{1 - n/2} = \frac{1}{2w} \int_{-w}^w d\epsilon \frac{\epsilon}{(1 - n/2)\epsilon - \mu} \text{th} \left\{ \frac{1}{2} \beta_c [(1 - n/2)\epsilon - \mu] \right\} \quad (29)$$

In this case the equations for Δ and μ at $T=0$ are also simple enough:

$$1 = (1 - \frac{n}{2}) \frac{1}{2w} \int_{-w}^w d\epsilon \frac{\epsilon}{\sqrt{[(1 - \frac{n}{2})\epsilon - \mu]^2 + |\Delta|^2}} \quad (30)$$

$$1 - \frac{3}{2}n = (1 - \frac{n}{2}) \frac{1}{2w} \int_{-w}^w d\epsilon \frac{(1 - \frac{n}{2})\epsilon - \mu}{\sqrt{[(1 - \frac{n}{2})\epsilon - \mu]^2 + |\Delta|^2}} \quad (31)$$

Solving (28) for $T \rightarrow 0$ we get

$$\mu_0 = \left(\frac{3}{2}n - 1 \right) w \quad (32)$$

i.e. the usual expression for the chemical potential in the "Hubbard-I" approximation [12]. Nontrivial solution of (29) exists for $2/3 < n < 1$, the transition temperature is given by:

$$T_c = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \gamma w \sqrt{n(1-n)} \exp \left\{ -\frac{n}{\frac{3}{2}n - 1} \right\} \quad (33)$$

-20-

where $\ln \gamma = 0.577$ is the Euler constant. T_c dependence on n , as determined by (33), is shown in Fig.1.

Eq.(33) gives T_c quite close to that found for the $U \rightarrow \infty$ model in Ref.[1,2] and coincides with that given in Ref.17. The T_c dependence on n seems to be attractive as the possible explanation of Sr concentration dependence of T_c in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [1-3].

For $T=0$ from (31) we obtain ($2/3 < n < 1$):

$$\mu = \left(\frac{3}{2}n - 1 \right) w \sqrt{1 + \frac{|\Delta|^2}{2n(1-n)w^2}} \quad (34)$$

and from (30), using $|\Delta|/w \ll 1$, we get:

$$\frac{|\Delta|}{T_c} = \frac{\pi}{\gamma} \left\{ 1 - \frac{4n}{\frac{3}{2}n - 1} \exp \left[-\frac{2n}{\frac{3}{2}n - 1} \right] \right\}^{-1/2} \quad (35)$$

i.e. the fundamental $2|\Delta|/T_c$ ratio changes from the BCS-value of 3.52 to 3.82 as n changes from $2/3$ to 1 . According to (33) T_c is maximal for $n=0.93$; $T_c(\text{Max})=0.039$, in this case $2|\Delta|/T_c(\text{Max}) = 3.69$.

For the general case of finite U the analysis of (25) and (26) is too cumbersome. It can be shown that the "lower" critical concentration n_c at which the "superconducting" state appears is determined by the equation:

$$n_c(n_c - 1)w + U \left(\frac{3}{2}n_c - 1 \right) = 0 \quad (36)$$

The appropriate dependence of n_c on U/w is shown in Fig.2, for $U \rightarrow \infty$, $n_c \rightarrow 2/3$. For general values of U the concentration region for the "superconducting" state narrows down.

In the first order over small parameter w/U the analysis of Eqs.(25), (26) shows that T_c is determined by the following approximate equation:

$$1 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n}{2} \right) \int_{-1}^1 d\epsilon \epsilon \text{th} \left\{ \frac{1}{2} \beta_c \frac{2-n}{2} (\epsilon - \epsilon_0) \left[1 - \frac{n}{2} (\epsilon + \epsilon_0) \frac{w}{U} \right] \right\} \times \left\{ 1 - \frac{w}{U} \frac{(2-n)n\epsilon - (1-n)(3n-2)}{2-n} \right\} \left\{ \frac{2-n}{2} (\epsilon - \epsilon_0) \left[1 - \frac{n}{2} (\epsilon + \epsilon_0) \frac{w}{U} \right] \right\}^{-1} \quad (37)$$

-21-

where

$$\epsilon_0 = \frac{2}{2-n} \left[\frac{3}{2}n - 1 + \frac{w}{U} \frac{2n^2(n-1)}{2-n} \right] \quad (38)$$

Numerical solution of (37) for different values of U/w give the T_c curves shown in Fig. I. For $n \rightarrow 1$ Eq. (37) does not yield the correct description of T_c , in this limit we must solve the general equations (25) and (26).

Thus for the finite values of U the region of "superconductivity" narrows and T_c becomes lower.

3. Ground state energy

Superconducting state is stable if its energy is lower than that in the normal state. Unfortunately in Refs. I-3, I7 this problem was not considered. Even from our expression for μ in "superconducting" phase (34), serious doubts arise concerning the stability of this state. If, following Herring [I2], we define the ground state energy as:

$$E = \int_0^n dn \mu(n, T=0) \quad (39)$$

then from (32) and (34) it can be seen that the energy of our "superconducting" state is higher than that of the normal one in in "Hubbard-I" approximation.

This argument is probably doubtful due to a phase transition at $n_c = 2/3$. Also the energy loss obtained in this way does not go to zero as $n \rightarrow 1$, which is strange because of $\Delta \rightarrow 0$ as $n \rightarrow 1$. Herring has noted [I2] that different method for the ground state energy calculation based upon approximate Green's function can lead to different results. Thus we shall concentrate upon more detailed consideration and calculate directly the mean Hamiltonian (I) within the "Hubbard-I" decoupling procedure:

$$E = \sum_{i,j\sigma} t_{ij} \langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle + U \sum_i \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle \quad (40)$$

* In the following we consider only the case of $U \rightarrow \infty$, similar results are apparently valid for finite U .

Expressing the appropriate averages via Green's functions defined in (3) and (6) in the limit of $U \rightarrow \infty$ we obtain:

$$E = \left(1 - \frac{n}{2}\right) \int d\epsilon N(\epsilon) \epsilon \left(1 - \frac{3}{E}\right) - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n}{2}\right) \int d\epsilon N(\epsilon) \left\{ \left(1 - \frac{3}{E}\right) \frac{n\epsilon}{2} + \frac{|\Delta|^2}{E} \right\} \quad (41)$$

where $\xi = \left(1 - \frac{n}{2}\right) \epsilon - \mu$, $E = \sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}$.
For the rectangular band model (27), we get:

$$E = -\frac{1}{8w} \frac{2 - n/2}{1 - n/2} \left\{ \left[\left(1 - \frac{n}{2}\right) w + \mu \right] Q_- + \left[\left(1 - \frac{n}{2}\right) w - \mu \right] Q_+ \right\} + \frac{1}{8w} |\Delta|^2 \frac{n/2}{1 - n/2} \ln \left| \frac{\left(1 - \frac{n}{2}\right) w - \mu + Q_-}{-\left(1 - \frac{n}{2}\right) w - \mu + Q_+} \right| \quad (42)$$

where

$$Q_{\pm} = \sqrt{\left[\left(1 - \frac{n}{2}\right) w \pm \mu \right]^2 + |\Delta|^2} \quad (43)$$

For $\Delta = 0$, using (32), we obtain:

$$E_0 = \frac{2 - n/2}{1 - n/2} \frac{n}{2} (n-1) w \quad (44)$$

For $n \rightarrow 0$ (44) coincides with E_0 derived via (39) and (32) [I2], which is slightly lower than the correct expression in dilute-gas approximation [I6], while for $n \rightarrow 1$ (44) gives $E_0 \rightarrow 0$, which is obviously the correct limit.

The ground state energy of "superconducting" state (42) after the use of (33)-(35), is higher than (44) for all concentrations in the interval $2/3 < n < 1$. In the lowest order in $|\Delta|^2/w^2$ (42) reduce to:

$$E = E_0 + \frac{7}{8} \frac{n^2 - 2n + 8/7}{(2-n)(3n-2)} \frac{|\Delta|^2}{w} \quad (45)$$

which gives rather good approximation of the general expression (42). Note, that the neglect of Δ - dependence of chemical potential (34) leads to an energy gain in (42) for $0.86 < n < 1$. This Δ - dependence of μ was neglected in Refs. [I-3] and [I7].

C o n c l u s i o n

Our calculations show that the "superconducting" state of the Hubbard model as defined above is thermodynamically unstable. However, the situation with this nontrivial solution seems to be rather curious. In principle, there are two possibilities:

- 1) The state is absolutely unstable (ground state energy maximal)
- 2) The state is metastable (local minimum of the ground state energy)

To choose between these cases we have to calculate the spectrum of collective oscillations. This spectrum would be stable for the metastable case and absolutely unstable for the case of ground state energy maximum. In metastable case it is possible that some kind of additional interaction will lead to a stabilization of our solution.

We must also stress that the correct analysis must take into account the possibility of some kind of magnetic ordering (AFM, FM, RVB?), thus leading to a probable change of our conclusions.

However, the results presented above cause serious doubts concerning the physical reality of the proposed high- T_c mechanism, based upon kinematic interactions in the Hubbard model. Note, that the similar type of pairing was proposed for the RVB-state in Ref.8. The existence of energetically unstable solutions for such pairing already in the first order over t , cause some doubts concerning the energetics of the solutions of Ref.8 based on the interactions of the order of $t^2/U \ll t$.

Naturally, this work is not intended to deny the possibility of high- T_c mechanism within the Hubbard model. Our concern is only for the specific model proposed in Refs [1-3, 17].

Authors are grateful to B.M.Letfulov for his active participation at the initial stages of this work. We also acknowledge the useful discussions with D.I.Khomskii, K.A.Kikoin, Yu.V.Kopaev, V.F.Elesin and V.I.Belinicher.

Institute for Electrophysics,
USSR Academy of Sciences, Ural
Branch, Sverdlovsk, 620219, USSR.

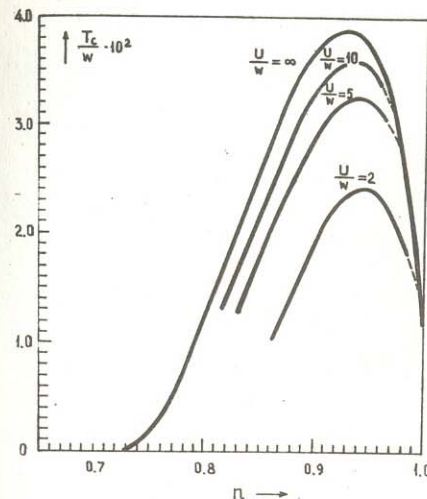


Рис.1. Зависимость температуры T_c перехода в "сверхпроводящее" состояние от концентрации электронов в нижней хаббардовской зоне для ряда значений параметра U/w .

Fig.1. Transition temperature T_c dependence on electron concentration in lower Hubbard band for different values of U/w .

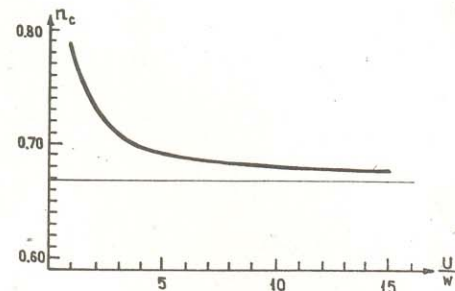


Рис.2. Зависимость критической концентрации электронов n_c , при которой возникает "сверхпроводящее" состояние от параметра U/w .

Fig.2. U/w — dependence of critical concentration n_c for the appearance of "superconducting" state.

ЛИТЕРАТУРА REFERENCES

1. Зайцев Р.О., Иванов В.А. /Письма ЖЭТФ 46 /приложение/, 1987, с. 140-143.
2. Зайцев Р.О., Иванов В.А. //ФТТ 29, 1987, с. 2554-2557.
3. Зайцев Р.О., Иванов В.А., Михайлова Ю.В. /Препринт ИАЭ-4556/ /9, 1987, 36 с.
4. Зубарев Д.Н. /УФН 71, 1960, с. 71-117.
5. Хомский Д.И. /ФММ 29, 1970, с. 31-57.
6. Anderson P.W. Science 235, 1196-1198 (1987).
7. Anderson P.W. Lectures at Varenna summer school "Frontiers and Borderlines in Many-particle Physics", Preprint (1987), 65 pp.
8. Baskaran G., Zoo Z., Anderson P.W. Solid State Comm. 63, 973-976 (1987).
9. Cyrot M. Solid State Comm. 62, 821-823; 63, 1015-1018 (1987)
10. Gross C., Joynt R., Rice T.M. Zs.Phys. B68, 425-432 (1987).
11. Gross C., Joynt R., Rice T.M. Phys. Rev. B36, 381-393 (1987).
12. Herring C. In "Magnetism", v.IV' ed.G.Rado, H.Suhl, NY. (1966), Ch.X.
13. Hirsh J.E. Phys Rev.Lett. 54, 1317-1320 (1985).
14. Hirsh J.E. Phys Rev. Lett. 59, 2618 (1987).
15. Hubbard J. Proc.Roy.Soc. A276, 238-253 (1963).
16. Kanamori J. Prog. Theor. Phys. 30 275-287 (1963).
17. Plakida N.M. Stasyuk I.V. Preprint JIHR, E17-88-96 (1988), 8 pp.
18. Rice T.M. Zs. Phys. B67, 141-148 (1987).