Письма в ЖЭТФ, том 113, вып. 9, с. 600 – 604 © 2021 г. 10 мая

Температура сверхпроводящего перехода для очень сильной связи в антиадиабатическом пределе уравнений Элиашберга

М. В. Садовский[1)]

Институт электрофизики Уральского отделения РАН, 620016 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 31 марта 2021 г.
После переработки 31 марта 2021 г.
Принята к публикации 31 марта 2021 г.

Показано, что известное асимптотическое ограничение Аллена–Дайнса для температуры сверхпроводящего перехода в области очень сильной связи $T_c > \frac{1}{2\pi}\sqrt{\lambda}\Omega_0$ (где $\lambda \gg 1$ – константа электрон-фононной связи Элиашберга–МакМиллана, а Ω_0 – характерная частота фононов) в антиадиабатическом пределе уравнений Элиашберга $\Omega_0/D \gg 1$ ($D \sim E_F$ – полуширина зоны проводимости, E_F – энергия Ферми) заменяется на $T_c > (2\pi^4)^{-1/3}(\lambda D\Omega_0^2)^{1/3}$, причем для T_c возникает ограничение сверху вида $T_c < \frac{2}{\pi^2}\lambda D$.

DOI: 10.31857/S1234567821090068

1. Введение. Открытие сверхпроводимости [1] с критической температурой, достигавшей $T_c = 203$ K в интервале давлений 100–250 ГПа (в алмазных наковальнях), в системе H_3S вызвало поток работ по экспериментальному изучению высокотемпературной сверхпроводимости гидридов в области мегабарных давлений (см. обзоры [2, 3]). Теоретический анализ немедленно подтвердил, что эти рекордные значения T_c обеспечиваются традиционным электрон-фононным взаимодействием в пределе достаточно сильной электрон-фононной связи [4, 5]. Более того, подробные расчеты для целого ряда гидридов переходных металлов под давлением [4] привели к предсказанию достаточно большого числа таких систем с рекордными значениями T_c. В ряде случаев эти предсказания получили блестящее подтверждение, в частности были экспериментально достигнуты рекордные значения $T_c = 160-260$ K в системах LaH_{10} [6, 7], ThH_{10} [8], YH_6 [9], $(La,Y)H_{6-10}$ [10]. Наконец, совсем недавно был перейден новый психологический рубеж, когда в работе [11] была получена сверхпроводимость с $T_c = 287.7 \pm 1.2$ K (т.е. около +15 градусов Цельсия) в системе C-H-S при давлении 267 ± 10 ГПа.

Принципиальное значение этих работ состоит, прежде всего, в том, что они ярко продемонстрировали отсутствие существенных ограничений для T_c, в рамках электрон-фононного механизма куперовского спаривания, где традиционно считалось, что T_c не может превышать 30–40 K. Соответственно, стал еще более актуальным вопрос о верхней границе значений T_c, которая может быть достигнута за счет этого механизма спаривания.

Со времени появления теории БКШ стало очевидным, что повышение T_c в сверхпроводниках может быть достигнуто повышением частоты фононов, ответственных за куперовское спаривание, а также увеличением эффективного взаимодействия этих фононов с электронами. Эти вопросы неоднократно исследовались разными авторами. Наиболее развитым подходом к описанию сверхпроводимости в системе электронов и фононов остается теория Элиашберга–МакМиллана [5, 12, 13]. Хорошо известно, что эта теория целиком основана на применимости адиабатического приближения и теореме Мигдала [14], позволяющей пренебречь вершинными поправками при расчетах эффектов электрон–фононного взаимодействия в типичных металлах. Реальный параметр малости теории возмущений при этом имеет вид $\lambda\frac{\Omega_0}{E_F} \ll 1$, где λ – безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия, Ω_0 – характерная частота фононов, а E_F – энергия Ферми электронов. В частности, это ведет к выводу о том, что вершинными поправками в этой теории можно пренебречь даже при $\lambda > 1$, благодаря выполнению неравенства $\frac{\Omega_0}{E_F} \ll 1$, характерного для типичных металлов.

В недавних работах [15–17] нами было показано, что в условиях сильной неадиабатичности, когда $\Omega_0 \gg E_F$, в теории возникает новый параметр малости $\lambda_D \sim \lambda\frac{E_F}{\Omega_0} \sim \lambda\frac{D}{\Omega_0} \ll 1$ (D – полуширина электронной зоны), так что поправки к электронному

[1)]e-mail: sadovski@iep.uran.ru

спектру становятся несущественными. Вершинными поправками при этом также можно пренебречь, как это было показано ранее в работе [18]. В общем случае, перенормировка электронного спектра (эффективной массы электрона) определяется новой безразмерной константой $\tilde{\lambda}$, которая переходит в обычную λ в адиабатическом пределе, а в сильном антиадиабатическом пределе стремится к λ_D. В то же время, температура сверхпроводящего перехода T_c и в антиадиабатическом пределе определяется спаривательной константой связи Элиашберга–МакМиллана λ, обобщенной с учетом конечности частоты фононов.

Для случая взаимодействия с одним оптическим (эйнштейновским) фононом в работе [15] была получена единая формула для T_c, справедливая как в адиабатическом, так и в антиадиабатическом режимах и имеющая интерполяционный характер в промежуточной области:

$$T_c \sim \frac{D}{1+\frac{D}{\Omega_0}} \exp\left(-\frac{1+\tilde{\lambda}}{\lambda}\right), \tag{1}$$

где $\tilde{\lambda} = \lambda \frac{D}{\Omega_0 + D}$ плавно изменяется от значения λ при $\Omega_0 \ll D \sim E_F$ к λ_D в пределе $\Omega_0 \gg D \sim E_F$.

Помимо вопросов о возможных пределах T_c в гидридах, где возможно существование небольших "карманов" поверхности Ферми с малыми значениями энергии Ферми [5], интерес к проблеме сверхпроводимости в сильном антиадиабатическом пределе стимулируется открытием ряда других сверхпроводников, где адиабатическое приближение не может считаться выполненным, а характерные частоты фононов порядка или даже превышают энергию Ферми электронов. Весьма характерными в этом смысле являются интеркалированные системы с монослоями FeSe, а также монослои FeSe на подложках типа $Sr(Ba)TiO_3$ (FeSe/STO) [19]. Впервые на неадиабатический характер сверхпроводимости, в применении к FeSe/STO, обратил внимание Горьков [20, 21] при обсуждении идеи о возможном механизме повышения температуры сверхпроводящего перехода T_c в системе FeSe/STO за счет взаимодействия с высокоэнергетическими оптическими фононами в $SrTiO_3$ [19]. Аналогичная ситуация возникает и в старой задаче о сверхпроводимости в легированном $SrTiO_3$ [22].

2. Ограничения на температуру сверхпроводящего перехода в случае очень сильной электрон-фононной связи. Общие уравнения теории Элиашберга–МакМиллана в мацубаровском представлении, определяющие сверхпроводящую щель $\Delta(\omega_n)$, имеют вид ($\omega_n = (2n+1)\pi T$) [5, 12, 13]:

$$\Delta(\omega_n)Z(\omega_n) = T\sum_{n'}\int_{-D}^{D} d\xi \int_0^\infty d\omega\alpha^2(\omega)F(\omega) \times \\ \times D(\omega_n - \omega_{n'};\omega)\frac{\Delta(\omega'_n)}{\omega^{2\prime}_n + \xi^2 + \Delta^2(\omega_{n'})}, \tag{2}$$

$$Z(\omega_n) = 1 + \frac{\pi T}{\omega_n}\sum_{n'}\int_{-D}^{D} d\xi \int_0^\infty d\omega\alpha^2(\omega)F(\omega) \times \\ \times D(\omega_n - \omega_{n'};\omega)\frac{\omega'_n}{\omega^{2\prime}_n + \xi^2 + \Delta^2(\omega_{n'})}, \tag{3}$$

где ввели

$$D(\omega_n - \omega_{n'};\omega) = \frac{2\omega}{(\omega_n - \omega_{n'})^2 + \omega^2}. \tag{4}$$

Здесь $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ – функция МакМиллана, $F(\omega)$ – плотность состояний фононов, и для простоты мы предполагаем модель полузаполненной электронной зоны конечной ширины $2D$ ($D \sim E_F$) с постоянной плотностью состояний (двумерие).

При этом мы также пренебрегли эффектами кулоновского отталкивания, ведущими к появлению кулоновского псевдопотенциала $\mu^\star$, который обычно мал и достаточно несуществен в области очень сильного электрон-фононного притяжения [5, 12, 13].

Тогда, с учетом:

$$\int_{-D}^{D} d\xi \frac{1}{\omega_{n'}^2 + \xi^2 + \Delta^2(\omega_{n'})} = \\ = \frac{2}{\sqrt{\omega_{n'}^2 + \Delta^2(\omega_{n'})}}\,\mathrm{arctg}\frac{D}{\sqrt{\omega_{n'}^2 + \Delta^2(\omega_{n'})}} \to \\ \to \frac{2}{|\omega_{n'}|}\,\mathrm{arctg}\frac{D}{|\omega_{n'}|} \text{ при } \Delta(\omega_{n'}) \to 0 \tag{5}$$

линеаризованные уравнения Элиашберга приобретают следующий общий вид:

$$\Delta(\omega_n)Z(\omega_n) = T\sum_{n'}\int_0^\infty d\omega\alpha^2(\omega)F(\omega) \times \\ \times D(\omega_n - \omega_{n'};\omega)\frac{2\Delta(\omega_{n'})}{|\omega_{n'}|}\,\mathrm{arctg}\frac{D}{|\omega_{n'}|}, \tag{6}$$

$$Z(\omega_n) = 1 + \frac{T}{\omega_n}\sum_{n'}\int_0^\infty d\omega\alpha^2(\omega)F(\omega) \times \\ \times D(\omega_n - \omega_{n'};\omega)\frac{\omega_{n'}}{|\omega_{n'}|}2\mathrm{arctg}\frac{D}{|\omega_{n'}|}. \tag{7}$$

Рассмотрим уравнение для $n = 0$, определяющее $\Delta(0) \equiv \Delta(\pi T) = \Delta(-\pi T)$, непосредственно вытекающее из (6), (7):

$$\Delta(0) = T\sum_{n'\neq 0}\int_0^\infty d\omega\alpha^2(\omega)F(\omega)\frac{2\omega}{(\pi T-\omega_{n'})^2+\omega^2}\times \\ \times\frac{2\Delta(\omega_{n'})}{|\omega_{n'}|}\operatorname{arctg}\frac{D}{|\omega_{n'}|}. \quad (8)$$

Оставляя справа только вклад от $n'=-1$, немедленно получаем *неравенство*:

$$1 > \frac{2}{\pi}\int_0^\infty d\omega\alpha^2(\omega)F(\omega)\frac{2\omega}{(2\pi T)^2+\omega^2}\operatorname{arctg}\frac{D}{\pi T}, \quad (9)$$

обобщающее аналогичное неравенство, впервые полученное в работе Аллене и Дайнса [23] и определяющее *нижнюю* границу для T_c. В эйнштейновской модели фононного спектра имеем $F(\omega)=\delta(\omega-\Omega_0)$, так что (9) сводится к

$$1 > \frac{2}{\pi}\lambda\operatorname{arctg}\frac{D}{\pi T}\frac{\Omega_0^2}{(2\pi T)^2+\Omega_0^2}, \quad (10)$$

где $\lambda = 2\alpha^2(\Omega_0)/\Omega_0$ – безразмерная спаривательная константа связи. При $D \gg \pi T$ отсюда немедленно следует результат Аллена–Дайнса [23]:

$$T_c > \frac{1}{2\pi}\sqrt{\lambda-1}\Omega_0 \to 0.16\sqrt{\lambda}\Omega_0 \text{ при } \lambda\gg 1, \quad (11)$$

который фактически определяет асимптотику T_c в области очень сильной связи $\lambda \gg 1$. Точное численное решение уравнений Элиашберга [23] дает для T_c результат типа (11) с заменой численного коэффициента 0.16 на 0.18. При этом данная асимптотика очень неплохо аппроксимирует значения T_c уже в области $\lambda > 2$.

В случае фононного спектра общего вида здесь достаточно провести простую замену $\Omega_0 \to \langle\Omega^2\rangle^{1/2}$, где

$$\langle\Omega^2\rangle = \frac{2}{\lambda}\int_0^\infty d\omega\alpha^2(\omega)F(\omega)\omega \quad (12)$$

– средний по спектру квадрат частоты фононов, а общее выражение для спаривательной константы связи имеет вид [5, 12, 13]:

$$\lambda = 2\int_0^\infty\frac{d\omega}{\omega}\alpha^2(\omega)F(\omega). \quad (13)$$

При $D \ll \pi T$ из (10) имеем

$$T > \frac{1}{2\pi}\sqrt{\lambda^*(T)-1}\Omega_0, \quad (14)$$

где

$$\lambda^*(T) = \frac{2D}{\pi^2 T}\lambda, \quad (15)$$

так что в сильном антиадиабатическом пределе получаем:

$$T_c > (2\pi^4)^{-1/3}(\lambda D\Omega_0^2)^{1/3} \approx 0.17(\lambda D\Omega_0^2)^{1/3}. \quad (16)$$

Из очевидного требования $\lambda^*(T) > 0$ возникает условие:

$$T_c < \frac{2}{\pi^2}\lambda D, \quad (17)$$

ограничивающее значения T_c сверху.

Таким образом, должно выполняться неравенство:

$$(2\pi^4)^{-1/3}(\lambda D\Omega_0^2)^{1/3} < T_c < \frac{2}{\pi^2}\lambda D, \quad (18)$$

что сводится к требованию:

$$\Omega_0 < \frac{4}{\pi}\lambda D \approx 1.27\lambda D \text{ или } \frac{D}{\Omega_0} > \frac{0.78}{\lambda}, \quad (19)$$

так что для самосогласованности нашего рассмотрения фактически требуется выполнение условия:

$$\lambda \gg \frac{\Omega_0}{D} \gg 1. \quad (20)$$

где последнее неравенство соответствует пределу сильной антиадиабатики. Соответственно, все приведенные выше оценки заведомо не работают при $\lambda \sim 1$ и могут описывать только предел очень сильной связи.

На рисунках 1 и 2 приведены результаты численного сравнения границ для T_c, следующих из (10) со значениями температуры перехода в области слабой

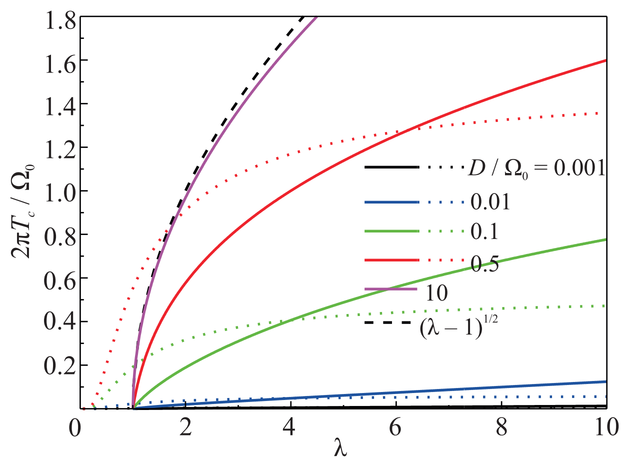

Рис. 1. (Цветной онлайн) Температура сверхпроводящего перехода в эйнштейновской модели фононного спектра в единицах $2\pi T_c/\Omega_0$, как функция спаривательной константы λ для разных значений обратного параметра адиабатичности $\frac{D}{\Omega_0}$. Пунктиром показаны соответствующие зависимости для $2\pi T_c/\Omega_0$ в области слабой и промежуточной связи (1) [15]. Черный пунктир – оценка Аллена–Дайнса, справедливая в адиабатическом пределе [23]

и промежуточной связи, следующими из (1), для различных значений параметра адиабатичности Ω_0/D. Ясно, что в окрестности пересечения пунктирных и сплошных линий на этих графиках происходит плавный кроссовер от поведения T_c в области слабой и промежуточной связи к ее асимптотике в области очень сильной связи $\lambda \gg 1$. Видно также, что повышение частоты фононов и переход к антиадиабатическому пределу не ведут, вообще говоря, к повышению T_c по сравнению с адиабатическим случаем.

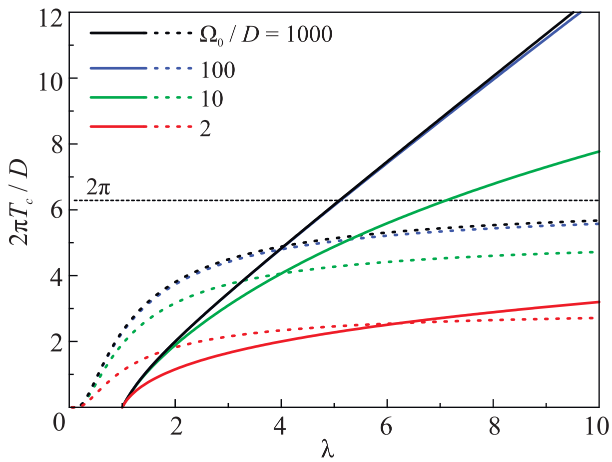

Рис. 2. (Цветной онлайн) Температура сверхпроводящего перехода в эйнштейновской модели фононного спектра в единицах $2\pi T_c/D$, как функция спаривательной константы λ для разных значений параметра адиабатичности $\frac{\Omega_0}{D}$. Пунктиром показаны соответствующие зависимости для $2\pi T_c/D$ в области слабой и промежуточной связи (1) [15]

3. Заключение. В данной работе мы рассмотрели очень сильную электрон-фононную связь в теории Элиашберга–МакМиллана, в том числе в антиадиабатической ситуации, когда в системе имеются фононы с достаточно большой частотой (превышающей энергию Ферми E_F). Величина перенормировки массы, в общем случае, определяется константой связи $\tilde{\lambda}$ [15], которая мала в антиадиабатическом пределе. В то же время величина спаривательного взаимодействия всегда определяется стандартной константой связи λ теории Элиашберга–МакМиллана, соответствующим образом обобщенной с учетом конечности частоты фононов [15]. Однако простейшие оценки [15, 17] показывают, что в антиадиабатической ситуации и эта константа, вообще говоря, достаточно быстро убывает с ростом частоты фононов Ω_0 при $\Omega_0 \gg E_F$. В этом смысле, рассмотренная выше асимптотика T_c в области очень сильной связи может быть достигнута только в исключительных случаях. При этом, как ясно из наших результатов, сам по себе переход в область антиадиабатики не может привести к повышению T_c по сравнению со стандартным адиабатическим случаем.

При всей наглядности и удобстве выражений для T_c через спаривательную константу λ и характерную частоту фононов $\Omega_0 \sim \langle\Omega^2\rangle^{1/2}$ следует иметь в виду, что эти параметры не являются, вообще говоря, независимыми. Фактически, как это видно из выражений типа (12), (13), они определяются одной и той же функцией Элиашберга–МакМиллана $\alpha^2(\omega)F(\omega)$. Соответственно возникают ограничения на свободное изменение этих параметров при оценках оптимальных (максимальных) значений T_c.

Автор признателен Э. З. Кучинскому за обсуждения и помощь с численными расчетами.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 20-02-00011.

---

1. A. P. Drozdov, M. I. Eremets, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, and S. I. Shylin, Nature **525**, 73 (2015).
2. М. И. Еремец, А. П. Дроздов, УФН **186**, 1257 (2016).
3. C. J. Pickard, I. Errea, and M. I. Eremets, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **11**, 57 (2020).
4. H. Liu, I. I. Naumov, R. Hoffman, N. W. Ashcroft, and R. J. Hemley, PNAS **114**, 6990 (2018).
5. L. P. Gor'kov and V. Z. Kresin, Rev. Mod. Phys. **90**, 01001 (2018).
6. A. P. Drozdov, P. P. Kong, V. S. Minkov, S. P. Besedin, M. A. Kuzovnikov, S. Mozaffari, L. Balicas, F. F. Balakirev, D. E. Graf, V. B. Prakapenka, E. Greenberg, D. A. Knyazev, M. Tkacz, and M. I. Eremets, Nature **569**, 528 (2019).
7. M. Somayazulu, M. Ahart, A. K. Mishra, Z. M. Geballe, M. Baldini, Y. Meng, V. V. Struzhkin, and R. J. Hemley, Phys. Rev. Lett. **122**, 027001 (2019).
8. D. V. Semenok, A. G. Kvashnin, A. G. Ivanova, V. Svitlyk, V. Y. Fominski, A. V. Sadakov, O. A. Sobolevskiy, V. M. Pudalov, I. A. Troyan, and A. R. Oganov, Mater. Today **33**, 36 (2020).
9. I. A. Troyan, D. V. Semenok, A. G. Kvashnin et al. (Collaboration), ArXiv:1908.01534; Advanced Materials (2021); https://doi.org/10.1002/adma.202006832.
10. D. V. Semenok, I. A. Troyan, A. G. Kvashnin et al. (Collaboration), Mater. Today (2021) (in press); ArXiv:2012.04787.
11. E. Snider, N. Dasenbrock-Gammon, R. McBride, M. Debessai, H. Vindana, K. Vencatasamy, K. V. Lawler, A. Salamat, and R. P. Dias, Nature **586**, 373 (2020).
12. D. J. Scalapino, in *Superconductivity*, ed. by R. D. Parks, Marcel Dekker, NY (1969), p. 449.
13. P. B. Allen and B. Mitrović, *Solid State Physics*, ed. by F. Seitz, D. Turnbull, and H. Ehrenreich, Academic Press, NY (1982), v. 37, p. 1.

14. А. Б. Мигдал, ЖЭТФ **34**, 1438 (1958) [Sov. Phys. JETP **7**, 996 (1958)].
15. М. В. Садовский, ЖЭТФ **155**, 527 (2019) [JETP **128**, 455 (2019)].
16. М. В. Садовский, Письма ЖЭТФ **109**, 165 (2019) [JETP Lett. **109**, 166 (2019)].
17. M. V. Sadovskii, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism **33**, 19 (2020).
18. M. A. Ikeda, A. Ogasawara, and M. Sugihara, Phys. Lett. A **170**, 319 (1992).
19. М. В. Садовский, УФН **186**, 1035 (2016) [Physics-Uspekhi **59**, 947 (2016)].
20. L. P. Gor'kov, Phys. Rev. B **93**, 054517 (2016).
21. L. P. Gor'kov, Phys. Rev. B **93**, 060507 (2016).
22. L. P. Gor'kov, PNAS **113**, 4646 (2016).
23. P. B. Allen and R. C. Dynes, Phys. Rev. **12**, 905 (1975).