Письма в ЖЭТФ, том 120, вып. 3, с. 214 – 216

Верхняя граница температуры сверхпроводящего перехода в теории Элиашберга–МакМиллана

М. В. Садовский[1)]

Институт электрофизики Уральского отделения РАН, 620016 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 3 июля 2024 г.
После переработки 3 июля 2024 г.
Принята к публикации 3 июля 2024 г.

Получены простые качественные оценки для максимальной температуры сверхпроводящего перехода, которая может быть достигнута за счет электрон-фононного взаимодействия в теории Элиашберга–МакМиллана. Показано, что в пределе очень сильной связи верхняя граница температуры перехода фактически определяется атомными константами и плотностью электронов проводимости.

DOI: 10.31857/S0370274X24080095, EDN: JWKVVA

Экспериментальное открытие высокотемпературной сверхпроводимости в гидридах под высоким (мегабарным) давлением [1, 2] стимулировало интерес к поиску путей достижения сверхпроводимости при комнатной температуре [3]. В настоящее время общепринятой является точка зрения [4, 5], что высокотемпературная сверхпроводимость в гидридах может быть описана в рамках стандартной теории Элиашберга–МакМиллана [6–8]. В рамках этой теории было предложено много вариантов оценки максимально достижимой температуры сверхпроводящего перехода, обсуждение ряда из них можно найти в обзорах [4, 5, 9]. В недавней работе [10] была предложена новая верхняя граница для T_c, в виде некоторой комбинации фундаментальных констант. Ниже мы покажем, что с небольшими модификациями такое ограничение для T_c следует непосредственно из теории Элиашберга–МакМиллана.

Традиционно, после появления теории БКШ, в большинстве работ, посвященных обсуждению возможных путей повышения T_c, обсуждение ведется в терминах безразмерной константы электрон – фононной связи λ и характерной (средней) частоты $\langle\Omega\rangle$ фононов, обеспечивающих куперовское спаривание. В частности, в фундаментальной работе Аллена и Дайнса [11], в пределе очень сильной связи с $\lambda > 10$ было получено следующее выражение для T_c[2)]:

$$T_c = 0.18\sqrt{\lambda\langle\Omega^2\rangle}. \tag{1}$$

Отсюда, казалось бы сразу следует, что ограничения на величину T_c просто отсутствуют, так что в рамках электрон–фононного механизма спаривания можно получить весьма высокие значения T_c. Фактически дело обстоит несколько сложнее. Дело в том, что параметры λ и $\langle\Omega^2\rangle$ в теории Элиашберга–МакМиллана не являются независимыми, что известно достаточно давно [4, 5, 9, 12].

Связь λ и $\langle\Omega^2\rangle$ ярко проявляется в формуле МакМиллана для λ, полученной в [8]:

$$\lambda = \frac{N(0)\langle I^2\rangle}{M\langle\Omega^2\rangle}, \tag{2}$$

где M – масса иона, $N(0)$ – плотность состояний на уровне Ферми и введен усредненный по поверхности Ферми матричный элемент градиента электрон-ионного потенциала:

$$\langle I^2\rangle = \frac{1}{[N(0)]^2}\sum_{\mathbf{p}}\sum_{\mathbf{p}'}|\langle\mathbf{p}|\nabla V_{ei}(\mathbf{r})|\mathbf{p}'\rangle|^2)\delta(\varepsilon_{\mathbf{p}})\delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}) = \\ = \langle|\langle\mathbf{p}|\nabla V_{ei}(\mathbf{r})|\mathbf{p}'\rangle|^2\rangle_{FS}. \tag{3}$$

Здесь $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ – спектр свободных электронов, отсчитанный от уровня Ферми. Выражение (2) дает весьма полезное представление для константы λ, которое рутинно используется в литературе и в практических (первопринципных) расчетах [5].

Если воспользоваться выражением (2) в (1), то немедленно получим:

$$T_c^{\star} = 0.18\sqrt{\frac{N(0)\langle I^2\rangle}{M}}, \tag{4}$$

так что и λ и $\langle\Omega^2\rangle$ вообще выпадают из выражения для $T_c^{\star}$, которая выражается теперь просто через усредненный по поверхности Ферми матричный элемент градиента электрон-ионного потенциала, массу

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

[2)] Фактически эта асимптотика достаточно неплохо работает уже при $\lambda > 2$.

иона и плотность электронных состояний на уровне Ферми. Недостатком этой формулы является некоторая потеря наглядности за счет отсутствия параметров, в терминах которых обычно принято трактовать T_c.

Как отмечено выше, все параметры, входящие в это выражение, достаточно легко вычисляются при первопринципных расчетах T_c для конкретных материалов (соединений) [5]. Подчеркнем, что величина $T_c^\star$, определенная в (4), рассчитанная для конкретного материала, не имеет прямого отношения к реальной величине T_c, а определяет именно верхнюю границу T_c, которая "могла бы быть достигнута" в пределе достаточно сильной электрон-фононной связи. Ниже мы проведем элементарные качественные оценки этой величины.

Далее мы будем иметь ввиду трехмерный металл с кубической симметрией элементарной ячейки со стороной a и одним электроном проводимости на атом. Тогда

$$N(0) = \frac{mp_F}{2\pi^2\hbar^3}a^3, \qquad (5)$$

где $p_F \sim \hbar/a$ – импульс Ферми, m – масса свободного (зонного) электрона. Потенциал электрон-ионного взаимодействия (однозарядный ион, e – заряд электрона):

$$V_{ei} \sim \frac{e^2}{a} \sim e^2 p_F/\hbar, \qquad (6)$$

а его градиент можно оценить как:

$$\nabla V_{ei} \sim \frac{e^2}{a^2} \sim e^2 p_F^2/\hbar^2. \qquad (7)$$

Отсюда получаем оценку (3):

$$I^2 \sim \left(\frac{e^2}{a^2}\right)^2 \sim (e^2 p_F^2/\hbar^2)^2. \qquad (8)$$

Здесь были опущены разные численные коэффициенты порядка единицы. Собирая их для модели свободных электронов, получаем оценку $T_c^\star$ из (4) в виде:

$$T_c^\star \sim 0.2\sqrt{\frac{m}{M}}\frac{e^2}{\hbar v_F}E_F, \qquad (9)$$

где $E_F = p_F^2/2m$ – энергия Ферми, $v_F = p_F/m$ – скорость электронов на поверхности Ферми. Величина $\frac{e^2}{\hbar v_F}$, как известно, играет роль безразмерного параметра кулоновского взаимодействия, в типичных металлах она порядка или больше единицы. Множитель $\sqrt{\frac{m}{M}}$ определяет изотопический эффект.

Будем измерять длины в единицах боровского радиуса a_B, введя стандартный безразмерный параметр r_s с помощью соотношения $a^3 = \frac{4\pi}{3}(r_s a_B)^3$. Тогда имеем:

$$a \sim r_s a_B = r_s\frac{\hbar^2}{me^2} = r_s\frac{\hbar}{mc\alpha}, \qquad (10)$$

где ввели еще постоянную тонкой структуры $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$. Соответственно для импульса Ферми запишем:

$$p_F \sim \frac{\hbar}{r_s a_B} = \frac{me^2}{\hbar r_s} = \frac{mc}{\hbar r_s}\alpha. \qquad (11)$$

Тогда $T_c^\star$ (4) переписывается как:

$$T_c^\star \sim \frac{0.2}{r_s}\sqrt{\frac{m}{M}}\alpha^2 mc^2 = \frac{0.2}{r_s}\sqrt{\frac{m}{M}}\frac{me^4}{\hbar^2} = \frac{0.2}{r_s}\sqrt{\frac{m}{M}}\mathrm{Ry}, \qquad (12)$$

где $\mathrm{Ry} = me^4/\hbar^2 \approx 13.6\,\mathrm{eV}$ – постоянная Ридберга. Здесь возникла та же самая комбинация фундаментальных (атомных) констант, которая была предложена в работе [10], из совершенно других соображений, в качестве верхней границы температуры сверхпроводящего перехода. Однако в нашем выражении присутствует дополнительный множитель r_s^{-1}, который с необходимостью отражает специфику рассматриваемого материала (плотность электронов проводимости), так что величина $T_c^\star$ вовсе не является универсальной.

Как уже отмечалось выше, величина $T_c^\star$ строго говоря не имеет отношения к реальной величине температуры сверхпроводящего перехода T_c. Однако выражения (9) и (12) могут быть полезны для оценок "потенциальных возможностей" того или иного материала в смысле достижения в нем высоких температур перехода в условиях очень сильной электрон-фононной связи. Например, для металлического водорода M равно массе протона, так что $\sqrt{\frac{m}{m_p}} \sim 0.02$ и для $r_s = 1$ мы получаем оценку $T_c^\star \sim 650\,\mathrm{K}$. Эта оценка прекрасно согласуется со значением $T_c = 600\,\mathrm{K}$, полученным в [12] из решения уравнений Элиашберга для ГЦК решетки металлического водорода с $r_s = 1$, с учетом рассчитанного в этой работе смягчения фононного спектра, приводящего к реализации очень сильной связи ($\lambda = 6.1$). В то же время в недавно появившейся работе [13], было проведено изящное численное исследование сверхпроводимости металлического водорода с модели "желе", в котором максимальное значение T_c достигалось при $r_s \sim 3$ и не превышало $30\,\mathrm{K}$. Это было связано с тем, что в этих условиях в модели "желе" реализуется слабая связь и не возникает смягчения спектра фононов. Возможно, что выражения (9) и (12) могут быть полезны для предварительной оценки T_c в тех или иных гидридах металлов, которые сейчас интенсивно исследуются в поисках сверхпроводимости при комнатной температуре.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Института электрофизики УрО РАН. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

1. A. P. Drozdov, M. I. Eremets, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, and S. I. Shylin, Nature **525**, 73 (2015).
2. J. A. Flores-Livas, L. Boeri, A. Sanna, G. Pinofeta, R. Arita, and M. Eremets, Phys. Rep. **856**, 1 (2020).
3. И. А. Троян, Д. В. Семенок, А. В. Садаков, И. С. Любутин, В. М. Пудалов, ЖЭТФ **166**, 74 (2024).
4. L. P. Gor'kov and V. Z. Kresin, Rev. Mod. Phys. **90**, 01001 (2018).
5. W. E. Pickett, Rev. Mod. Phys. **95**, 021001 (2023).
6. Г. М. Элиашберг, ЖЭТФ **38**, 966 (1960) [Sov. Phys. JETP **11**, 696 (1960)].
7. Г. М. Элиашберг, ЖЭТФ **39**, 1437 (1960) [Sov. Phys. JETP **12**, 1000 (1961)].
8. W. L. McMillan, Phys. Rev. **167**, 331 (1968).
9. М. В. Садовский, УФН **192**, 773 (2022) [Phys.-Uspekhi **65**, 724 (2022)].
10. K. Trachenko, D. Montserrat, M. Hutcheon, and C. J. Pickard, arXiv:2406.08129.
11. P. B. Allen and R. C. Dynes, Phys. Rev. **12**, 905 (1975).
12. Е. Г. Максимов, УФН **178**, 175 (2008) [Phys.-Uspekhi **51**, 567 (2008)].
13. D. van der Marel and C. Berthod, arXiv:2404.05554.