

Границы применимости теории Элиашберга и ограничения на температуру сверхпроводящего перехода

М.В. Садовский

Открытие рекордно высоких значений температуры сверхпроводящего перехода T_c в целом ряде гидридов под высоким давлением явилось яркой демонстрацией возможностей электрон-фононного механизма куперовского спаривания. В связи с этим обострился интерес к основам и ограничениям теории Элиашберга–Макмиллана как основной теории, описывающей сверхпроводимость в системе электронов и фононов. Рассматриваются как элементарные основы этой теории, так и ряд новых результатов, полученных в последнее время. Обсуждаются ограничения на величину константы связи, обусловленные неустойчивостью решётки и переходом в новую фазу (волна зарядовой плотности, биполярны). В пределах устойчивой металлической фазы эффективная спаривательная константа может принимать любые значения. Рассматривается выход за пределы традиционного адиабатического приближения. Показано, что теория Элиашберга–Макмиллана оказывается применимой и в сильном антиадиабатическом пределе. Подробно рассматривается предел очень сильной связи как наиболее актуальный для физики гидридов. Обсуждаются ограничения на величину T_c , возникающие в этом пределе.

Ключевые слова: уравнения Элиашберга, температура сверхпроводящего перехода, сильная связь, адиабатическое и антиадиабатическое приближение, супергидриды

PACS numbers: 71.10.Fd, **74.20.**–z, 74.20.Mn

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2021.05.039007>

Содержание

1. Введение (773).
 2. Приближение Элиашберга–Макмиллана (774).
 3. Теорема Мигдала (776).
 4. Сильная связь и неустойчивость решётки (778).
 5. Формула Макмиллана для электрон-фононной константы связи (781).
 6. Уравнения Элиашберга (781).
 - 6.1. Слабая и промежуточная связь. 6.2. Нижняя граница температуры сверхпроводящего перехода в пределе очень сильной связи.
 7. Максимальная температура сверхпроводящего перехода? (786).
 8. Супергидриды и теория Элиашберга (788).
 9. Заключение (788).
- Список литературы (789).

1. Введение

Открытие [1] сверхпроводимости с критической температурой, достигавшей $T_c = 203$ К 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 [2–4]). Теоретический анализ немедленно подтвердил, что эти рекордные значения T_c обеспечиваются традиционным элект-

рон-фононным взаимодействием в пределе достаточно сильной электрон-фононной связи [5, 6]. Более того, подробные расчёты для целого ряда гидридов редкоземельных металлов под давлением [6] привели к предсказанию достаточно большого числа таких систем с рекордно высокими значениями T_c . В ряде случаев эти предсказания получили блестящее подтверждение, в частности экспериментально достигнуты рекордные значения $T_c = 220–260$ К в системах LaH_{10} [7, 8], YN_6 [9], $(La, Y)H_{6,10}$ [10], YN_9 [11]. Наконец, недавно был перейдён новый психологический рубеж, когда в работе [12] была получена сверхпроводимость с $T_c = 287,7 \pm 1,2$ К (т.е. около $15^\circ C$) в системе $C–H–S$ при давлении 267 ± 10 ГПа.

Принципиальное значение указанных 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 К. Соответственно стал ещё более актуальным вопрос о верхней границе значений T_c , которая может быть достигнута за счёт этого механизма спаривания.

Со времени появления теории Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) стало очевидным, что повышение T_c в сверхпроводниках может быть достигнуто увеличением частоты фононов, ответственных за куперовское спаривание, а также эффективного взаимодействия их с электронами. Эти вопросы неоднократно исследовались разными авторами. Наиболее развитым подходом к описанию сверхпроводимости в системе электронов и фононов остаётся теория Элиашберга–Макмиллана [5, 13–16]. Хорошо известно, что эта теория целиком основана на

М.В. Садовский, Институт электрофизики УрО РАН,
ул. Амундсена 106, 620016 Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: sadovskii@ier.uran.ru

Статья поступила 12 мая 2021 г.

применимости адиабатического приближения и теореме Мигдала [17–20], позволяющей пренебречь вершинными поправками при расчётах эффектов электрон-фононного взаимодействия в типичных металлах. Реальный параметр малости теории возмущений при этом имеет вид $\lambda\Omega_0/E_F \ll 1$, где λ — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия, Ω_0 — характерная частота фононов, E_F — энергия Ферми электронов. В частности, это ведёт к выводу о том, что вершинными поправками в данной теории можно пренебречь даже при $\lambda > 1$ благодаря выполнению неравенства $\Omega_0/E_F \ll 1$, характерного для типичных металлов. Недавно в ряде работ [21–23] указанные представления были подвергнуты сомнениям и определённой ревизии на основе расчётов электрон-фононной системы квантовым методом Монте-Карло.

В работах [24–26] нами показано, что в условиях сильной неадиабатичности, когда $\Omega_0 \gg E_F$, в теории возникает новый параметр малости $\lambda_D \sim \lambda E_F/\Omega_0 \sim \lambda D/\Omega_0 \ll 1$ (D — полуширина электронной зоны), так что поправки к электронному спектру становятся несущественными. Вершинными поправками при этом также можно пренебречь, как было показано ранее в работе [27]. 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 , обобщённой с учётом конечности частоты фононов. Поэтому подход Элиашберга остаётся справедливым и в сильном антиадиабатическом пределе.

В целом, интерес к проблеме сверхпроводимости в сильном антиадиабатическом пределе стимулируется открытием ряда других сверхпроводников, для которых адиабатическое приближение не может считаться справедливым, а характерные частоты фононов порядка энергии Ферми электронов или даже превышают её. Весьма характерными в этом смысле являются интеркалированные системы с монослоями FeSe, а также монослои FeSe на подложках типа Sr(Ba)TiO₃ (FeSe/STO) [28].

Впервые на неадиабатический характер сверхпроводимости в применении к FeSe/STO обратил внимание Горьков [29, 30] при обсуждении идеи о возможном механизме повышения температуры сверхпроводящего перехода T_c в системе FeSe/STO за счёт взаимодействия с высокоэнергетическими оптическими фононами в SrTiO₃ [28]. Аналогичная ситуация возникает и в старой задаче о сверхпроводимости в легированном SrTiO₃ [31], а также в разориентированных бислоях (трислоях) графена [32]. В гидридах также возможно существование небольших "карманов" поверхности Ферми с малыми значениями энергии Ферми [5].

Настоящая статья посвящена критическому рассмотрению этого круга вопросов на достаточно элементарном уровне. Мы не претендуем на исчерпывающее изложение, тем более на полный обзор множества выполненных за последние десятилетия работ, посвящённых изучению уравнений Элиашберга. Тем не менее автор надеется, что такое изложение может оказаться полезным как для начинающих теоретиков, так и для опытных специалистов.

2. Приближение Элиашберга – Макмиллана

Гамильтониан Фрелиха, который обычно используется для описания электрон-фононного взаимодействия, имеет вид [13, 19]

$$H = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{k}} \Omega_{0\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}} (b_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^{\dagger}), \quad (1)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ — спектр электронов, отсчитанный от уровня Ферми, $\Omega_{0\mathbf{k}}$ — спектр фононов¹ и введены стандартные обозначения для операторов рождения $a_{\mathbf{p}}^{\dagger}$ и уничтожения $a_{\mathbf{p}}$ электронов и соответствующих операторов $b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$, $b_{\mathbf{k}}$ для фононов, N — число атомов в кристалле.

Матричный элемент электрон-фононного взаимодействия имеет вид [13, 19]

$$g_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\sqrt{2M\Omega_{0\mathbf{k}}}} \langle \mathbf{p} | \mathbf{e}(\mathbf{q}) \nabla V_{\text{ei}}(\mathbf{r}) | \mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle \equiv -\frac{1}{\sqrt{2M\Omega_{0\mathbf{k}}}} I(\mathbf{k}), \quad (2)$$

где V_{ei} — потенциал электрон-ионного взаимодействия, M — масса иона, $\mathbf{e}(\mathbf{q})$ — вектор поляризации фонона с частотой $\Omega_{0\mathbf{q}}$.

Для описания спектра фононов часто пользуются упрощёнными моделями Дебая и Эйнштейна. В модели Дебая спектр фононов полагается равным $\Omega_{0\mathbf{k}} = ck$ (c — скорость звука) при всех $k < k_D$, что даёт элементарную модель акустических фононов. При этом частота Дебая $\Omega_D = ck_D$ задаёт предельную частоту фононов. В модели Эйнштейна частота фононов полагается не зависящей от волнового вектора: $\Omega_{0\mathbf{k}} = \Omega_0$ при всех значениях k в зоне Бриллюэна, что даёт упрощённую модель оптических фононов.

Для описания взаимодействия электронов с оптическими (эйнштейновскими) фононами часто используется и так называемая модель Холстейна, гамильтониан которой обычно записывается в координатном (узельном) представлении в решётке, а электрон-фононное взаимодействие считается локальным (одноузельным):

$$H = -t \sum_{i,j\sigma} (t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + \text{h.c.}) + \Omega_0 \sum_i b_i^{\dagger} b_i - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} + g \sum_i (b_i + b_i^{\dagger}) \sum_{\sigma} n_{i\sigma}, \quad (3)$$

где $a_{i\sigma}^{\dagger}$ и $a_{i\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона со спином σ на узле решётки i , $n_i = a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma}$ — оператор плотности электронов на узле, t_{ij} — интегралы переноса электронов между узлами решётки, определяющие их спектр в приближении сильной связи (ширину зоны), b_i^{\dagger} и b_i — соответствующие операторы для фононов с частотой Ω_0 . Величина электрон-фононного взаимодействия определяется константой g . Очевидно, что данная модель описывает локальное взаимодействие эйнштейновского фонона с электронной плотностью на узле решётки. Химический потенциал μ определяется заполнением зоны проводимости и задаёт начало отсчёта энергии электронов.

¹ Заметим сразу, что здесь введён "затравочный" спектр фононов *в отсутствие* электрон-фононного взаимодействия, способ определения которого в реальном металле не вполне ясен.

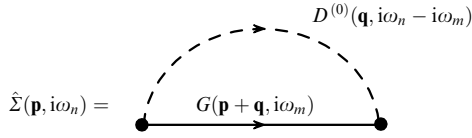


Рис. 1. Диаграмма второго порядка для собственно-энергетической части.

Рассмотрим простейшую диаграмму второго порядка (по электрон-фононному взаимодействию), показанную на рис. 1. Расчёты проведём в мацубаровской технике (т.е. при конечных температурах $T > 0$). Аналитическое выражение, соответствующее этой диаграмме, имеет вид

$$\Sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) = -T \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 G_0(i\omega_{n'}, \mathbf{p}') \times D_0(i\omega_n - i\omega_{n'}, \mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (4)$$

Индекс 0 у функций Грина электрона $G_0(i\omega_{n'}, \mathbf{p}')$ и фонона $D_0(i\omega_n - i\omega_{n'}, \mathbf{p} - \mathbf{p}')$ в (4) подчёркивает, что речь здесь идёт о функциях Грина свободных частиц.

Суммирование по мацубаровским частотам выполним стандартным образом [19, 20], в результате получим

$$\Sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \left(\frac{f_{\mathbf{p}'} + n_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{p}'} + \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}} + \frac{1 - f_{\mathbf{p}'} + n_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{p}'} - \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}} \right), \quad (5)$$

где $f(\mathbf{p}) = 1/[\exp(\varepsilon_{\mathbf{p}}/T) + 1]$ — фермиевская функция электронов, $n_q = 1/[\exp(\Omega_{0q}/T) - 1]$ — планковская (бозевская) функция распределения для фононов. При температуре $T \rightarrow 0$ распределение Ферми для электронов превращается в ступеньку, а планковская функция фононов обращается в нуль, так что в правой части (5) первый член в скобках отличен от нуля только при $\varepsilon_{\mathbf{p}'} < 0$, а второй — при $\varepsilon_{\mathbf{p}'} > 0$. Соответственно в пределе $T = 0$ после замены $i\omega_n \rightarrow \varepsilon + i\delta \operatorname{sign} \varepsilon_{\mathbf{p}'}$ вклад диаграммы рис. 1 можно представить в виде [13]

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \left(\frac{f_{\mathbf{p}'}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{p}'} + \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'} - i\delta} + \frac{1 - f_{\mathbf{p}'}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{p}'} - \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'} + i\delta} \right). \quad (6)$$

Уравнение (6) можно тождественным образом переписать как

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \int d\omega \sum_{\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \delta(\omega - \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}) \times \left(\frac{f_{\mathbf{p}'}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{p}'} + \omega - i\delta} + \frac{1 - f_{\mathbf{p}'}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{p}'} - \omega + i\delta} \right). \quad (7)$$

Рассеяние электронов на фононах фактически происходит в узком энергетическом слое вблизи уровня Ферми шириной порядка удвоенной дебаевской частоты $2\Omega_D$, а в типичных металлах всегда $\Omega_D \ll E_F$. В этой ситуации можно с высокой точностью считать, что начальный и конечный импульсы \mathbf{p} и \mathbf{p}' лежат на поверхности Ферми.

Основная идея подхода Элиашберга–Макмиллана состоит в том, что мы можем избавиться от явной зависимости от импульсов, проводя усреднение матричного элемента электрон-фононного взаимодействия по изоэнергетическим поверхностям, соответствующим энергиям электрона с начальным и конечным импульсами \mathbf{p} и \mathbf{p}' , что практически совпадает с усреднением по соответствующим реальным поверхностям Ферми металла, определяемым уравнениями $\varepsilon(\mathbf{p}) = 0$ и $\varepsilon(\mathbf{p}') = 0$. Достигается это следующей заменой:

$$\begin{aligned} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \delta(\omega - \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}) &\Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{1}{N(0)} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{N(0)} \sum_{\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \delta(\omega - \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}) \equiv \\ &\equiv \frac{1}{N(0)} \alpha^2(\omega) F(\omega), \end{aligned} \quad (8)$$

где $N(0)$ — плотность состояний на уровне Ферми, в последней строке введено стандартное определение функции Элиашберга $\alpha^2(\omega)$, отражающей силу электрон-фононного взаимодействия, $F(\omega) = \sum_{\mathbf{q}} \delta(\omega - \Omega_{0\mathbf{q}})$ — фононная плотность состояний. В принципе эти функции могут быть непосредственно определены из эксперимента.

В случае, когда энергия фононов становится сопоставимой с энергией Ферми или тем более превышает её, рассеяние электронов происходит не в узком слое вблизи поверхности Ферми, а в более широком интервале энергий. Тогда при начальном $|\mathbf{p}| \sim p_F$ усреднение по \mathbf{p}' в выражении типа (8) надо проводить по изоэнергетической поверхности, соответствующей $E_F + \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$ [24, 26]. Таким образом, выражение (8) непосредственно обобщается как

$$\begin{aligned} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \delta(\omega - \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}) &\Rightarrow \frac{1}{N(0)} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{N(0)} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \delta(\omega - \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'} - \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}) \equiv \\ &\equiv \frac{1}{N(0)} \alpha^2(\omega) F(\omega), \end{aligned} \quad (9)$$

что в последней δ -функции просто соответствует переходу от химического потенциала μ к $\mu + \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$. Напомним, что у нас, как всегда, все энергии отсчитываются от $\mu = 0$.

После замены наподобие (8) явная зависимость от импульсов в собственно-энергетической части исчезает и далее мы фактически имеем дело с усреднённой по реальной поверхности Ферми

$$\Sigma(\varepsilon) \equiv \frac{1}{N(0)} \sum_{\mathbf{p}} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}),$$

которая теперь выражается в виде

$$\begin{aligned} \Sigma(\varepsilon) &= \int d\varepsilon' \int d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) \left(\frac{f(\varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon' + \omega - i\delta} + \right. \\ &\left. + \frac{1 - f(\varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon' - \omega + i\delta} \right). \end{aligned} \quad (10)$$

В случае собственно-энергетической части, зависящей только от частоты (но не от импульса), мы можем воспользоваться обычными выражениями для вычета (обратного) в полюсе функции Грина и перенормировки массы электрона [20]²:

$$Z = 1 - \left. \frac{\partial \Sigma(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0}, \quad (11)$$

$$m^* = Zm = m \left(1 - \left. \frac{\partial \Sigma(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \right). \quad (12)$$

Вводя теперь безразмерную константу электрон-фононного взаимодействия в теории Элиашберга–Макмиллана как

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

непосредственными вычислениями из (10) немедленно получаем стандартное выражение для перенормировки массы электрона за счёт взаимодействия с фононами:

$$m^* = m(1 + \lambda). \quad (14)$$

Функция $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ в выражении для элиашберговской константы электрон-фононного взаимодействия (13) должна вычисляться здесь по (8) или определяться из эксперимента.

Используя (8), можно представить (13) в следующем виде:

$$\lambda = \frac{2}{N(0)} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \delta(\omega - \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}), \quad (15)$$

что и даёт стандартный способ вычисления электрон-фононной константы λ , которая, в частности, определяет куперовское спаривание в теории Элиашберга–Макмиллана.

В модели с эйнштейновскими фононами $\Omega_{0k} \rightarrow \Omega_0$ и $g_k \rightarrow g_0$ безразмерная константа электрон-фононной связи (15) немедленно сводится к стандартному виду [20]:

$$\lambda_0 = \frac{2g_0^2 N(0)}{\Omega_0}. \quad (16)$$

Однако надо помнить, что в общем случае функция $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ в выражении для элиашберговской константы электрон-фононного взаимодействия (13) должна вычисляться по (8) или (9), в зависимости от соотношения энергии Ферми E_F и характерной частоты фононов Ω_0 . До тех пор пока $\Omega_0 \ll E_F$, можно применять стандартное выражение (8), тогда как в случае $\Omega_0 \sim E_F$ надо использовать (9). Учитывая (9), можно переписать (13) в следующем виде:

$$\lambda = \frac{2}{N(0)} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \times \delta(\omega - \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'} - \Omega_{0\mathbf{p}-\mathbf{p}'}), \quad (17)$$

что и задаёт наиболее общий способ вычисления электрон-фононной константы λ , определяющей куперовское спаривание в теории Элиашберга–Макмиллана.

3. Теорема Мигдала

В разделе 2 при расчётах собственно-энергетической части электрона за счёт электрон-фононного взаимодействия мы ограничились простейшим вкладом, показанным на рис. 1. Казалось бы, необходимо учесть и другие графики, связанные с поправками к одной из вершин этой диаграммы. Фактически этого делать не надо, поскольку соответствующие поправки к вершинной части малы по адиабатическому параметру $\Omega_0/E_F \sim \sqrt{m/M} \ll 1$ (теорема Мигдала) [17] (см. также [13, 18–20]). Здесь Ω_0 — характерная частота фононов, порядка дебаевской частоты.

Поясним вышесказанное, оценив простейшую поправку к вершине, определяемую диаграммой, представленной на рис. 2. Ограничимся моделью с эйнштейновским спектром фононов. Запишем аналитическое выражение, соответствующее диаграмме рис. 2:

$$\Gamma^{(1)} = -g_0^3 \int G_0(\mathbf{p}_1 \varepsilon_1) G_0(\mathbf{p}_1 + \mathbf{k}, \varepsilon_1 + \omega) \times D_0(\varepsilon - \varepsilon_1, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \frac{d^3 p_1 d\varepsilon_1}{(2\pi)^4}. \quad (18)$$

Ограничимся грубой оценкой выражения (18). Рассмотрим сначала интеграл по ε_1 . Полагая, что характерная передача импульса за счёт обмена фононом порядка $k_D \sim p_F$, и учитывая, что $D_0(\varepsilon - \varepsilon_1)$ квадратично убывает в области $|\varepsilon - \varepsilon_1| \gg \Omega_0$, получаем, что основной вклад в интеграл даёт область $|\varepsilon - \varepsilon_1| \sim \Omega_0$. Тогда интеграл по ε_1 порядка единицы и мы можем написать

$$\Gamma^{(1)} \sim g_0^3 \int d^3 p_1 \times \frac{1}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_{\mathbf{p}_1} + i\delta \text{sign } \varepsilon_{\mathbf{p}_1})(\varepsilon_1 + \omega - \varepsilon_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{k}} + i\delta \text{sign } \varepsilon_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{k}})}. \quad (19)$$

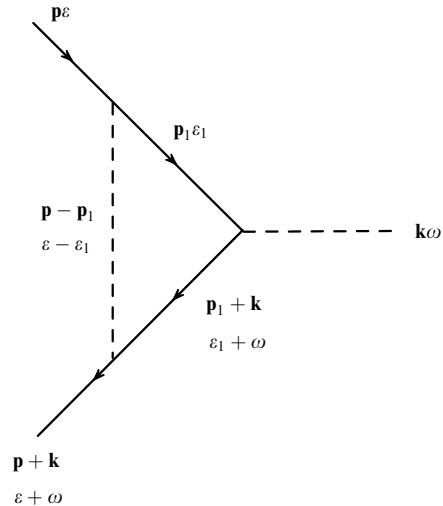


Рис. 2. Простейшая поправка к вершине электрон-фононного взаимодействия.

² Здесь принято обозначение, обратное используемому в теории нормальных металлов [20], из соображений соответствия с обозначениями, принимаемыми обычно в уравнениях Элиашберга теории сверхпроводимости. Соответственно $Z \geq 1$, так что вычет в полюсе функции Грина есть $Z^{-1} \leq 1$.

Рассмотрим оставшийся интеграл по p_1 . Характерная передача импульса и здесь порядка $k_D \sim p_F$. Поэтому можно считать все знаменатели $\sim E_F$, а $\int d^3 p_1 \sim N(0)E_F$. Отсюда имеем

$$\Gamma^{(1)} \sim g_0^3 N(0) \frac{E_F}{E_F^2} \sim g_0^3 \frac{N(0)}{\Omega_0} \frac{\Omega_0}{E_F} \sim g_0 \lambda_0 \frac{\Omega_0}{E_F}. \quad (20)$$

Следовательно, относительная величина этой поправки

$$\frac{\Gamma^{(1)}}{g_0} \sim \lambda_0 \frac{\Omega_0}{E_F} \sim \lambda_0 \sqrt{\frac{m}{M}}, \quad (21)$$

где использованы соотношения $\Omega_0/E_F \sim \omega_D/E_F \sim \sqrt{m/M}$, m — масса электрона, M — масса иона. Электроны много легче ионов (ядер), поэтому рассмотренная поправка к вершинной части действительно пренебрежимо мала. Более аккуратный анализ полностью подтверждает этот вывод [13, 18], который и составляет содержание теоремы Мигдала.

Теорема Мигдала позволяет пренебречь вершинными поправками при расчётах, связанных с электрон-фононным взаимодействием в типичных металлах. Реальный параметр малости теории возмущений имеет вид $\lambda_0 \Omega_0/E_F \ll 1$, где λ_0 — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия, Ω_0 — характерная частота фононов порядка дебаевской частоты, E_F — энергия Ферми электронов, которая в типичных металлах по порядку величины совпадает с шириной зоны проводимости и определяет максимальный масштаб энергии. В частности, последнее ведёт к общепринятой точке зрения о том, что вершинными поправками в данной теории можно пренебречь даже при $\lambda_0 > 1$, если выполняется неравенство $\Omega_0/E_F \ll 1$, характерное для типичных металлов. Фактически это означает, что рассмотрения диаграммы рис. 1 достаточно даже в случае сильной связи электронов с фононами.

Рассмотрение, проводившееся до сих пор, неявно предполагало бесконечную ширину зоны проводимости. В случае достаточно большой характерной частоты фононов она может оказаться сравнимой не только с энергией Ферми, но и с шириной зоны проводимости. Любопытно, что в пределе очень сильной неадиабатичности, когда $\Omega_0 \gg E_F \sim D$ (D — полуширина зоны проводимости), в теории снова возникает малый параметр теории возмущений $\lambda D/\Omega_0 \sim \lambda E_F/\Omega_0$ [24, 26]. Естественно, λ в этом случае должна вычисляться по формуле (17).

Рассмотрим случай зоны проводимости с конечной шириной $2D$ и постоянной плотностью состояний (двумерный случай). Уровень Ферми считаем, как и выше, соответствующим началу отсчёта энергии и подразумеваем типичный случай полузаполненной зоны, так что $E_F = D$. Тогда (10) сводится к

$$\begin{aligned} \Sigma(\varepsilon) &= \int_{-D}^D d\varepsilon' \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) \left(\frac{f(\varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon' + \omega - i\delta} + \right. \\ &+ \left. \frac{1 - f(\varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon' - \omega + i\delta} \right) = \\ &= \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) \left(\ln \frac{\varepsilon + D + \omega - i\delta}{\varepsilon - D - \omega + i\delta} - \ln \frac{\varepsilon + \omega - i\delta}{\varepsilon - \omega + i\delta} \right). \end{aligned} \quad (22)$$

Соответственно из (22) получаем

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \Sigma(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon=0} &= 2 \int_0^D d\varepsilon' \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) \frac{1}{(\omega + \varepsilon')^2} = \\ &= 2 \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) \frac{D}{\omega(\omega + D)}, \end{aligned} \quad (23)$$

так что можно ввести, по определению, обобщённую константу связи в виде

$$\tilde{\lambda} = 2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2(\omega) F(\omega) \frac{D}{\omega + D}, \quad (24)$$

которая при $D \rightarrow \infty$ сводится к обычной константе Элиашберга–Макмиллана (13), а при $D \rightarrow 0$ даёт "антиадиабатическую" константу связи:

$$\lambda_D = 2D \int \frac{d\omega}{\omega^2} \alpha^2(\omega) F(\omega). \quad (25)$$

Выражение (24) описывает плавный переход между пределами широкой и узкой зон проводимости. Перенормировка массы в общем случае определяется константой $\tilde{\lambda}$:

$$m^* = m(1 + \tilde{\lambda}). \quad (26)$$

Для модели одного эйнштейновского фонона с частотой Ω_0 имеем $F(\omega) = \delta(\omega - \Omega_0)$, отсюда

$$\tilde{\lambda} = \frac{2}{\Omega_0} \alpha^2(\Omega_0) \frac{D}{\Omega_0 + D} = \lambda \frac{D}{\Omega_0 + D} = \lambda_D \frac{\Omega_0}{\Omega_0 + D}, \quad (27)$$

где константа связи Элиашберга–Макмиллана

$$\lambda = 2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2(\omega) F(\omega) = \alpha^2(\Omega_0) \frac{2}{\Omega_0}, \quad (28)$$

причём из сравнения с (16) ясно, что $\alpha^2(\Omega_0) = g_0^2 N(0)$, а λ_D сводится к

$$\lambda_D = 2\alpha^2(\Omega_0) \frac{D}{\Omega_0^2} = 2\alpha^2(\Omega_0) \frac{1}{\Omega_0} \frac{D}{\Omega_0}, \quad (29)$$

где в последнем выражении выделен возникающий в сильном антиадиабатическом пределе новый малый параметр $D/\Omega_0 \ll 1$. Соответственно в этом пределе всегда имеем

$$\lambda_D = \lambda \frac{D}{\Omega_0} \sim \lambda \frac{E_F}{\Omega_0} \ll \lambda, \quad (30)$$

так что при разумных значениях λ (даже вплоть до области сильной связи, когда $\lambda \sim 1$) "антиадиабатическая" константа связи остаётся малой. Очевидно, что и вершинные поправки также становятся в этом пределе малыми, как было показано непосредственными вычислениями в работе [27].

Таким образом, мы приходим к неожиданному выводу: в пределе сильной неадиабатичности электрон-фононная связь снова становится слабой! В этом смысле в антиадиабатическом пределе можно снова говорить о выполнимости теоремы Мигдала. Физический смысл слабости электрон-фононной связи в сильном неадиабатическом пределе достаточно ясен из качественных соображений: когда ионы движутся существенно быстрее электронов, последние не успевают "подстраиваться" к быстро меняющейся конфигурации ионов и поэтому слабо реагируют на их движение.



Рис. 3. Уравнение Дайсона для полной ("одетой") фононной функции Грина.

4. Сильная связь и неустойчивость решётки

Общее выражение для фононной функции Грина с учётом взаимодействия с электронами задаётся уравнением Дайсона, показанным на рис. 3. В аналитическом виде имеем

$$D^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_m) = D_0^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_m) - |g_{\mathbf{k}}|^2 \Pi(\mathbf{k}, i\omega_m), \quad (31)$$

откуда получаем

$$D(\mathbf{k}, i\omega_m) = \frac{2\Omega_{0\mathbf{k}}}{(i\omega_m)^2 - \Omega_{0\mathbf{k}}^2 - 2\Omega_{0\mathbf{k}}|g_{\mathbf{k}}|^2 \Pi(\mathbf{k}, i\omega_m)}. \quad (32)$$

Отсюда ясно, что после обычного перехода к вещественным частотам фононный спектр (перенормированный взаимодействием) определяется из уравнения

$$\Omega_{\mathbf{k}}^2 = \Omega_{0\mathbf{k}}^2 \left(1 + \frac{2|g_{\mathbf{k}}|^2}{\Omega_{0\mathbf{k}}} \Pi(\mathbf{k}, \Omega_{\mathbf{k}}) \right). \quad (33)$$

В адиабатическом приближении, учитывая теорему Мигдала, поляризационный оператор здесь можно взять в виде простой петли. Для простейшего случая свободных электронов имеем [20]

$$\Pi(\mathbf{k}, i\omega_m) = -2N(0) \left(1 + \frac{i\omega_m}{2v_F k} \ln \frac{i\omega_m - v_F k}{i\omega_m + v_F k} \right), \quad (34)$$

или, после замены $i\omega_m \rightarrow \omega + i\delta$,

$$\Pi(\mathbf{k}, \omega + i\delta) = -2N(0) \left(1 + \frac{\omega}{2v_F k} \ln \frac{\omega - v_F k + i\delta}{\omega + v_F k + i\delta} \right), \quad (35)$$

где v_F — скорость электрона на поверхности Ферми, которая существенно превышает скорость звука, так что значения $v_F k$ здесь заметно выше частот акустических фононов, а при типичных $k \sim k_F$ — и оптических фононов тоже. В этом ещё раз проявляется значение адиабатического приближения в металлах. Таким образом, при расчётах фононного спектра с помощью (33) мы можем с хорошей точностью сразу положить в поляризационном операторе $\omega = 0$. При этом мнимая часть поляризационного оператора обращается в нуль и мы имеем просто $\Pi(0, 0) = -2N(0)$. Тогда перенормированный взаимодействиями с электронами спектр фононов определяется из

$$\Omega_{\mathbf{k}}^2 = \Omega_{0\mathbf{k}}^2 \left[1 + \frac{2|g_{\mathbf{k}}|^2}{\Omega_{0\mathbf{k}}} \Pi(0, 0) \right] = \Omega_{0\mathbf{k}}^2 \left[1 + \frac{\lambda_0^k}{N(0)} \Pi(0, 0) \right] \quad (36)$$

и имеет вид

$$\Omega_{\mathbf{k}}^2 = \Omega_{0\mathbf{k}}^2 [1 - 2\lambda_0^k], \quad (37)$$

где мы ввели обычное определение безразмерной константы электрон-фононного взаимодействия [20]:

$$\lambda_0^k = \frac{2|g_{\mathbf{k}}|^2 N(0)}{\Omega_{0\mathbf{k}}}. \quad (38)$$

В таком (достаточно грубом) приближении исчезает относительно малое затухание фононов за счёт электрон-фононного взаимодействия, которое можно получить при более аккуратном учёте мнимой части поляризационного оператора [20].

"Затравочная" функция Грина фононов на вещественных частотах ($T = 0$)

$$D_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \Omega_{0\mathbf{k}} + i\delta} - \frac{1}{\omega + \Omega_{0\mathbf{k}} - i\delta} = \frac{2\Omega_{0\mathbf{k}}}{\omega^2 - \Omega_{0\mathbf{k}}^2 + i\delta} \quad (39)$$

после такого "одевания" за счёт взаимодействия с электронами переходит [20] в

$$D(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2\Omega_{0\mathbf{k}}}{\omega^2 - \Omega_{\mathbf{k}}^2 + i\delta}, \quad (40)$$

где перенормированный спектр фононов имеет вид (37).

Спектр (37) означает неустойчивость решётки при $\lambda_0^k > 1/2$. Эта неустойчивость часто считается нефизической, на что указывалось ещё в ранней работе Фрелиха [33], где она впервые была получена. Суть дела можно пояснить следующим образом. Представим "одетую" функцию Грина фононов (40) тождественно как

$$D(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2\Omega_{\mathbf{k}}}{\omega^2 - \Omega_{\mathbf{k}}^2 + i\delta} \frac{\Omega_{0\mathbf{k}}}{\Omega_{\mathbf{k}}}. \quad (41)$$

Тогда становится ясным, что при вычислении диаграмм, в частности показанной на рис. 1, для собственно-энергетической части с использованием с самого начала именно такой перенормированной функции Грина фононов физическая константа электрон-фононного взаимодействия (вместо (38)) принимает вид

$$\lambda^k = \frac{2|g_{\mathbf{k}}|^2 N(0)}{\Omega_{\mathbf{k}}} \frac{\Omega_{0\mathbf{k}}}{\Omega_{\mathbf{k}}} = \frac{2|g_{\mathbf{k}}|^2 N(0)}{\Omega_{0\mathbf{k}}} \frac{\Omega_{0\mathbf{k}}^2}{\Omega_{\mathbf{k}}^2} = \lambda_0^k \frac{\Omega_{0\mathbf{k}}^2}{\Omega_{\mathbf{k}}^2} \quad (42)$$

или с использованием (37)

$$\lambda^k = \frac{\lambda_0^k}{1 - 2\lambda_0^k}. \quad (43)$$

Видим, что при $\lambda_0^k \rightarrow 1/2$ перенормированная константа связи λ^k монотонно возрастает и в пределе расходится. Именно она и определяет "истинную" величину электрон-фононного взаимодействия (с "одетыми" фононами) и никаких ограничений на её величину действительно не возникает. Такая физическая картина подробно обсуждалась, в частности, в известной монографии [34].

В модели с одним эйнштейновским фононом, которая является неплохой аппроксимацией для случая оптического фонона, имеем $\Omega_{\mathbf{k}} = \Omega_0$ и про зависимость константы взаимодействия от импульса фонона можно просто забыть, так что

$$\lambda_0 = \frac{2g_0^2 N(0)}{\Omega_0}, \quad (44)$$

$$\Omega^2 = \Omega_0^2 [1 - 2\lambda_0], \quad (45)$$

$$\lambda = \frac{2g_0^2 N(0)}{\Omega_0} \left(\frac{\Omega_0}{\Omega} \right)^2 = \frac{\lambda_0}{1 - 2\lambda_0}. \quad (46)$$

Выражение (43) можно обратить, записав его как

$$\lambda_0^k = \frac{\lambda^k}{1 + 2\lambda^k}, \quad (47)$$

представив нефизическую "затравочную" константу электрон-фононной связи λ_0^k через "истинную" физическую константу связи λ^k . Используя (47) в уравнении для перенормированного спектра фононов (37), запишем его в виде

$$\Omega_{\mathbf{k}}^2 = \Omega_{0\mathbf{k}}^2 \left(1 - \frac{2\lambda^k}{1 + 2\lambda^k} \right) = \Omega_{0\mathbf{k}}^2 \frac{1}{1 + 2\lambda^k}, \quad (48)$$

из которого следует, что в таком представлении никакой неустойчивости спектра (решётки) не возникает, а при возрастании λ^k происходит постепенное "смягчение" спектра за счёт усиления электрон-фононного взаимодействия.

В модели эйнштейновского фонона всё снова упрощается и мы имеем

$$\lambda_0 = \frac{\lambda}{1 + 2\lambda}, \quad (49)$$

$$\Omega = \frac{\Omega_0}{\sqrt{1 + 2\lambda}}. \quad (50)$$

В формализме Элиашберга – Макмиллана, где проводится усреднение по импульсам электронов на поверхности Ферми (произвольной), функция Макмиллана $\alpha^2(\omega)F(\omega)$, естественно, должна определяться через физический (перенормированный) спектр фононов:

$$\alpha^2(\omega)F(\omega) = \frac{1}{N(0)} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \delta(\omega - \Omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}). \quad (51)$$

В частном случае эйнштейновского спектра фононов отсюда сразу следует (46) и никаких ограничений на величину λ при этом не возникает.

При самосогласованном подходе к выводу уравнений Элиашберга следует использовать диаграмму рис. 1, в которой фононная функция Грина берётся в "одетом" виде (40) или (41) и описывает физический (перенормированный) спектр фононов. При этом в ней уже *не следует* учитывать поправки от электрон-фононного взаимодействия, поскольку они уже включены в спектр (37).

Необходимо заметить, что полученная выше величина критической константы электрон-фононной связи, при которой возникает "фрëлиховская" неустойчивость фононного спектра, является, конечно, прямым следствием использования простейшего выражения для поляризационного оператора газа свободных электронов (34), (35), при вычислении которого пренебрегалось, помимо вершинных поправок, самосогласованным "одеванием" входящих в него электронных функций Грина. Естественно, даже в простейших случаях, типа задачи с эйнштейновским спектром, учёт таких высших поправок и конкретной структуры электронного спектра в решётке может несколько изменить значение λ_0 , соответствующее неустойчивости "затравочного" фононного спектра, так что оно будет отличаться от 1/2. В этом смысле лучше говорить о возникновении неустойчивости при некотором "критическом" значении $\lambda_0^c \sim 1/2$.

В общем случае, когда существенно обратное влияние электронов на фононы, выражение (51) может быть не-

посредственно обобщено как

$$\begin{aligned} \alpha^2(\omega)F(\omega) &= \frac{1}{N(0)} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} D(\omega, \mathbf{p} - \mathbf{p}') \right) \times \\ &\times \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}) = \\ &= \frac{1}{N(0)} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 B(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \omega) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}), \quad (52) \end{aligned}$$

где введена спектральная плотность фононов $B(\mathbf{q}, \omega)$, определяющая фононную функцию Грина (для определённости — мацубаровскую) через спектральное представление как

$$D(\mathbf{q}, i\omega_m) = \int_0^\infty B(\mathbf{q}, \omega) \frac{2\omega}{(i\omega_m^2 - \omega^2)} d\omega. \quad (53)$$

Отсюда, в частности, имеем

$$D(\mathbf{q}, 0) = -2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} B(\mathbf{q}, \omega). \quad (54)$$

Тогда для константы Элиашберга – Макмиллана λ получаем следующее общее представление:

$$\begin{aligned} \lambda &= 2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2(\omega)F(\omega) = \\ &= \frac{2}{N(0)} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 B(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \omega) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}) = \\ &= -\frac{1}{N(0)} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 D(\mathbf{p} - \mathbf{p}', 0) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}). \quad (55) \end{aligned}$$

В модели оптического фонона с частотой Ω_0 выражение (55) сразу сводится к

$$\lambda = -g_0^2 N(0) \langle D(\mathbf{p} - \mathbf{p}', 0) \rangle_{\text{FS}} = -\frac{\lambda_0 \Omega_0}{2} \langle D(\mathbf{p} - \mathbf{p}', 0) \rangle_{\text{FS}}, \quad (56)$$

где $\langle \dots \rangle_{\text{FS}}$ — обычное обозначение усреднения по импульсам на поверхности Ферми.

Существенно улучшить рассмотрение можно, проведя анализ на основе упоминавшейся выше упрощённой модели Холстейна (3), в которой локальный (одноузельный) характер взаимодействия позволяет использовать динамическую теорию среднего поля (Dynamical Mean-Field Theory, DMFT) [35 – 38] — эта теория становится точной (численно) в пределе решётки с бесконечной размерностью (бесконечным числом ближайших соседей). Такой анализ был выполнен, в частности, в работе [39], где в качестве "примесного решателя" (impurity solver) в DMFT использовался квантовый метод Монте-Карло (Quantum Monte Carlo, QMC). Основные результаты приведены на рис. 4, 5.

В частности, на рис. 4 показана зависимость перенормированной λ от "затравочной" λ_0 . Видно, что обычное поведение результатов теории Фрëлиха хорошо воспроизводится, а с несколько изменённым значением — при $\lambda_0^c = 0,464$. Аналогичная картина наблюдается и для перенормированной частоты фононов Ω , как видно из рис. 5. Незначительные отклонения от зависимости, предсказываемой теорией Элиашберга, наблюдаются только в непосредственной окрестности λ_0^c , а именно при $\lambda_0 > 0,4$.

Сама неустойчивость, возникающая при $\lambda_0 = \lambda_0^c$ в модели Холстейна (в DMFT-приближении) с полузапол-

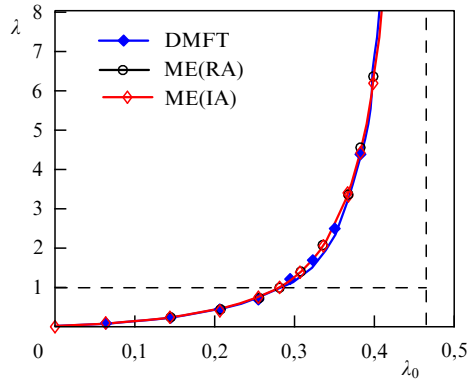


Рис. 4. Зависимость перенормированной константы связи λ , вычисленной по (56), от "затравочной" λ_0 , полученная в рамках самосогласованной теории Элиашберга (ME(RA) — в технике действительных частот, ME(IA) — в маубаровской технике) и в рамках DMFT(QMC) [39]. Вертикальная штриховая прямая соответствует $\lambda_0^c \approx 0,464$.

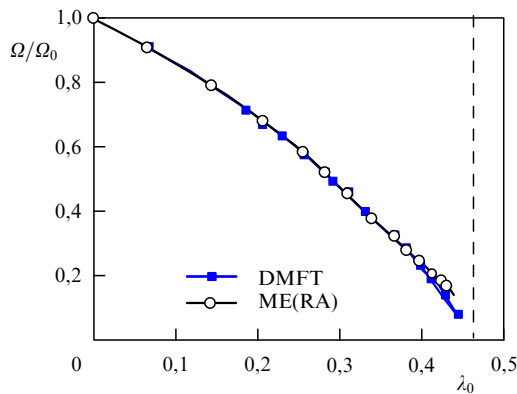


Рис. 5. Зависимость перенормированной частоты эйнштейновского фонона Ω от "затравочной" λ_0 , полученная в рамках самосогласованной теории Элиашберга (ME(RA) — в технике действительных частот) и в рамках DMFT(QMC) [39]. Вертикальная штриховая прямая соответствует $\lambda_0^c \approx 0,464$.

ненной исходной зоной, была убедительно интерпретирована [40] как переход в состояние *биполярного диэлектрика*. До этого перехода система остаётся металлом и хорошо описывается теорией Элиашберга (с незначительными количественными поправками).

В серии работ [21–23] проведены прямые расчёты ряда характеристик модели Холстейна на двумерной (квадратной) решётке динамическим квантовым методом Монте-Карло (Dynamic QMC, DQMC). Полученные результаты во многом аналогичны выводам работ [39, 40] — при значениях "затравочной" константы $\lambda_0 < 0,4$ наблюдается прекрасное согласие с предсказаниями теории Элиашберга, но в интервале λ_0 от 0,4 до 0,5 возникают некоторые отклонения. Этот интервал значений λ_0 , согласно тем же расчётам, соответствует интервалу значений перенормированной λ от 1,7 до 4,6. При $\lambda_0 \approx 0,5$ в системе происходит переход в состояние биполярного диэлектрика с соизмеримой волной зарядовой плотности (Charge Density Wave, CDW).

Совершенно ясно, что полученное выше критическое значение константы электрон-фононной связи, при которой возникает "фрёлеховская" неустойчивость фононного спектра при $\lambda_0 = 1/2$, является прямым следствием

использования нами простейшего выражения для поляризационного оператора газа свободных электронов (34), (35), в котором вообще нет существенной зависимости от волнового вектора \mathbf{k} . Естественно, такая зависимость отсутствует и в DMFT-приближении. Достаточно перейти, например, к более реалистичной модели спектра сильной связи в той или иной (не бесконечномерной!) кристаллической решётке, чтобы неустойчивость спектра могла реализоваться, вообще говоря, на конечном значении волнового вектора фонона \mathbf{k} [21–23, 41]. Возникновение таких неустойчивостей спектра, как хорошо известно, обычно соответствует образованию в системе волн зарядовой плотности [20]. При наличии "нестинга" поверхностей Ферми эти неустойчивости возникают (при $T = 0$) даже при сколь угодно малых значениях константы электрон-фононного взаимодействия [20]. При этом металл приобретает новое основное состояние (диэлектрического типа), так что всё теоретическое рассмотрение надо вести по-новому.

В рассматриваемом здесь более общем случае указанная неустойчивость возникает при конечных (достаточно больших) значениях "затравочной" константы электрон-фононного взаимодействия. Естественно, обычная теория Элиашберга–Макмиллана "работает" только в обычной металлической фазе, что и представляет основной интерес с точки зрения теории сверхпроводимости. В этом смысле мы не вполне согласны с терминологией работ [21–23], в которых утверждается, что при значениях $\lambda_0 \sim \lambda_0^c$ нарушаются условия применимости теории Элиашберга. В действительности в данной достаточно узкой области наблюдаются поправки, связанные с близостью к точке неустойчивости системы — фазового перехода к новому основному состоянию (биполяроны, CDW), в котором становятся важными флуктуации соответствующего параметра порядка. Теория Элиашберга, рассматриваемая как теория среднего поля, прекрасно работает практически во всей металлической области, кроме указанной "критической" окрестности λ_0^c , в том числе и при достаточно больших значениях *физической* константы связи λ (которая в самой точке этого перехода просто расходится).

Следует подчеркнуть, что все выводы о неустойчивости металлической фазы выше были сделаны в рамках чисто *модельных* подходов (модель Фрёлеха, модель Холстейна) в терминах "затравочных" параметров этих моделей типа λ_0 и Ω_0 , которые, как неоднократно отмечалось в литературе, довольно плохо определены физически. Данная проблема известна давно, и она неоднократно обсуждалась. Суть дела здесь в том, что физический спектр фононов в металле, рассматриваемом как система ионов и электронов, обычно понимается как рассчитанный в адиабатическом приближении [42]. Причём такой спектр только относительно слабо перенормируется за счёт неадиабатических эффектов, малых по параметру $\sqrt{m/M}$ [42, 43]. В этом он разительно отличается от "затравочного" спектра фононов в моделях Фрёлеха или Холстейна, который, как мы видели выше, весьма существенно перенормируется за счёт электрон-фононного взаимодействия. Физический смысл "затравочного" спектра фононов Ω_0 в этих моделях металлов остаётся не вполне ясным, в отличие от физического смысла спектра фононов в металле, рассчитанного в адиабатическом приближении. Во всяком случае он не может быть определён из каких-либо

экспериментов. Соответственно то же самое можно сказать и про параметры электрон-фононного взаимодействия.

Попытки построить последовательную теорию электрон-фононного взаимодействия на фоне физического (адиабатического) спектра фононов делались неоднократно [43], но не были особенно успешными. Довольно подробное обсуждение современного состояния этих вопросов можно найти в обзоре [44].

Кратко говоря, рецепт для практических расчётов состоит в том, чтобы отождествить перенормированный ("одетый") спектр фононов Ω в модели Фрëлиха или Холстейна с физическим (адиабатическим) спектром фононов, который уже не подлежит дальнейшей перенормировке и должен браться или из адиабатических расчётов, или из эксперимента³. Именно такая точка зрения и подразумевается обычно при проведении расчётов сверхпроводимости в рамках теории Элиашберга – Макмиллана. До тех пор пока система остаётся в металлическом состоянии, такая точка зрения может быть проведена вполне последовательно. При этом не возникает практически никаких ограничений на величину физической (перенормированной) константы взаимодействия λ , а теория Элиашберга – Макмиллана остаётся применимой даже при очень больших значениях λ (ограниченных только теоремой Мигдала).

5. Формула Макмиллана для электрон-фононной константы связи

Макмиллан получил простое выражение для безразмерной константы электрон-фононной связи в теории Элиашберга [16]. Запишем функцию Элиашберга – Макмиллана (8), используя (2), как

$$\begin{aligned} \alpha^2(\omega)F(\omega) &= \frac{1}{N(0)} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 \delta(\omega - \Omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}) = \\ &= \frac{1}{N(0)} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} \frac{1}{2M\Omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}} |I(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 \times \\ &\times \delta(\omega - \Omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}), \end{aligned} \quad (57)$$

где считаем, что $\Omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$ — физическая частота фононов. Отсюда немедленно получаем

$$\int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega)\omega = \frac{N(0)\langle I^2 \rangle}{2M}. \quad (58)$$

Перепишем теперь (13) в виде

$$\lambda = 2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2(\omega)F(\omega) = \frac{2}{\langle \Omega^2 \rangle} \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega)\omega, \quad (59)$$

где средний квадрат частоты фононов определён как

$$\langle \Omega^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega)\omega}{\int_0^\infty (1/\omega) d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega)} = \frac{2}{\lambda} \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega)\omega. \quad (60)$$

³ Идеологически ситуация здесь вполне аналогична таковой в стандартном подходе в квантовой электродинамике, где физический заряд и масса электрона определяются через бесконечные ряды теории возмущений и берутся из эксперимента.

Отсюда сразу же видим, что

$$\lambda = \frac{N(0)\langle I^2 \rangle}{M\langle \Omega^2 \rangle}, \quad (61)$$

где введён усреднённый по поверхности Ферми матричный элемент градиента электрон-ионного потенциала

$$\begin{aligned} \langle I^2 \rangle &= \frac{1}{[N(0)]^2} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} |I(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}) = \\ &= \frac{1}{[N(0)]^2} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} \left| \langle \mathbf{p} | \nabla V_{ei}(\mathbf{r}) | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}) = \\ &= \left\langle | \langle \mathbf{p} | \nabla V_{ei}(\mathbf{r}) | \mathbf{p}' \rangle |^2 \right\rangle_{FS}. \end{aligned} \quad (62)$$

Выражение (61) даёт весьма полезное представление константы λ , которое часто используется в литературе и практических расчётах.

6. Уравнения Элиашберга

Теория Элиашберга строится на основе системы уравнений для нормальной и аномальной функций Грина сверхпроводника [20]. Разумеется, решение этих *интегральных* уравнений с учётом особенностей реального спектра фононов представляет собой весьма трудную задачу. Тем не менее здесь был достигнут существенный прогресс, и теория традиционных сверхпроводников, основанная на картине спаривания за счёт электрон-фононного взаимодействия, является примером весьма успешного применения метода функций Грина. Прекрасное изложение методов анализа уравнений Элиашберга и результатов их применения можно найти в [16].

Ниже мы дадим несколько упрощённый вывод уравнений Элиашберга, опуская некоторые технические детали. В частности, мы не будем рассматривать роль прямого кулоновского отталкивания электронов в куперовской паре, которое учитывается в полной теории Элиашберга – Макмиллана [16], ограничившись только электрон-фононным взаимодействием. Учёт кулоновских вкладов не представляет особых трудностей [16] и сводится в конечном счёте к введению кулоновского псевдопотенциала μ^* [16], являющегося в типичных металлах достаточно малым и не очень существенным в пределе очень сильной связи с фононами, который мы и будем подробно рассматривать в дальнейшем⁴.

С учётом того что в адиабатическом приближении, согласно теореме Мигдала, вершинные поправки несущественны, уравнения Элиашберга могут быть выведены путём расчёта диаграммы рис. 1, в которой электронная функция Грина в сверхпроводящем состоянии берётся в матричном представлении Намбу [19]. Вычисления оказываются аналогичными выводу (10). Расчёты проведём в мацубаровской технике ($T \neq 0$). В формализме Намбу электронная функция Грина сверхпроводника выражается стандартным образом [16]:

$$\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{p}) = i\omega_n \hat{1} - \varepsilon_{\mathbf{p}} \hat{\sigma}_z - \hat{\Sigma}(i\omega_n, \mathbf{p}), \quad (63)$$

⁴ Разумеется, учёт μ^* очень важен для количественных оценок температуры сверхпроводящего перехода в области слабой и промежуточной связи.

где $\hat{\sigma}_i$ — матрицы Паули, а матричная собственнo-энергетическая часть представляется в виде⁵

$$\hat{\Sigma}(i\omega_n, \mathbf{p}) = (1 - Z(i\omega_n))i\omega_n \hat{1} + Z(i\omega_n)A(i\omega_n)\hat{\sigma}_x. \quad (64)$$

Здесь мы сразу вводим ряд упрощающих соображений, типа независимости введённых перенормировочного фактора $Z(i\omega_n)$ и щелевой функции $A(i\omega_n)$ от импульса [16]. Соответственно имеем

$$\hat{G}(i\omega_n, \mathbf{p}) = \frac{Z(i\omega_n)i\omega_n \hat{1} + \varepsilon_{\mathbf{p}}\hat{\sigma}_z + Z(i\omega_n)A(i\omega_n)\hat{\sigma}_x}{Z^2(i\omega_n)(i\omega_n)^2 - Z^2(i\omega_n)A^2(i\omega_n) - \varepsilon_{\mathbf{p}}^2}. \quad (65)$$

Собственно-энергетическая часть, соответствующая диаграмме, подобной представленной на рис. 1, с матричной функцией Грина электрона (65) записывается как

$$\hat{\Sigma}(\omega_n, \mathbf{p}) = -T \sum_m \sum_{\mathbf{p}'} |g_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}|^2 D(i\omega_n - i\omega_m, \mathbf{p} - \mathbf{p}') \times \hat{\sigma}_z \hat{G}(i\omega_m, \mathbf{p}') \hat{\sigma}_z, \quad (66)$$

где фононную функцию Грина $D(i\omega_n - i\omega_m, \mathbf{p} - \mathbf{p}')$ можно взять в виде, аналогичном (39), обозначив частоту фонона $\Omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$, как в (6).

Как мы знаем, вся физика обычной сверхпроводимости разыгрывается в слое шириной порядка $2\Omega_D \ll E_F$ вблизи поверхности Ферми. Поэтому мы можем здесь сделать замену (8) и получить из (66) выражение для собственно-энергетической части, усреднённой по импульсам на поверхности Ферми (аналогичное (10)). В результате возникает общая система уравнений для щели $A(\omega_n)$ и перенормировочного фактора $Z(\omega_n)$ следующего вида:

$$A(\omega_n)Z(\omega_n) = T \sum_{n'} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_0^{\infty} d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega) \times D(\omega_n - \omega_{n'}; \omega) \frac{A(\omega_{n'})}{\omega_{n'}^2 + \xi^2 + A^2(\omega_{n'})}, \quad (67)$$

$$1 - Z(\omega_n) = \frac{\pi T}{\omega_n} \sum_{n'} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_0^{\infty} d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega) \times D(\omega_n - \omega_{n'}; \omega) \frac{\omega_{n'}}{\omega_{n'}^2 + \xi^2 + A^2(\omega_{n'})}, \quad (68)$$

где введена функция

$$D(\omega_n - \omega_{n'}; \omega) = \frac{2\omega}{(\omega_n - \omega_{n'})^2 + \omega^2}. \quad (69)$$

Интеграл по ξ здесь легко вычисляется:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{\omega_{n'}^2 + \xi^2 + A^2(\omega_{n'})} = \frac{\pi}{\sqrt{\omega_{n'}^2 + A^2(\omega_{n'})}} \rightarrow \frac{\pi}{|\omega_{n'}|} \text{ при } A(\omega_{n'}) \rightarrow 0. \quad (70)$$

⁵ Возможный вклад, пропорциональный $\hat{\sigma}_y$, устраняется выбором фазы параметра порядка, а вклад, пропорциональный $\hat{\sigma}_z$, сводится к перенормировке химического потенциала [16].

Тогда линейризованное уравнение для щели (уравнение для T_c) приобретает вид

$$A(\omega_n)Z(\omega_n) = \pi T \sum_{n'} \int_0^{\infty} \alpha^2(\omega)F(\omega)D(\omega_n - \omega_{n'}; \omega) \frac{A(\omega_{n'})}{|\omega_{n'}|}, \quad (71)$$

где

$$1 - Z(\omega_n) = \frac{\pi T}{\omega_n} \sum_{n'} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_0^{\infty} d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega) \times D(\omega_n - \omega_{n'}; \omega) \frac{\omega_{n'}}{|\omega_{n'}|}. \quad (72)$$

Общее уравнение для щели имеет вид

$$A(\omega_n)Z(\omega_n) = \pi T \sum_{n'} \int_0^{\infty} \alpha^2(\omega)F(\omega) \times D(\omega_n - \omega_{n'}; \omega) \frac{A(\omega_{n'})}{\sqrt{\omega_{n'}^2 + A^2(\omega_{n'})}}, \quad (73)$$

причём для определения фактора $Z(\omega_n)$ возникает связанное с (73) уравнение вида

$$1 - Z(\omega_n) = \frac{\pi T}{\omega_n} \sum_{n'} \int_0^{\infty} d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega) \times D(\omega_n - \omega_{n'}; \omega) \frac{\omega_{n'}}{\sqrt{\omega_{n'}^2 + A^2(\omega_{n'})}}. \quad (74)$$

В модели с эйнштейновским спектром фононов (73) сводится к

$$A(\omega_n)Z(\omega_n) = \pi T \lambda \sum_{n'} \frac{\Omega_0^2}{(\omega_n - \omega_{n'})^2 + \Omega_0^2} \times \frac{A(\omega_{n'})}{\sqrt{\omega_{n'}^2 + A^2(\omega_{n'})}}, \quad (75)$$

а (74) преобразуется как

$$Z(\omega_n) = 1 + \frac{\pi T \lambda}{\omega_n} \sum_{n'} \frac{\Omega_0^2}{(\omega_n - \omega_{n'})^2 + \Omega_0^2} \frac{\omega_{n'}}{\sqrt{\omega_{n'}^2 + A^2(\omega_{n'})}}, \quad (76)$$

где в явном виде выделяется константа связи λ , которая определяется стандартным выражением (13) и (28).

Для определения T_c (в пределе $A(\omega_{n'}) \rightarrow 0$) в системе с эйнштейновским спектром фононов получаем систему линейных однородных уравнений Элиашберга:

$$A(\omega_n)Z(\omega_n) = \pi T \lambda \sum_{n'} \frac{\Omega_0^2}{(\omega_n - \omega_{n'})^2 + \Omega_0^2} \frac{A(\omega_{n'})}{|\omega_{n'}|}, \quad (77)$$

где

$$Z(\omega_n) = 1 + \frac{\pi T \lambda}{\omega_n} \sum_{n'} \frac{\Omega_0^2}{(\omega_n - \omega_{n'})^2 + \Omega_0^2} \frac{\omega_{n'}}{|\omega_{n'}|}. \quad (78)$$

Ясно, что величина T_c определяется нулём детерминанта этой системы уравнений.

Заметим, что в общих уравнениях (73), (74) константа связи λ не выделяется в явном виде. Обычно выделение λ

в явном виде достигается приведением (73), (74) к "эйнштейновскому" виду типа (75), (76) посредством введения среднего квадрата частоты фононов, определяемого как

$$\langle \Omega^2 \rangle = \frac{2}{\lambda} \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) \omega, \quad (79)$$

и заменой в (73), (74)

$$\frac{1}{(\omega_n - \omega_{n'})^2 + \omega^2} \rightarrow \frac{1}{(\omega_n - \omega_{n'})^2 + \langle \Omega^2 \rangle}, \quad (80)$$

что и даёт (75), (76), а также уравнения для T_c (77), (78) с простой заменой $\Omega_0^2 \rightarrow \langle \Omega^2 \rangle$. В этом смысле общая структура "эйнштейновских" уравнений Элиашберга сохраняется и для случая фононного спектра общего вида. Всюду далее подразумевается такое приближение с отождествлением Ω_0^2 и $\langle \Omega^2 \rangle$.

Для модели фононного спектра в виде дискретного набора эйнштейновских фононов:

$$\alpha^2(\omega) F(\omega) = \sum_i \alpha^2(\Omega_i) \delta(\omega - \Omega_i) = \sum_i \frac{\lambda_i}{2} \Omega_i \delta(\omega - \Omega_i). \quad (81)$$

В этом случае из (79) имеем просто

$$\langle \Omega^2 \rangle = \frac{1}{\lambda} \sum_i \lambda_i \Omega_i^2, \quad (82)$$

где $\lambda = \sum_i \lambda_i$.

6.1. Слабая и промежуточная связь

Существует обширная литература по решению уравнений Элиашберга в области слабой и промежуточной связи $\lambda < 1$ [13, 14, 16]. Мы приведём здесь только качественные результаты для T_c . В модели с эйнштейновским спектром фононов и кулоновским псевдопотенциалом $\mu^* = 0$ имеем [20]

$$T_c \sim \Omega_0 \exp\left(-\frac{1+\lambda}{\lambda}\right). \quad (83)$$

Последнее выражение, по сути, близко к результатам точного численного анализа, проведённого в своё время Макмилланом⁶ [13, 14, 16].

Аналогичные оценки T_c можно получить и в сильном антиадиабатическом пределе, рассмотрев уравнения Элиашберга при $\lambda < 1$ в задаче с узкой электронной зоной, полуширина которой $D \sim E_F \ll \Omega_0$ [24–26]. Тогда соответствующим образом обобщённые уравнения Элиашберга для той же модели с эйнштейновским спектром дают

$$T_c \sim \frac{D}{1+D/\Omega_0} \exp\left(-\frac{1+\tilde{\lambda}}{\lambda}\right), \quad (84)$$

где эффективная константа $\tilde{\lambda}$ определена в (24), (27) и (30).

Выражение (84) интерполирует между адиабатическим и антиадиабатическим пределами. При $D \gg \Omega_0$ оно

переходит в (83), а при $D \ll \Omega_0$ сводится к

$$T_c \sim D \exp\left(-\frac{1}{\lambda}\right), \quad (85)$$

т.е. к выражению типа БКШ (слабая связь!), в котором предэкспоненциальный множитель определяется не частотой фононов, а полушириной зоны (энергией Ферми), играющей роль параметра обрезания расходимости в куперовском канале. Этот факт впервые был отмечен в работах Горькова [29–31].

Для более общей модели фононного спектра в виде дискретного набора эйнштейновских фононов (81) эти соотношения обобщаются очевидным образом [25, 26]:

$$\lambda = 2 \sum_i \frac{\alpha^2(\Omega_i)}{\Omega_i} \equiv \sum_i \lambda_i, \quad (86)$$

$$\tilde{\lambda} = 2 \sum_i \frac{\alpha^2(\Omega_i) D}{\Omega_i (\Omega_i + D)} = \sum_i \lambda_i \frac{D}{\Omega_i + D} \equiv \sum_i \tilde{\lambda}_i, \quad (87)$$

а вместо (84) имеем

$$T_c \sim \prod_i \left(\frac{D}{1+D/\Omega_i} \right)^{\lambda_i/\lambda} \exp\left(-\frac{1+\tilde{\lambda}}{\lambda}\right). \quad (88)$$

В простейшем случае двух эйнштейновских фононов с частотами Ω_1 и Ω_2 отсюда следует

$$T_c \sim \left(\frac{D}{1+D/\Omega_1} \right)^{\lambda_1/\lambda} \left(\frac{D}{1+D/\Omega_2} \right)^{\lambda_2/\lambda} \exp\left(-\frac{1+\tilde{\lambda}}{\lambda}\right), \quad (89)$$

где $\tilde{\lambda} = \tilde{\lambda}_1 + \tilde{\lambda}_2$ и $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$. В случае $\Omega_1 \ll D$ (адиабатический фонон) и $\Omega_2 \gg D$ (антиадиабатический фонон) (89) сводится к

$$T_c \sim (\Omega_1)^{\lambda_1/\lambda} (D)^{\lambda_2/\lambda} \exp\left(-\frac{1+\tilde{\lambda}}{\lambda}\right). \quad (90)$$

Уравнение (88) легко представить в виде

$$T_c \sim \langle \Omega_{\ln} \rangle \exp\left(-\frac{1+\tilde{\lambda}}{\lambda}\right), \quad (91)$$

где мы ввели среднелогарифмическую частоту $\langle \Omega_{\ln} \rangle$:

$$\ln \langle \Omega_{\ln} \rangle = \ln \prod_i \left(\frac{D}{1+D/\Omega_i} \right)^{\lambda_i/\lambda} = \sum_i \frac{\lambda_i}{\lambda} \ln \frac{D}{1+D/\Omega_i}. \quad (92)$$

В пределе непрерывного распределения частот фононов (92) сводится к

$$\ln \langle \Omega_{\ln} \rangle = \frac{2}{\lambda} \int \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2(\omega) F(\omega) \ln \frac{D}{1+D/\omega}, \quad (93)$$

где λ даётся обычным выражением (13).

В общем случае в предэкспоненциальном множителе выражения для T_c в теории Элиашберга в области слабой и промежуточной связи всегда стоит именно среднелогарифмическая частота фононов [16], а (93) обобщает стандартное определение этой частоты для случая электронной зоны с конечной шириной. Из (93) элементарно получается стандартное выражение среднелогарифмической частоты фононов [16] (см. также раздел 6.2) для адиабатического предела $D \rightarrow \infty$.

⁶ Здесь опущены некоторые численные константы ~ 1 . Если вспомнить о целом ряде приближений (не вполне контролируемых), сделанных при выводе самих уравнений Элиашберга, то становится ясно, что при этом мы практически не теряем точности.

6.2. Нижняя граница температуры сверхпроводящего перехода в пределе очень сильной связи

С точки зрения задачи достижения действительно высоких значений T_c основной интерес для нас представляет область сильной и очень сильной связи $\lambda > 1$, которая и будет рассматриваться ниже. Общие уравнения теории Элиашберга–Макмиллана в мацубаровском представлении, определяющие сверхпроводящую щель $\Delta(\omega_n)$ при любых температурах, имеют вид (73), (74) [13, 14].

Ограничения на величину T_c в пределе очень сильной связи нетрудно получить аналитически. Причём, как мы сейчас увидим, соответствующее поведение следует из оценки *нижней* границы T_c [45].

Рассмотрим линеаризованное уравнение для щели (71), определяющее T_c :

$$\Delta(\omega_n)Z(\omega_n) = \pi T \sum_{n'} \int_0^\infty \alpha^2(\omega) F(\omega) D(\omega_n - \omega_{n'}; \omega) \frac{\Delta(\omega_{n'})}{|\omega_{n'}|}, \quad (94)$$

где функция Грина фонона определена в (69). Рассмотрим здесь только вклад при $n = 0$. Тогда, оставляя в сумме в (78) только вклад от $n' = 0$, получим

$$Z(0) = 1 + \lambda, \quad (95)$$

что при подстановке в (94) для $n = 0$ сокращает аналогичный (соответствующий $n' = 0$) член в правой части [15, 46], и уравнение для $\Delta(0) = \Delta(\pi T)$ принимает вид

$$\Delta(0) = \pi T \sum_{n' \neq 0} \int_0^\infty \alpha^2(\omega) F(\omega) \frac{2\omega}{(\pi T - \omega_{n'})^2 + \omega^2} \frac{\Delta(\omega_{n'})}{|\omega_{n'}|}. \quad (96)$$

Все члены в правой части положительны. Оставим поэтому в ней только вклад от $n' = -1$ и с учётом $\Delta(-1) = \Delta(-\pi T) = \Delta(\pi T) = \Delta(0)$, сокращая $\Delta(0)$ в левой и правой частях, сразу получим *неравенство* [45]

$$1 > \int_0^\infty d\omega \frac{2\alpha^2(\omega)F(\omega)\omega}{(2\pi T)^2 + \omega^2}. \quad (97)$$

Поскольку здесь $T = T_c$, это даёт оценку T_c *снизу*. В частности, в модели эйнштейновского спектра $F(\omega) = \delta(\omega - \Omega_0)$ неравенство (97) сразу же выражается в виде

$$1 > 2\alpha^2(\Omega_0) \frac{\Omega_0}{(2\pi T)^2 + \Omega_0^2} = \lambda \frac{\Omega_0^2}{(2\pi T)^2 + \Omega_0^2}, \quad (98)$$

отсюда имеем

$$T_c > \frac{1}{2\pi} \sqrt{\lambda - 1} \Omega_0, \quad (99)$$

что при $\lambda \gg 1$ даёт

$$T_c > \frac{1}{2\pi} \sqrt{\lambda} \Omega_0 \approx 0,16 \sqrt{\lambda} \Omega_0. \quad (100)$$

Для дискретного спектра фононов (81) неравенство (97) сводится к

$$1 > \sum_i \lambda_i \frac{\Omega_i^2}{(2\pi T)^2 + \Omega_i^2}, \quad (101)$$

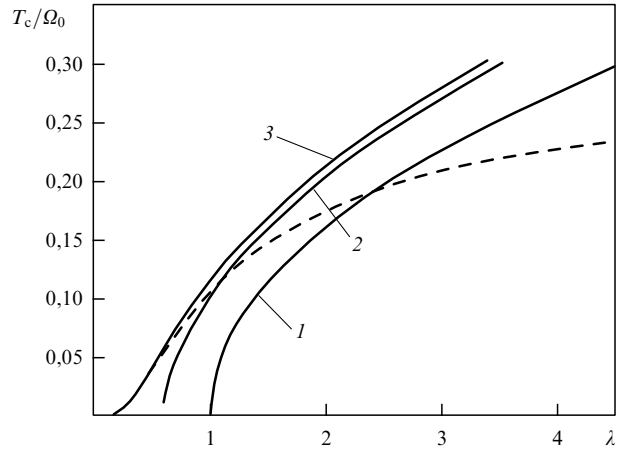


Рис. 6. Температура сверхпроводящего перехода в эйнштейновской модели фононного спектра в единицах T_c/Ω_0 как функция спаривательной константы λ [45]: 1 — нижняя граница (99), 2 — решение системы двух линейных уравнений ($n = 0, \pm 1$), 3 — численно точное решение полной системы уравнений ($n \leq 63$) [45]. Формула Макмиллана для T_c [16] представлена штриховой кривой (для случая $\mu^* = 0$).

что в пределе очень сильной связи при $2\pi T \gg \Omega_i$ сразу даёт естественное обобщение (100):

$$T_c > \frac{1}{2\pi} \sqrt{\lambda \langle \Omega^2 \rangle}, \quad (102)$$

где $\lambda = \sum_i \lambda_i$, $\langle \Omega^2 \rangle$ определено в (82).

Если решить систему уравнений 2×2 и соответствующее квадратное уравнение для T_c , получающееся из (77), (78) при $n = 0; \pm 1$, то константа 0,16 в (100) переходит в 0,18. Решение системы размерностью $n \leq 63$, выполненное в работе [45], приводит к замене 0,18 величиной 0,182, что практически даёт численно точное решение. Очевидно, что даже простейшего решения (99) вполне достаточно для качественных оценок T_c в пределе очень сильной связи. Общая ситуация иллюстрируется на рис. 6, из которого, в частности, видно, что асимптотика $\lambda \gg 1$ для T_c (100) с коэффициентом 0,18 очень неплохо аппроксимирует значения критической температуры при величинах λ начиная уже с $\lambda > 1,5-2,0$ (см. кривую 2).

Рассмотрим теперь предел сильной связи в сильном антиадиабатическом пределе, хотя реализация такой связи в этом пределе достаточно сомнительна, поскольку спаривательная константа λ , определённая согласно (17), как правило, быстро убывает с возрастанием фононной частоты при превышении этой частотой энергии Ферми [24, 26].

Рассмотрим снова электронную зону с конечной шириной $2D$ (постоянная плотность состояний). В этом случае в рассмотренных выше общих уравнениях Элиашберга вместо интеграла в бесконечных пределах (70) имеем

$$\begin{aligned} & \int_{-D}^D d\xi \frac{1}{\omega_{n'}^2 + \xi^2 + \Delta^2(\omega_{n'})} = \\ & = \frac{2}{\sqrt{\omega_{n'}^2 + \Delta^2(\omega_{n'})}} \arctan \frac{D}{\sqrt{\omega_{n'}^2 + \Delta^2(\omega_{n'})}} \rightarrow \\ & \rightarrow \frac{2}{|\omega_{n'}|} \arctan \frac{D}{|\omega_{n'}|} \text{ при } \Delta(\omega_{n'}) \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (103)$$

Тогда линеаризованные уравнения Элиашберга приобретают следующий общий вид:

$$\begin{aligned} \Delta(\omega_n)Z(\omega_n) &= \\ &= T \sum_{n'} \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) D(\omega_n - \omega_{n'}; \omega) \times \\ &\times \frac{2\Delta(\omega_{n'})}{|\omega_{n'}|} \arctan \frac{D}{|\omega_{n'}|}, \end{aligned} \quad (104)$$

где

$$\begin{aligned} Z(\omega_n) &= 1 + \frac{T}{\omega_n} \sum_{n'} \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) \times \\ &\times D(\omega_n - \omega_{n'}; \omega) \frac{\omega_{n'}}{|\omega_{n'}|} \arctan \frac{D}{|\omega_{n'}|}. \end{aligned} \quad (105)$$

Отсюда, как и выше, сразу следует уравнение для $\Delta(0)$:

$$\begin{aligned} \Delta(0) &= T \sum_{n' \neq 0} \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) \frac{2\omega}{(\pi T - \omega_{n'})^2 + \omega^2} \times \\ &\times \frac{2\Delta(\omega_{n'})}{|\omega_{n'}|} \arctan \frac{D}{|\omega_{n'}|}. \end{aligned} \quad (106)$$

Оставляя в правой части снова только вклад от $n' = -1$, немедленно получаем неравенство

$$1 > \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) \frac{2\omega}{(2\pi T)^2 + \omega^2} \arctan \frac{D}{\pi T}. \quad (107)$$

В эйнштейновской модели фононного спектра имеем $F(\omega) = \delta(\omega - \Omega_0)$, так что (107) сводится к

$$1 > \frac{2}{\pi} \lambda \arctan \frac{D}{\pi T} \frac{\Omega_0^2}{(2\pi T)^2 + \Omega_0^2}. \quad (108)$$

При $D \gg \pi T$ отсюда немедленно следует результат Аллена – Дайнса:

$$T_c > \frac{1}{2\pi} \sqrt{\lambda - 1} \Omega_0 \rightarrow 0,16\sqrt{\lambda} \Omega_0 \text{ при } \lambda \gg 1. \quad (109)$$

При $D \ll \pi T$ из (108) получим

$$T > \frac{1}{2\pi} \sqrt{\lambda^*(T) - 1} \Omega_0, \quad (110)$$

где

$$\lambda^*(T) = \frac{2D}{\pi^2 T} \lambda, \quad (111)$$

так что в сильном антиадиабатическом пределе

$$T_c > (2\pi^4)^{-1/3} (\lambda D \Omega_0^2)^{1/3} \approx 0,17(\lambda D \Omega_0^2)^{1/3}. \quad (112)$$

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

$$T_c < \frac{2}{\pi^2} \lambda D \approx 0,202\lambda D, \quad (113)$$

ограничивающее T_c сверху.

Таким образом, должно выполняться неравенство

$$(2\pi^4)^{-1/3} (\lambda D \Omega_0^2)^{1/3} < T_c < \frac{2}{\pi^2} \lambda D, \quad (114)$$

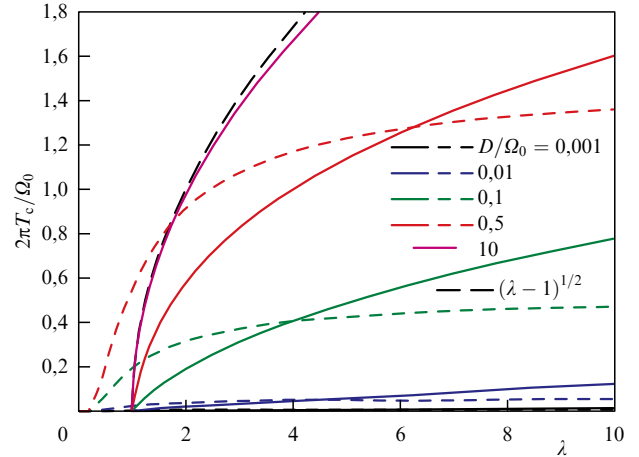


Рис. 7. (В цвете онлайн.) Температура сверхпроводящего перехода (нижняя граница) в эйнштейновской модели фононного спектра в единицах $2\pi T_c/\Omega_0$ как функция спаривательной константы λ для разных значений обратного параметра адиабатичности D/Ω_0 . Штриховыми кривыми показаны соответствующие зависимости для $2\pi T_c/\Omega_0$ в области слабой и промежуточной связи (84). Чёрная штриховая кривая — оценка Аллена – Дайнса (99), справедливая в адиабатическом пределе [45].

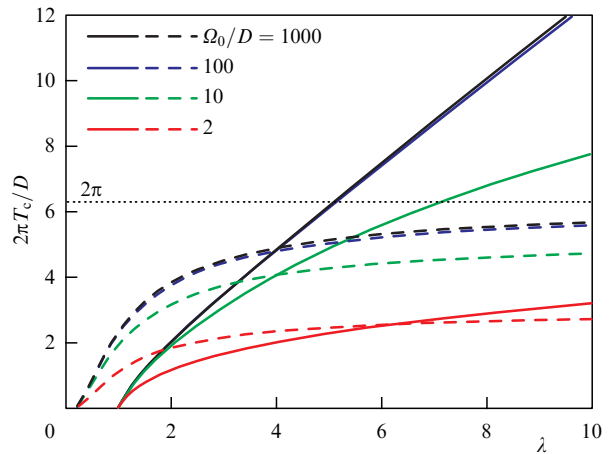


Рис. 8. (В цвете онлайн.) Температура сверхпроводящего перехода (нижняя граница) в эйнштейновской модели фононного спектра в единицах $2\pi T_c/D$ как функция спаривательной константы λ для разных значений параметра адиабатичности Ω_0/D . Штриховыми кривыми показаны соответствующие зависимости для $2\pi T_c/D$ в области слабой и промежуточной связи (84).

которое сводится к требованию

$$\Omega_0 < \frac{4}{\pi} \lambda D \approx 1,27\lambda D \text{ или } \frac{D}{\Omega_0} > \frac{0,78}{\lambda}, \quad (115)$$

так что для самосогласованности нашего рассмотрения требуется выполнение условия

$$\lambda \gg \frac{\Omega_0}{D} \gg 1, \quad (116)$$

где последнее неравенство соответствует пределу сильной антиадиабатики. Соответственно все приведённые выше оценки заведомо несправедливы при $\lambda \sim 1$ — они могут описывать только предел очень сильной связи.

На рисунках 7 и 8 приведены результаты численных расчётов границ T_c , следующих из решения (108), в

сравнении со значениями T_c в области слабой и промежуточной связи (84) для разных значений параметра адиабатичности Ω_0/D . Ясно, что в окрестности пересечения штриховых и сплошных кривых на рис. 7 и 8 происходит плавный кроссовер от поведения T_c в области слабой и промежуточной связи к её асимптотике в области очень сильной связи, $\lambda \gg 1$. Из рисунка 8 видно, что граница (113) практически достигается в области достаточно больших значений λ и Ω_0/D . Из рисунков 7, 8 также видно, что повышение частоты фононов и переход к антиадиабатическому пределу не ведут, вообще говоря, к повышению T_c по сравнению с таковой в адиабатическом случае.

7. Максимальная температура сверхпроводящего перехода?

Вопрос о максимально достижимой температуре сверхпроводящего перехода возник сразу же после создания теории БКШ. Он исследовался во множестве работ, результаты которых достаточно противоречивы. Среди этих работ значительную известность приобрела работа Коэна и Андерсона [47], в которой приведены довольно изящные аргументы, казалось бы, достаточно убедительно показавшие, что характерный масштаб достижимых значений T_c за счёт электрон-фононного и других подобных механизмов, основанных на обмене бозеподобными возбуждениями в металлах, составляет десятков-другой градусов Кельвина. Эта работа сразу же была подвергнута серьёзной критике в работах [34, 48], где утверждалось, что таких ограничений в действительности нет. Более того, из проведённого там анализа непосредственно следовало, что работа [47], попросту говоря, ошибочна.

Однако точка зрения Коэна–Андерсона приобрела популярность в физическом сообществе (сам Андерсон до конца жизни придерживался точки зрения, высказанной в [47]), в связи с чем к моменту открытия высокотемпературной сверхпроводимости в купратах (1986–1987 гг.) почти всеобщее убеждение сводилось к тому, что за счёт "обычного" электрон-фононного механизма нельзя достигнуть T_c выше 30–40 К. Именно поэтому после открытия сверхпроводимости в купратах началась настоящая "гонка" новых теоретических моделей и механизмов сверхпроводимости, которые могли бы объяснить высокие значения T_c в купратах. Вопросы сверхпроводимости в купратах выходят за рамки настоящей статьи. В этих соединениях, скорее всего, действительно доминирует нефононный механизм спаривания (антиферромагнитные флуктуации). Но важнейшим результатом открытия рекордно высоких значений T_c в гидридах под высоким давлением является, с нашей точки зрения, окончательное (причём экспериментальное!) опровержение точки зрения, высказанной в работе [47].

Таким образом, вопрос о максимальном значении T_c , которое может быть достигнуто за счёт электрон-фононного механизма куперовского спаривания, стоит как никогда остро. Ниже мы ещё раз попытаемся обсудить его в рамках стандартного подхода, основанного на уравнениях Элиашберга, как наиболее успешной теории, описывающей сверхпроводимость в системе электронов и фононов в металлах.

Существует обширная литература по численному решению уравнений Элиашберга для разных температур и

различных моделей фононного спектра [14, 16]. На основании этих расчётов разными авторами был предложен ряд аналитических формул для T_c , аппроксимирующих результаты численных расчётов. В качестве примера приведём популярную интерполяционную формулу Аллена–Дайнса для T_c [14], пригодную для широкого интервала значений безразмерной константы электрон-фононного спаривательного взаимодействия λ , в том числе для случая достаточно сильной связи, $\lambda > 1$:

$$T_c = \frac{f_1 f_2}{1,20} \langle \Omega_{\ln} \rangle \exp \left[-\frac{1,04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^*(1 + 0,62\lambda)} \right], \quad (117)$$

где

$$f_1 = \left[1 + \left(\frac{\lambda}{A_1} \right)^{3/2} \right]^{1/3}, \quad f_2 = 1 + \frac{[\langle \Omega^2 \rangle^{1/2} / \langle \Omega_{\ln} \rangle - 1] \lambda^2}{\lambda^2 + A_2^2},$$

$$A_1 = 2,46(1 + 3,8\mu^*), \quad A_2 = 1,82(1 + 6,3\mu^*) \frac{\langle \Omega^2 \rangle^{1/2}}{\langle \Omega_{\ln} \rangle}. \quad (118)$$

Здесь $\langle \Omega_{\ln} \rangle$ — среднелогарифмическая частота фононов:

$$\ln \langle \Omega_{\ln} \rangle = \frac{2}{\lambda} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2(\omega) F(\omega) \ln \omega =$$

$$= \frac{\int_0^\infty (1/\omega) d\omega \ln \omega \alpha^2(\omega) F(\omega)}{\int_0^\infty (1/\omega) d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega)}, \quad (119)$$

$\langle \Omega^2 \rangle$ — средний (по фононному спектру) квадрат их частоты, определённый в (79):

$$\langle \Omega^2 \rangle = \frac{2}{\lambda} \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) \omega = \frac{\int_0^\infty d\omega \omega \alpha^2(\omega) F(\omega)}{\int_0^\infty (1/\omega) d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega)}. \quad (120)$$

Кулоновский псевдопотенциал μ^* определяет отталкивание электронов в куперовской паре. Согласно большинству расчётов [14, 16] его значения малы (лежат в интервале 0,1–0,15).

В пределе очень сильной связи, $\lambda > 10$, отсюда следует выражение для T_c , фактически полученное выше из простого неравенства (99):

$$T_c \approx 0,18 \sqrt{\lambda \langle \Omega^2 \rangle}. \quad (121)$$

Отсюда, казалось бы, сразу следует, что ограничения на величину T_c просто отсутствуют, так что в принципе весьма высокие значения T_c можно получить и для электрон-фононного механизма спаривания в пределе очень сильной связи. Единственный предел, который остаётся более или менее очевидным, связан с областью применимости адиабатического приближения, обычно считающегося основой теории Элиашберга. Однако выше мы видели, что похожие результаты можно получить и в сильном антиадиабатическом пределе (см. оценки для T_c , приведённые в (112), (113)).

В модели с эйнштейновским спектром фононов имеем просто $\langle \Omega_{\ln} \rangle = \langle \Omega^2 \rangle^{1/2} = \Omega$, где под Ω следует понимать перенормированную частоту фононов. Тогда (121) сводится к

$$T_c = 0,18 \sqrt{\lambda} \Omega, \quad (122)$$

так что, казалось бы, при $\lambda \gg 1$ в принципе можно получить даже $T_c > \Omega$. Однако если теперь вспомнить про перенормировку фононного спектра, то с учётом (50) из (122) немедленно получаем

$$T_c = 0,18\sqrt{\lambda}\Omega = 0,18\Omega_0\sqrt{\frac{\lambda}{1+2\lambda}}, \quad (123)$$

что при $\lambda \gg 1$ стремится к значению $T_c^{\max} \approx 0,13\Omega_0$ из-за существенного смягчения фононного спектра. В то же время, как отмечалось выше, физический смысл "затравочной" частоты Ω_0 в металле достаточно плохо определён, в частности, она не может быть найдена из эксперимента. Соответственно оценка (123) несколько повисает в воздухе.

Но проведённое рассмотрение верно лишь при условии жёсткой фиксации всех соотношений между "затравочным" и "одетым" спектрами фононов. Если "забыть" про "затравочный" спектр фононов и считать параметры Ω и λ независимыми, то, пользуясь (122), легко получить очень высокие значения T_c . Некоторая, впрочем достаточно искусственная, модель, приводящая именно к такой ситуации, была предложена в недавней работе [49]. Рассматривалось взаимодействие N -компонентных электронов с $N \times N$ -компонентной системой эйнштейновских фононов в пределе $N \rightarrow \infty$. Было показано, что в такой модели перенормировка фононного спектра за счёт взаимодействия с электронами подавляется, поэтому в пределе очень сильной связи, $1 \ll \lambda \ll N$, всегда сохраняется оценка типа Аллена – Дайнса (122) с $\Omega = \Omega_0$.

Однако вся проблема в том, что в реальной ситуации мы никогда не можем считать Ω и λ независимыми параметрами просто исходя из общих соотношений (13) и (79), выражающих λ и $\langle \Omega^2 \rangle$ через интегралы от функции Элиашберга – Макмиллана $\alpha^2(\omega)F(\omega)$. Фактически мы можем представить выражения для T_c в области очень сильной связи в виде

$$T_c = 0,18\sqrt{\lambda\langle \Omega^2 \rangle} = 0,25\left(\int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega)\omega\right)^{1/2} \quad (124)$$

в адиабатическом случае и соответственно в виде

$$\begin{aligned} T_c &= (2\pi^4)^{-1/3}(\lambda D \langle \Omega^2 \rangle)^{1/3} = \\ &= (2\pi)^{-1/3}\left(2D \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega)\right)^{1/3} \end{aligned} \quad (125)$$

в антиадиабатическом пределе. Видно, что эти выражения для T_c полностью определяются интегралами от функции $\alpha^2(\omega)F(\omega)$.

В известной работе [50] предложено простое неравенство для T_c , ограничивающее её величину площадью A под зависимостью $\alpha^2(\omega)F(\omega)$:

$$T_c \leq 0,2309 \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega)F(\omega) \equiv 0,2309A. \quad (126)$$

В случае эйнштейновского спектра фононов с учётом (28) это неравенство переписывается как

$$T_c \leq 0,115\lambda\Omega_0. \quad (127)$$

Последнее неравенство достаточно часто используется в расчётах.

Полученное в антиадиабатическом пределе ограничение (113), по сути, вполне аналогично (127) с заменой $\Omega_0 \rightarrow 2D$, вполне естественной в антиадиабатике.

Связь λ и $\langle \Omega^2 \rangle$ ярко проявляется в формуле Макмиллана (61) для λ . Если воспользоваться этим выражением в (121), то немедленно получим

$$T_c = 0,18\sqrt{\frac{N(0)\langle I^2 \rangle}{M}}, \quad (128)$$

где

$$\begin{aligned} \langle I^2 \rangle &= \frac{1}{[N(0)]^2} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} |I(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}) = \\ &= \frac{1}{[N(0)]^2} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} |\langle \mathbf{p} | \nabla V_{ei}(\mathbf{r}) | \mathbf{p}' \rangle|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'}) = \\ &= \langle |\langle \mathbf{p} | \nabla V_{ei}(\mathbf{r}) | \mathbf{p}' \rangle|^2 \rangle_{\text{FS}}, \end{aligned} \quad (129)$$

так что и λ , и $\langle \Omega^2 \rangle$ вообще выпадают из формулы для T_c , которая выражается теперь просто через усреднённый по поверхности Ферми матричный элемент градиента электрон-ионного потенциала, массу иона и плотность электронных состояний на уровне Ферми. Выражение (128) удобно в случае первопринципных вычислений, где оно часто используется, но в нём исчезли наглядные физические параметры, в терминах которых обычно трактуется T_c .

В работе [51] предложено новое полуэмпирическое ограничение на величину T_c в традиционных (электрон-фононных) сверхпроводниках, которое записывается в очень простом виде:

$$k_B T_c \leq A_{\max} \Theta_D = A_{\max} \hbar \Omega_D, \quad (130)$$

где $A_{\max} \approx 0,10$, $\Theta_D = \hbar \Omega_D$ — температура Дебая, которую можно определить, например, из стандартных измерений теплоёмкости. Неравенство (130) неплохо коррелирует с T_c^{\max} , полученной выше в пределе $\lambda \rightarrow \infty$ из (123), если отождествить Ω_0 и Ω_D . Как видно из рис. 9, это удовлетворяется для большинства обычных сверхпроводников [51], однако, как мы увидим в разделе 8, скорее всего, несправедливо для супергидридов.

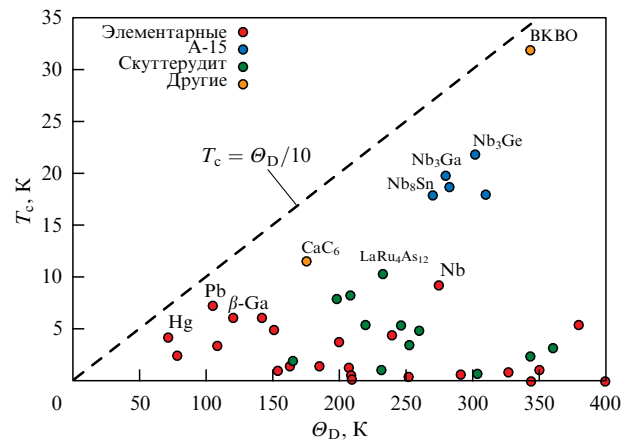


Рис. 9. (В цвете онлайн.) Экспериментальные значения температуры сверхпроводящего перехода для обычных сверхпроводников в зависимости от их температуры Дебая Θ_D [51].

8. Супергидриды и теория Элиашберга

В этом разделе мы кратко рассмотрим некоторые результаты применения теории Элиашберга к расчётам T_c в гидридах под высоким давлением. Изложение будет предельно кратким, гораздо больше деталей можно найти, например, в обзорах [4–6] и оригинальных работах, часть из которых цитируется ниже.

Уравнения Элиашберга широко применялись для расчётов T_c в гидридах. В сущности кристаллическая структура H_3S при высоких давлениях и высокие значения $T_c \sim 200$ К были *предсказаны* в работе [52]. При этом для структуры $Im-3m$ при давлении 200 ГПа получены значения спаривательной константы $\lambda \approx 2,2$ и средне-логарифмической частоты фононов $\Omega_{ln} \approx 1335$ К, что при расчётах T_c по формуле Аллена–Дайнса (117) со значениями кулоновского потенциала $\mu^* = 0,1-0,13$ дало величину $T_c = 191-204$ К. Эти результаты оказались в очень неплохом согласии с данными эксперимента [1].

Достижение комнатных значений T_c в системе $S-S-H$ [12] было разумным образом объяснено в недавней работе [53], где показано, что дырочное легирование $Im-3m$ -структуры H_3S введением углерода сдвигает уровень Ферми к максимуму ван-хововской особенности в плотности состояний и приводит к некоторому смягчению фононного спектра. Всё вместе это ведёт к возрастанию λ до величины 2,4, в принципе, достаточно для объяснения значений $T_c \approx 288$ К.

В таблице мы приводим рассчитанные параметры нескольких гидридов редкоземельных элементов из работы [6], для которых были предсказаны рекордные значения T_c . В двух последних колонках таблицы приведены граничные значения T_c , рассчитанные из неравенства (99) и по асимптотической формуле Аллена–Дайнса (122) при простейшем предположении $\langle \Omega_{ln} \rangle = \langle \Omega^2 \rangle^{1/2} = \Omega$. Как видно, эти значения достаточно близки к полученным из более детальных расчётов [6], и они определяют соответственно нижнюю и верхнюю границы T_c . Последнее ясно указывает на то, что системы с предельно высокими значениями T_c уже находятся практически в области очень сильной связи теории Элиашберга.

В недавней работе [54] были проведены обширные расчёты T_c практически для всех мыслимых бинарных соединений водорода с другими элементами периодической системы для значений внешнего давления 100, 200 и 300 ГПа (при которых определялись устойчивые кристаллические структуры этих соединений). Было найдено 36 новых систем, в которых T_c может превышать 100 К, причём в 18 случаях T_c превышала 200 К. В частности, в системе NaN_6 получены $T_c = 248-279$ К, а в CaH_6 — $T_c = 216-253$ К уже для давлений в 100 ГПа. Из результатов работы [54] ясно видно, что наивысших значений T_c достигает в области очень сильной связи, при

значениях λ вплоть до $\lambda = 5,81$ для NaN_6 (при давлении 100 ГПа).

Резюмируя, можно сказать, что рекордные величины T_c в супергидридах достигаются при типичных значениях $\lambda = 2-3,5$ (и даже более) и при характерных средних значениях фононных частот от 1000 до 2000 К. Отметим, что предел, определяемый выражением (130), в супергидридах действительно заметно превышен.

9. Заключение

Выше мы сознательно излагали все вопросы, связанные с выводом и использованием уравнений Элиашберга, на достаточно элементарном уровне, стараясь выделить используемые при этом приближения и упрощения.

Теория Элиашберга остаётся основной теорией, полностью объясняющей величину критической температуры сверхпроводников с электрон-фононным механизмом спаривания. Эта теория справедлива и в области сильной электрон-фононной связи, ограниченной лишь применимостью адиабатического приближения, основанного на теореме Мигдала, которая выполняется в подавляющем большинстве металлов, включая новые супергидриды с рекордными значениями T_c . Значения спаривательной (перенормированной, физической) константы связи λ вполне могут существенно превышать единицу, до тех пор пока система обладает металлическим основным состоянием. Это не так в окрестности фазового перехода к новому основному состоянию типа волны зарядовой плотности или бозе-конденсата биполонов.

Более того, теория Элиашберга оказывается качественно применимой и в сильном антиадиабатическом пределе. Можно построить достаточно простые интерполяционные формулы для T_c , связывающие области адиабатичности и антиадиабатичности. Сильный антиадиабатический предел может быть актуальным для достаточно экзотических систем с очень узкими электронными зонами и(или) anomalно малыми значениями энергии Ферми (типа моносолей $FeSe$, $SrTiO_3$ и, возможно, некоторых гидридов).

К сожалению, теория не даёт качественно простого выражения для предельно достижимых значений T_c в терминах экспериментально определяемых (или рассчитываемых) параметров системы, типа характерных (средних) значений фононных частот и величины спаривательной константы взаимодействия. Формально такой предел вообще отсутствует, если рассматривать эти параметры как независимые. С учётом их взаимосвязи максимальные значения T_c фактически определяются "игрой" атомных констант. Тем не менее все новые данные по супергидридам однозначно указывают: эти системы весьма близки к области очень сильной связи теории Элиашберга, а последнее означает, что макси-

Таблица. Расчётные значения T_c для соединений $La-N$ и $Y-N$, полученные из численного решения уравнений Элиашберга [6], в сравнении с её граничными значениями

| Соединение | Давление, ГПа | λ | Ω_{ln} , К | T_c ($\mu^* = 0,1$), К | T_c ($\mu^* = 0,13$), К | $\frac{1}{2\pi} \sqrt{\lambda - 1} \Omega$ | $0,18 \sqrt{\lambda} \Omega$ |
|------------|---------------|-----------|-------------------|----------------------------|-----------------------------|--|------------------------------|
| LaH_{10} | 210 | 3,41 | 848 | 286 | 274 | 209 | 282 |
| LaH_{10} | 250 | 2,29 | 1253 | 274 | 257 | 226 | 341 |
| LaH_{10} | 300 | 1,78 | 1488 | 254 | 241 | 209 | 357 |
| YH_{10} | 250 | 2,58 | 1282 | 326 | 305 | 256 | 370 |
| YH_{10} | 300 | 2,06 | 1511 | 308 | 286 | 247 | 390 |

мальные значения T_c для "обычных" металлов уже практически достигнуты. Остаётся, правда, ещё надежда на металлический водород [55].

Работа выполнена при частичной поддержке грантом Российского фонда фундаментальных исследований № 20-02-00011.

Список литературы

1. Drozdov A P et al. *Nature* **525** 73 (2015)
2. Еремец М И, Дроздов А П *УФН* **186** 1257 (2016); Eremets M I, Drozdov A P *Phys. Usp.* **59** 1154 (2016)
3. Pickard C J, Errea I, Eremets M I *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **11** 57 (2020)
4. Flores-Livas J A et al. *Phys. Rep.* **856** 1 (2020)
5. Gor'kov L P, Kresin V Z *Rev. Mod. Phys.* **90** 011001 (2018)
6. Liu H et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **114** 6990 (2017)
7. Drozdov A P et al. *Nature* **569** 528 (2019)
8. Somayazulu M et al. *Phys. Rev. Lett.* **122** 027001 (2019)
9. Troyan I A et al. *Adv. Mater.* **33** 2006832 (2021)
10. Semenok D V et al. *Mater. Today* **48** 18 (2021)
11. Snider E et al. *Phys. Rev. Lett.* **126** 117003 (2021)
12. Snider E et al. *Nature* **586** 373 (2020)
13. Scalapino D J, in *Superconductivity* (Ed. R D Parks) (New York: M. Dekker, 1969) p. 449
14. Allen P B, Mitrović B, in *Solid State Physics* Vol. 37 (Eds H Ehrenreich, F Seitz, D Turnbull) (New York: Academic Press, 1983) p. 1
15. Kresin V Z, Morawitz H, Wolf S A *Superconducting State. Mechanisms and Properties* (Intern. Ser. of Monographs on Physics, Vol. 161) (Oxford: Oxford Univ. Press, 2014)
16. Вонсовский С В, Изюмов Ю А, Курмаев Э З *Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений* (М.: Наука, 1977); Пер. на англ. яз.: Vonsovsky S V, Izyumov Yu A, Kurmaev E Z *Superconductivity of Transition Metals: Their Alloys and Compounds* (Berlin: Springer-Verlag, 1982)
17. Мигдал А Б *ЖЭТФ* **34** 1438 (1958); Migdal A B *Sov. Phys. JETP* **7** 996 (1958)
18. Абрикосов А А, Горьков Л П, Дзялошинский И Е *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М.: Физматгиз, 1962); Пер. на англ. яз.: Abrikosov A A, Gorkov L P, Dzyaloshinski I E *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1963); Абрикосов А А, Горьков Л П, Дзялошинский И Е *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М.: Добросвет, 1998)
19. Schrieffer J R *Theory of Superconductivity* (New York: W.A. Benjamin, 1964); Пер. на русск. яз.: Шриффер Д Р *Теория сверхпроводимости* (М.: Физматлит, 1968)
20. Садовский М В *Диagramматика: лекции по избранным задачам теории конденсированного состояния* 3-е изд. (М.–Ижевск: Ин-т компьютер. исслед., 2019); Пер. на англ. яз.: Sadovskii M V *Diagrammatics: Lectures on Selected Problems in Condensed Matter Theory* 2nd ed. (Singapore: World Scientific, 2019) <https://doi.org/10.1142/11605>
21. Esterlis I et al. *Phys. Rev. B* **97** 140501 (2018)
22. Esterlis I, Kivelson S A, Scalapino D J *Phys. Rev. B* **99** 174516 (2019)
23. Chubukov A V et al. *Ann. Physics* **417** 168190 (2020)
24. Садовский М В *ЖЭТФ* **155** 527 (2019); Sadovskii M V *J. Exp. Theor. Phys.* **128** 455 (2019)
25. Садовский М В *Письма в ЖЭТФ* **109** 165 (2019); Sadovskii M V *JETP Lett.* **109** 166 (2019)
26. Sadovskii M V *J. Supercond. Novel Magn.* **33** 19 (2020)
27. Ikeda M A, Ogasawara A, Sugihara M *Phys. Lett. A* **170** 319 (1992)
28. Садовский М В *УФН* **186** 1035 (2016); Sadovskii M V *Phys. Usp.* **59** 947 (2016)
29. Gor'kov L P *Phys. Rev. B* **93** 054517 (2016)
30. Gor'kov L P *Phys. Rev. B* **93** 060507 (2016)
31. Gor'kov L P *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **113** 4646 (2016)
32. Choi Y W, Choi H J *Phys. Rev. Lett.* **127** 167001 (2021)
33. Fröhlich H *Proc. R. Soc. Lond. A* **215** 291 (1952)
34. Гинзбург В Л, Киржниц Д А (Ред.) *Проблема высокотемпературной сверхпроводимости* (М.: Наука, 1977) Гл. 3; Пер. на англ. яз.: Ginzburg V L, Kirzhnits D A (Eds) *High-Temperature Superconductivity* (New York: Consultants Bureau, 1982) Ch. 3
35. Vollhardt D, in *Correlated Electron Systems. Proc. of the 9th Jerusalem Winter School for Theoretical Physics* (Ed. V J Emery) (Singapore: World Scientific, 1993) p. 57
36. Pruschke Th, Jarrell M, Freericks J K *Adv. Phys.* **44** 187 (1995)
37. Georges A et al. *Rev. Mod. Phys.* **68** 13 (1996)
38. Vollhardt D *AIP Conf. Proc.* **1297** 339 (2010)
39. Bauer J, Han J E, Gunnarsson O *Phys. Rev. B* **84** 184531 (2011)
40. Meyer D, Hewson A C, Bulla R *Phys. Rev. Lett.* **89** 196401 (2002)
41. Schrodi F, Aperis A, Oppeneer P M *Phys. Rev. B* **103** 064511 (2021)
42. Бровман Е Г, Каган Ю М *УФН* **112** 369 (1974); Brovman E G, Kagan Yu M *Sov. Phys. Usp.* **17** 125 (1974)
43. Гейликман Б Т *УФН* **115** 403 (1975); Geilikman B T *Sov. Phys. Usp.* **18** 190 (1975)
44. Максимов Е Г, Каракозов А Е *УФН* **178** 561 (2008); Maksimov E G, Karakozov A E *Phys. Usp.* **51** 535 (2008)
45. Allen P B, Dynes R C *Phys. Rev.* **12** 905 (1975)
46. Kresin V Z, Gutfreund H, Little W A *Solid State Commun.* **51** 339 (1984)
47. Cohen M L, Anderson P W *AIP Conf. Proc.* **4** 17 (1972)
48. Dolgov O V, Kirzhnits D A, Maksimov E G *Rev. Mod. Phys.* **53** 81 (1981)
49. Hoffmann J S et al., arXiv:2105.09322
50. Leavens C R *Solid State Commun.* **17** 1499 (1975)
51. Esterlis I, Kivelson S A, Scalapino D J *npj Quantum Mater.* **3** 59 (2018)
52. Duan D et al. *Sci. Rep.* **4** 6968 (2014)
53. Ge Y et al. *Mater. Today Phys.* **15** 100330 (2020)
54. Shipley A M et al. *Phys. Rev. B* **104** 054501 (2021)
55. Максимов Е Г *УФН* **178** 175 (2008); Maksimov E G *Phys. Usp.* **51** 167 (2008)

Limits of Eliashberg theory and bounds for superconducting transition temperature

M.V. Sadovskii

Institute of Electrophysics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. Amundsena 106, 620016 Ekaterinburg, Russian Federation
E-mail: sadovskii@iep.uran.ru

The discovery of record-breaking values of superconducting transition temperature T_c in quite a number of hydrides under high pressure was an impressive demonstration of capabilities of electron–phonon mechanism of Cooper pairing. This lead to an increased interest to foundations and limitations of Eliashberg–McMillan theory as the main theory describing superconductivity in a system of electrons and phonons. Below we shall consider both elementary basics of this theory and a number of new results derived only recently. We shall discuss limitations on the value of the coupling constant related to lattice instability and a phase transition to another phase (CDW, bipolarons). Within the stable metallic phase the effective pairing constant may acquire arbitrary values. We consider extensions beyond the traditional adiabatic approximation. It is shown that Eliashberg–McMillan theory is also applicable in the strong antiadiabatic limit. The limit of very strong coupling, being most relevant for the physics of hydrides, is analyzed in details. We also discuss the bounds for T_c appearing in this limit.

Keywords: Eliashberg equations, superconducting transition temperature, strong coupling, adiabatic and antiadiabatic approximation, superhydrides

PACS numbers: 71.10.Fd, **74.20.−z**, 74.20.Mn

Bibliography — 55 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **192** (7) 773–789 (2022)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2021.05.039007>

Received 12 May 2021

Physics – Uspekhi **65** (7) (2022)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2021.05.039007>