

Критическая температура металлического водорода при давлении 500 ГПа

Н. А. Кудряшов, А. А. Кутуков, Е. А. Мазур¹⁾

Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 12 августа 2016 г.

Теория Элиашберга, обобщенная для электрон-фононных (ЭФ) систем с непостоянной плотностью электронных состояний, а также с учетом частотного поведения перенормировки массы электрона и химического потенциала, используется для изучения T_c в фазе I41/AMD металлического водорода под давлением. Рассматривается фононный вклад в аномальную электронную функцию Грина (ФГ). Учитывается спаривание в пределах полной ширины электронной зоны, а не только в узком слое у поверхности Ферми. Частотная и температурная зависимости комплексной перенормировки массы $\text{Re}Z(\omega)$, плотность состояний $N(\varepsilon)$, перенормированная за счет ЭФ взаимодействия, спектральная функция электрон-фононного взаимодействия, полученные расчетным путем, используются для расчета электронной аномальной ФГ. Получена зависимость реальной и мнимой части параметра порядка в фазе I41/AMD от частоты. В результате решения системы уравнений Элиашберга определено значение $T_c = 217$ К в фазе I41/AMD водорода при давлении $P = 500$ ГПа.

DOI: 10.7868/S0370274X16190048

1. Теория сверхпроводимости для электронной зоны с не постоянной плотностью электронных состояний. В теоретической работе [1] по исследованию свойств металлического водорода предсказана высокая критическая температура сверхпроводимости $T_c \sim 200\text{--}400$ К. В соответствии с классическими расчетами Е.Г. Бровмана и Ю.М. Кагана [2–5] атомарная фаза водорода может быть метастабильной при понижении давления до атмосферного. Как показано в работах [2–5], в широком диапазоне давлений при $T = 0$ существуют динамически стабильные анизотропные фазы металлического водорода. В интересующей нас области давлений $P \sim 500$ ГПа оказались выделенными вытянутые простые гексагональная и ромбоэдрическая структуры с одним атомом в элементарной ячейке. Используя современный DFT метод, в [6] продемонстрировано существование динамически стабильной интересной фазы с решеткой белого олова (два атома в примитивной ячейке). Достижение сверхпроводящего состояния в атомарном металлическом водороде или в водородосодержащих соединениях было бы важным как для понимания механизма высокотемпературной сверхпроводимости, так и, возможно, открыло бы пути достижения комнатной сверхпроводимости. Однако, для превращения молекулярно-водорода в металлический требуются гигантские

давления порядка 400–500 ГПа, что лежит выше достижимых в настоящее время величин в технике высоких давлений. Проведение *ab-initio* расчетов для предсказания области давлений, в которой возможен синтез металлической фазы водорода, исследование его устойчивости и сверхпроводящих свойств в условиях высоких давлений является актуальной задачей. В этом направлении имеется значительное число работ [7–13]. В данной работе рассмотрены сверхпроводящие свойства металлической фазы водорода симметрии белого олова при давлении, равном 500 ГПа, имеющей свойства металличности, фононный спектр которой не содержит мнимых частот при указанном давлении.

Решение уравнений Элиашберга на действительной оси считается трудной задачей. Поэтому T_c с помощью уравнений Элиашберга обычно определяется в представлении функций Грина в виде набора дискретных точек на мнимой оси также без учета переменного характера плотности электронных состояний. Аналитическое продолжение такого решения с целью установления частотной зависимости параметра порядка является неточным. В [14] было показано, что в случае сильной электрон-фононной (ЭФ) связи реконструкция реальной части $\text{Re}\Sigma$ и мнимой части $\text{Im}\Sigma$ собственно-энергетической части (СЧ) в материалах с переменной плотностью электронных состояний не ограничена областью частот ω порядка предельной фононной частоты ω_D , а рас-

¹⁾e-mail: eugen_mazur@mail.ru

пространяется на область гораздо большего диапазона частот $\omega \gg \omega_D$. В результате ЭФ взаимодействие модифицирует СЧ функции Грина, включая ее аномальную часть, на значительном энергетическом расстоянии от поверхности Ферми в единицах Дебаевских фоновых частот, а отнюдь не только в окрестности поверхности Ферми $\mu - \omega_D < \omega < \mu + \omega_D$. Учитывая все написанное выше, мы будем рассматривать ЭФ систему с гамильтонианом, который включает электронную компоненту \hat{H}_e , ионную компоненту \hat{H}_i и компоненту, отвечающую электрон-ионному взаимодействию в гармоническом приближении \hat{H}_{e-i} , так что $\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_i + \hat{H}_{e-i} - \mu\hat{N}$. Здесь введены следующие обозначения: μ – химический потенциал, \hat{N} – оператор числа электронов в системе. Матричная функция Грина электронов \hat{G} в представлении Намбу определяется выражением $\hat{G}(x, x') = -\langle T\Psi(x)\Psi^+(x') \rangle$, где обычные операторы рождения и уничтожения электронов фигурируют в качестве операторов Намбу. СЧ запаздывающей электронной ФГ в дискретном наборе частотных точек $\omega_m = (2m + 1)\pi T$, $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$ на мнимой оси может быть записано в виде $\hat{\Sigma}(i\omega_m) = i\omega_m[1 - Z(\mathbf{p}, \omega_m)]\hat{\tau}_0 + \chi(\mathbf{p}, \omega_m)\hat{\chi}_3$. Под $\chi(\xi, \omega)$ будет пониматься функция, обычно именуемая ренормализацией химического потенциала ЭФ взаимодействием. Значение величины $\chi(\mathbf{p}, \omega_m)$, реальная часть которой после аналитического продолжения определяет частотно-зависящий сдвиг химического потенциала, дается следующей формулой: $\chi(\mathbf{p}, \omega_m) = \frac{1}{2}[\Sigma(\mathbf{p}, \omega_m) + \Sigma(\mathbf{p}, -\omega_m)]$. Значение величины $Z(\mathbf{p}, \omega_m)$, реальная часть которой после аналитического продолжения задает перенормировку массы электрона, а мнимая часть – затухание электрона, определяется формулой $i\omega_m[1 - Z(\mathbf{p}, \omega_m)] = \frac{1}{2}[\Sigma(\mathbf{p}, \omega_m) - \Sigma(\mathbf{p}, -\omega_m)]$. После аналитического продолжения величин $Z(\mathbf{p}, i\omega_m)$ и $\chi(\mathbf{p}, \omega_m)$ на область комплексной переменной ω функции $\text{Re}Z(\mathbf{p}, \omega)$ и $\text{Re}\chi(\mathbf{p}, \omega)$ становятся четными и комплексными для всех значений частоты ω , включая значения частоты на реальной оси, за исключением дискретного набора точек на мнимой оси $\omega_m = (2m + 1)\pi T$. После выполнения аналитического продолжения $i\omega_p \rightarrow \omega + i\delta$ фоновый вклад в СЧ часть электронной ФГ \hat{g}_R выражается следующим образом:

$$\hat{\Sigma}^{ph}(\xi, \omega) = -\frac{1}{\pi} \times \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \int_{-\mu}^{+\infty} d\xi' \frac{N_0(\xi')}{N_0(0)} K^{ph}(z', \omega) \hat{\tau}_3 \text{Im} \hat{g}_R(\xi', z') \hat{\tau}_3. \quad (1)$$

Кулоновский вклад в собственно-энергетическую часть $\hat{\Sigma}(\xi, \omega)$ запаздывающей электронной функции \hat{g}_R имеет вид:

$$\hat{\Sigma}^c(\xi, \omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \text{th} \frac{z'}{2T} \times \int_{-\mu}^{+\infty} d\xi' \frac{N_0(\xi')}{N_0(0)} V_c(\xi, \xi') \hat{\tau}_3 \text{Im} \hat{g}_R(\xi', z') \hat{\tau}_3, \quad (2)$$

где $V_c(\xi, \xi')$ – матричный элемент кулоновского взаимодействия.

Будем использовать в дальнейшем технику решения уравнений Элиашберга для реальных частот. Такая техника позволит нам контролировать в процессе вычислений частотное поведение $\text{Re}Z(\omega)$, $\text{Im}Z(\omega)$, $\text{Re}\Sigma(\omega)$, $\text{Im}\Sigma(\omega)$, $\text{Re}\chi(\omega)$ и $\text{Im}\chi(\omega)$. В (1) введены матрицы Паули $\hat{\tau}_i$, \hat{g}_R – запаздывающая электронная ФГ, $\alpha^2 F$ – спектральная функция ЭФ взаимодействия, $N_0(\xi)$ представляет собой “голую” (не перенормированную ЭФ взаимодействием) переменную плотность электронных состояний, определяемую следующим выражением: $\int_{S(\xi)} \frac{d^2 \mathbf{p}'}{\nu_{\xi \mathbf{p}'}} d\xi = \int_{S(\xi)} N_0(\xi) d\xi$ при энергии “голых” электронов ξ , отсчитываемой от уровня Ферми с импульсом \mathbf{p} . Не предполагается, что импульсы электронов лежат на поверхности Ферми. Будем пренебрегать в (1) зависимостью $\alpha^2 F$ от переменных ξ, ξ' ; $\alpha^2(\xi', \xi, z) F(\xi', \xi, z) \approx \alpha^2(z) F(z)$. Будем заменять $Z(p', \omega)$ величиной $Z(\omega)$, соответствующей постоянной энергии ξ в направлении, определяемом углом φ . Усредним выражение (1) по углу φ направления импульса. При переходе от интегрирования $\int_{-\infty}^{+\infty} dz'$ к интегрированию $\int_0^{+\infty} dz'$ учтем четность $\text{Re}Z(z')$, а также свойство $\varphi(-z') = \varphi^*(-z')$ [15] параметра порядка. Из (1) с учетом стандартного выражения для запаздывающей ФГ $\hat{g}_R(\xi', z')$ получаем уравнения для реальной $\text{Re}\varphi(\omega)$ и мнимой $\text{Im}\varphi(\omega)$ части аномальной части СЧ ФГ $\varphi(\omega)$ в виде следующей системы двух уравнений (3), (4):

$$\text{Re}\varphi(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_0^{+\infty} dz' [K^{ph}(z', \omega) - K^{ph}(-z', \omega)] \times \int_{-\mu}^{+\infty} d\xi' \frac{N_0(\xi')}{N_0(0)} \text{Im} \frac{\varphi(z')}{[Z(z')z']^2 - \varphi^2(z') - (\xi' + \chi(z'))^2} - \frac{\mu^*}{\pi \left(1 - \mu^* \ln \frac{\omega_c}{\omega_D}\right)} \int_0^{\omega_c} dz' \text{th} \frac{z'}{2T} \times$$

$$\times \int_{-\mu}^{\infty} d\xi' \frac{N_0(\xi')}{N_0(0)} \operatorname{Im} \frac{\varphi(z')}{Z^2(z')z'^2 - \varphi^2(z') - (\xi' + \chi(z'))^2}. \quad (3)$$

В (3) первое слагаемое описывает роль электрон-фононного взаимодействия, а второе слагаемое описывает кулоновский вклад, имеющий стандартный вид [15], кулоновский псевдопотенциал электронов в водороде $\mu^* \approx 0.1$ выражается через усредненный кулоновский матричный элемент V_c стандартным образом $\mu^* = V_c N_0(0) / \left(1 + V_c N_0(0) \ln \frac{E_F}{\omega_D}\right)$, $\omega_D \ll \omega_c \ll \ll E_F$, ω_c – энергетический диапазон эффективности кулоновского взаимодействия.

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}\varphi(\omega) = & \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dz' \left\{ \alpha^2(|\omega - z'|) F(|\omega - z'|) \times \right. \\ & \times \left[\operatorname{cth} \frac{(\omega - z')}{2T} + \operatorname{th} \frac{z'}{2T} \right] \operatorname{sign}(\omega - z') - \\ & - \alpha^2(|\omega + z'|) F(|\omega + z'|) \left[\operatorname{cth} \frac{(\omega + z')}{2T} - \operatorname{th} \frac{z'}{2T} \right] \operatorname{sign}(\omega + z') \left. \right\} \times \\ & \times \int_{-\mu}^{+\infty} d\xi' \frac{N_0(\xi')}{N_0(0)} \operatorname{Im} \frac{\varphi(z')}{[Z(z')z']^2 - \varphi^2(z') - (\xi' + \chi(z'))^2}, \quad (4) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} K^{ph}(z', \omega) = & \int_0^{+\infty} dz \alpha^2(z) F(z) \times \\ & \times \frac{1}{2} \left\{ \frac{\operatorname{th} \frac{z'}{2T} + \operatorname{cth} \frac{z}{2T}}{z' + z - \omega} - \frac{\operatorname{th} \frac{z'}{2T} - \operatorname{cth} \frac{z}{2T}}{z' - z - \omega} \right\}. \quad (5) \end{aligned}$$

В (3), (4) мы ожидаем малый кулоновский вклад в параметр порядка с учетом малости кулоновского псевдопотенциала в водороде $\mu^* \approx 0.1$ по сравнению со значительной константой $\lambda \approx 1.68$ ЭФ взаимодействия в фазе I41/AMD водорода. Выражения и графики для (1, 1) компоненты нормальной части матрицы СЧ $\operatorname{Re}\Sigma(\omega) = \omega - \operatorname{Re}Z(\omega)\omega + \operatorname{Re}\chi(\omega)$, $\operatorname{Im}\Sigma(\omega) = -\operatorname{Im}Z(\omega)\omega + \operatorname{Im}\chi(\omega)$ вблизи T_c получим аналогично [16, 17]. Прямым вычислением мнимой части получаем выражение, фигурирующее в (3), (4). Вблизи T_c произведение $\operatorname{Re}\varphi(z')\operatorname{Im}\varphi(z')$ стремится к нулю при всех значениях аргумента z' . Пренебрегая зависимостью $\operatorname{Re}\Sigma(\xi, \omega)$ и $\operatorname{Im}\Sigma(\xi, \omega)$ от ξ , получаем в пренебрежении малыми величинами $\operatorname{Im}Z(\omega)$, $\operatorname{Re}\chi(\omega)$, $\operatorname{Im}\chi(\omega)$ из (3), (4) существенное упрощение нелинейного по параметру порядка φ уравнения для реальной части комплексного аномального параметра порядка. В широкозонных материалах, таких как

металлический водород, логарифмическое слагаемое в уравнениях в (3), (4) с хорошей точностью может быть положено равным нулю, так что система уравнений для параметра порядка в результате интегрирования в первом слагаемом по ξ с учетом свойств дельта-функции принимает вид:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}\varphi(\omega) = & P \int_0^{+\infty} dz' [K^{ph}(z', \omega) - K^{ph}(-z', \omega)] \times \\ & \times \frac{\operatorname{Re}\varphi(z')}{\sqrt{\operatorname{Re}^2 Z(z')z'^2 - \operatorname{Re}^2 \varphi(z') + \operatorname{Im}^2 \varphi(z')}} \times \\ & \times \left[N_0(-|\operatorname{Re}^2 Z(z')z'^2 - \operatorname{Re}^2 \varphi(z') + \operatorname{Im}^2 \varphi(z')|^{\frac{1}{2}}) + \right. \\ & + N_0(|\operatorname{Re}^2 Z(z')z'^2 - \operatorname{Re}^2 \varphi(z') + \operatorname{Im}^2 \varphi(z')|^{\frac{1}{2}}) \left. \right] / 2N_0(0) - \\ & - \frac{\mu^*}{\pi \left(1 - \mu^* \ln \frac{\omega_c}{\omega_D}\right)} \int_0^{\omega_c} dz' \operatorname{th} \frac{z'}{2T} \times \\ & \times \frac{\operatorname{Re}\varphi(z')}{\sqrt{\operatorname{Re}^2 Z(z')z'^2 - \operatorname{Re}^2 \varphi(z') + \operatorname{Im}^2 \varphi(z')}}}, \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}\varphi(\omega) = & -\frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dz' \left\{ \alpha^2(|\omega - z'|) F(|\omega - z'|) \times \right. \\ & \times \left[\operatorname{cth} \frac{(\omega - z')}{2T} + \operatorname{th} \frac{z'}{2T} \right] \operatorname{sign}(\omega - z') - \\ & - \alpha^2(|\omega + z'|) F(|\omega + z'|) \left[\operatorname{cth} \frac{(\omega + z')}{2T} - \operatorname{th} \frac{z'}{2T} \right] \times \\ & \times \operatorname{sign}(\omega + z') \left. \right\} \frac{\pi \operatorname{Re}\varphi(z')}{\sqrt{\operatorname{Re}^2 Z(z')z'^2 - \operatorname{Re}^2 \varphi(z') + \operatorname{Im}^2 \varphi(z')}} \times \\ & \times \left[\frac{N_0(-|\operatorname{Re}^2 Z(z')z'^2 - \operatorname{Re}^2 \varphi(z') + \operatorname{Im}^2 \varphi(z')|^{\frac{1}{2}})}{2N_0(0)} + \right. \\ & + \left. \frac{N_0(|\operatorname{Re}^2 Z(z')z'^2 - \operatorname{Re}^2 \varphi(z') + \operatorname{Im}^2 \varphi(z')|^{\frac{1}{2}})}{2N_0(0)} \right]. \quad (7) \end{aligned}$$

Параметр порядка будем записывать в виде $\varphi(\omega) = \Delta(\omega)|Z(\omega)|$, $|Z(z')| = (\operatorname{Re}^2 Z(z') + \operatorname{Im}^2 Z(z'))^{\frac{1}{2}}$, интеграл по z' в (6), (7) берется в смысле главного значения, что отмечено символом P , при отрицательных z' величина $-\left[\operatorname{Re}^2 Z(z')z'^2 - \operatorname{Re}^2 \varphi(z') + \operatorname{Im}^2 \varphi(z')\right]^{\frac{1}{2}}$ не может быть меньше, чем $-\mu$, так что интегрирование по z' при отрицательных z' обрывается при условии $|\operatorname{Re}^2 Z(z')z'^2 - \operatorname{Re}^2 \varphi(z') + \operatorname{Im}^2 \varphi(z')|^{\frac{1}{2}} = \mu$. При z' таких, что $\operatorname{Re}^2 Z(z')z'^2 - \operatorname{Re}^2 \varphi(z') + \operatorname{Im}^2 \varphi(z') < 0$ подынтегральная функция равна нулю. Корень будем полагать положительным,

$\sqrt{\text{Re}^2 Z(z')z'^2 - \text{Re}^2 \varphi(z') + \text{Im}^2 \varphi(z')} \geq 0$ при любом знаке z' . Предполагая постоянство “голой” плотности электронных состояний $N_0(\omega)$, можно перейти от системы уравнений (6), (7) к обычной системе уравнений Элиашберга [15], в которой пренебрегается шириной электронной зоны, спариванием вне ферми-поверхности, непостоянством плотности электронных состояний и эффектами электрон-дырочной неэквивалентности.

2. T_c в металлическом водороде. В данной работе мы для определения T_c и характера поведения с частотой комплексного параметра порядка при различных температурах решали уравнения Элиашберга в виде нелинейной системы уравнений (6), (7) для комплексного параметра порядка φ в металлическом водороде в фазе I41/ADM при давлении 500 ГПа с учетом переменного характера плотности электронных состояний. Вычисления функциональных зависимостей $\text{Re}Z(\omega, T)$, $N_0(\omega, T)$ при различных температурах, содержащихся в выражениях (6), (7), были выполнены с использованием формализма, развитого в [16, 17]. Решение системы уравнений (5), (6), а также уравнений для нормального состояния выполнено с помощью итерационного метода с учетом поведения спектральной функции ЭФ взаимодействия (функции Элиашберга) $\alpha^2 F(z)$ (рис. 1) для I41/AMD фазы металлического водорода при давлении $P = 500$ ГПа. Частотная зависимость перенормировки массового оператора $\text{Re}Z(\omega)$, $\text{Im}Z(\omega)$, величины, которые условно можно назвать “ренормализацией комплексного химического потенциала” $\text{Re}\chi(\omega)$, $\text{Im}\chi(\omega)$, представлены на рис. 2.

Установлено, что процесс сходимости решения реальной части параметра порядка $\text{Re}\varphi(\omega)$ при решении системы уравнений (6), (7) устанавливается при числе итераций порядка нескольких десятков. При $T = 220$ К при увеличении числа итераций $\text{Re}\varphi(\omega)$, а также $\text{Im}\varphi(\omega)$ стремятся к нулевым значениям, что говорит об отсутствии эффекта сверхпроводимости при такой температуре. При этом, однако, параметр порядка, уменьшаясь с ростом номера итерации, сохраняет структуру, характерную для сверхпроводящего состояния. Уравнения (6), (7) ниже температуры T_c имеют три решения: $\text{Re}\varphi(\omega)$ и $\text{Im}\varphi(\omega)$, $-\text{Re}\varphi(\omega)$ и $-\text{Im}\varphi(\omega)$, а также в случае сверхпроводимости неустойчивое нулевое решение. При численном решении уравнений (6), (7) на действительной оси решение перед установлением на нулевое решение испытывает многократное перестроение из “отрицательного” в “положительное”. Дополнительной сложностью в решении уравнений (6), (7) яв-

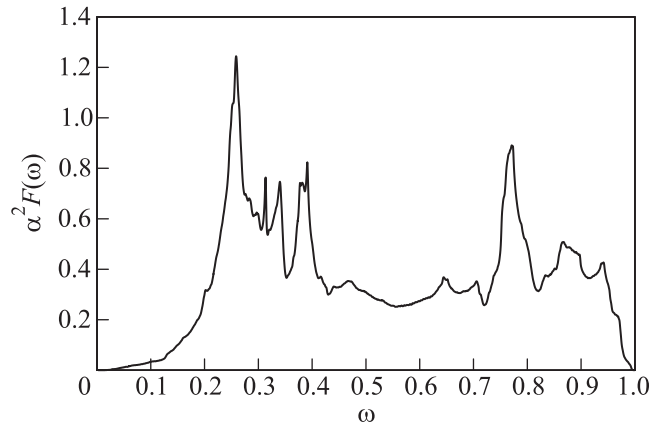


Рис. 1. Спектральная функция электрон-фононного взаимодействия в фазе AMD I41 металлического водорода при давлении 500 ГПа. Частота выражается в безразмерных единицах (в долях от максимальной частоты 0.34 эВ фононного спектра фазы металлического водорода AMD I41)

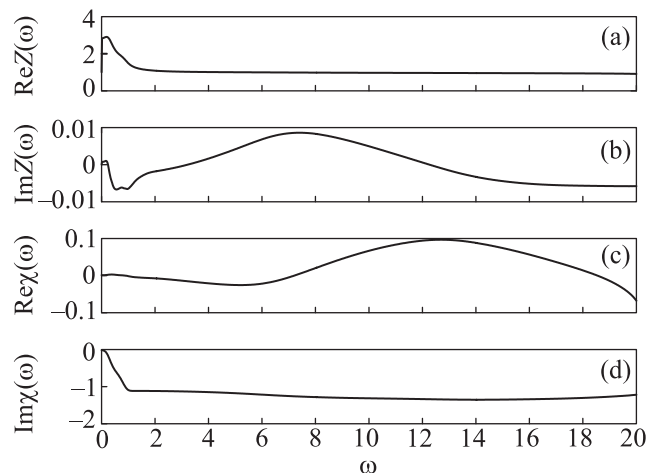


Рис. 2. Параметры реконструированной зоны проводимости металлической фазы водорода I41/AMD. (a) – Действительная часть перенормировки массы электронов $\text{Re}Z(\omega)$. (b) – Мнимая часть $\text{Im}Z(\omega)$ перенормировки массы электрона в собственной энергетической части электронной функции Грина. (c) – Ренормализованная электрон-фононным взаимодействием действительная часть перенормировки химического потенциала $\text{Re}\chi(\omega)$. (d) – Перенормированная электрон-фононным взаимодействием мнимая часть перенормировки химического потенциала $\text{Im}\chi(\omega)$. Частота выражается в безразмерных единицах (в долях от максимальной частоты 0.34 эВ фононного спектра для исследуемой фазы металлического водорода). Все результаты были получены для давления $P = 500$ ГПа и температуры $T = 215$ К

ляется численное интегрирование несобственных интегралов с расходимостями, фигурирующими в этих

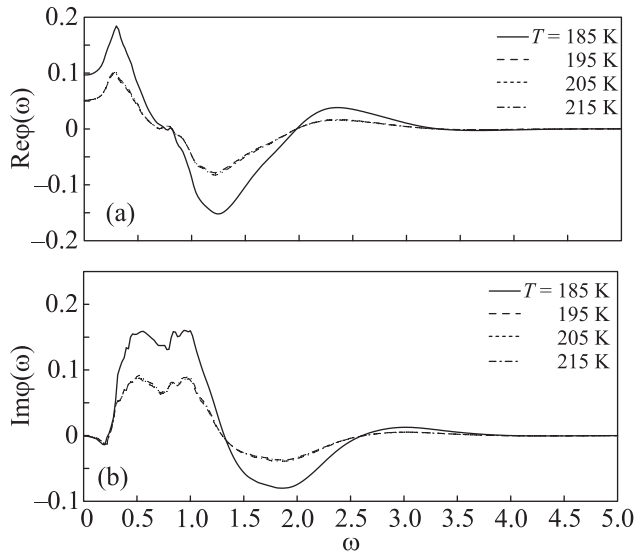


Рис. 3. Зависимость от температуры установившегося решения (50 итераций) для реальной части $\text{Re}\varphi(\omega)$ (a) и мнимой части $\text{Im}\varphi(\omega)$ (b) в фазе I41/AMD металлического водорода при температуре $T = 185, 195, 205, 215$ К при давлении $P = 500$ ГПа. Частота выражена в безразмерных единицах, соответствующих предельной частоте фононного спектра 340 мэВ

уравнениях. На рис. 3 показана зависимость установившегося решения от температуры при температурах ниже критической. Поведение реальной части параметра порядка $\text{Re}\varphi(\omega)$ и мнимой части параметра порядка $\text{Im}\varphi(\omega)$ при $T = 185, 195, 205, 215$ К представлено на рис. 3.

На рис. 4 представлен график зависимости от частоты реальной и мнимой части параметра порядка при температуре $T = 215$ К, весьма близкой к температуре сверхпроводящего перехода.

Мнимая часть $\text{Im}\varphi(\omega)$ параметра порядка при малых частотах является отрицательной, а при значении безразмерной частоты, равной 0.23 , приобретает положительные значения. Таким образом, нами установлена величина энергетической щели в фазе I41/AMD металлического водорода, которая оказалась равной 0.23×0.34 эВ, т.е. 78 мэВ. Решение для результирующего значения $T_c = 217$ К здесь не представлено в силу стремящихся к нулю значений параметра порядка при такой температуре. На рис. 5 показана зависимость от частоты при номере итерации 96 весьма малых величин $\text{Re}\varphi(\omega)$, $\text{Im}\varphi(\omega)$ при температуре $T = 220$ К, превышающей T_c . Виден процесс обращения в нуль с ростом номера итерации решения для комплексной величины $\varphi(\omega)$ при температуре $T = 220$ К, что свидетельствует о том, что $T_c < 220$ К. Из рис. 5 видно, что величины $\text{Re}\varphi(\omega)$, $\text{Im}\varphi(\omega)$ уменьшаясь с ростом номера итерации, да-

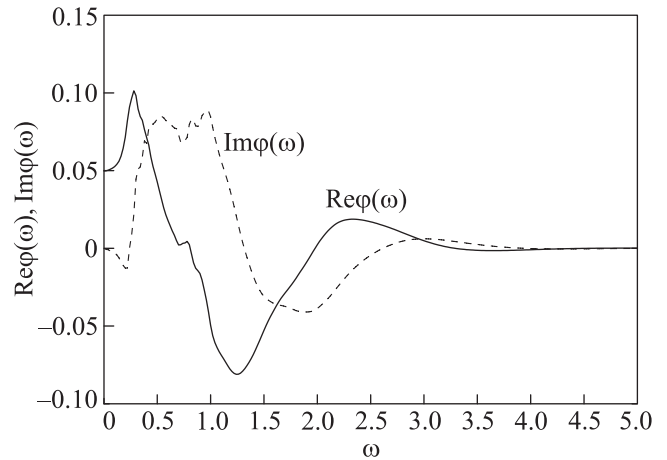


Рис. 4. Зависимость от частоты установившегося решения для реальной части $\text{Re}\varphi(\omega)$ (1) и мнимой части $\text{Im}\varphi(\omega)$ (2) параметра порядка в фазе I41/AMD металлического водорода при $T = 215$ К при давлении $P = 500$ ГПа. Частота выражена в безразмерных единицах, соответствующих предельной частоте фононного спектра 0.34 эВ

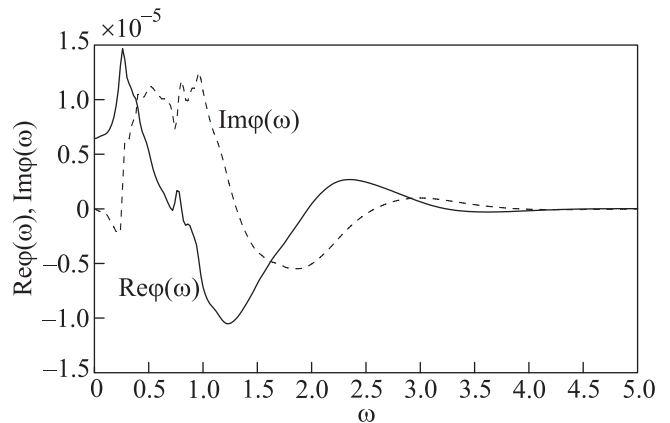


Рис. 5. Зависимость от частоты решения при 96 итерациях для реальной части $\text{Re}\varphi(\omega)$ (1) и мнимой части $\text{Im}\varphi(\omega)$ (2) в фазе I41/AMD водорода при $T = 220$ К при давлении $P = 500$ ГПа. Частота выражена в безразмерных единицах, соответствующих предельной частоте фононного спектра 360 мэВ

же при $T = 220$ К сохраняют функциональную зависимость, характерную для сверхпроводящего состояния в сероводороде. При этом в качестве начальных условий использовалось грубое приближение 1 для $\text{Re}\varphi(\omega)$ и 0 для $\text{Im}\varphi(\omega)$, не приводящее в решение никакой функциональной зависимости от частоты ω .

Решения для параметра порядка с учетом кулоновского вклада и без учета кулоновского вклада очень мало отличаются друг от друга. В силу этого обстоятельства графики, сравнивающие эти два решения, мы здесь не приводим.

3. Выводы. Анализируя представленные результаты и суммируя все написанное ранее, мы приходим к следующим выводам.

1. Решены обобщенные уравнения Элиашберга с учетом переменного характера плотности электронных состояний на действительной оси. Получено количественное значение $T_c = 217\text{ K}$ для фазы I41/AMD металлического водорода. Установлена медленная сходимость решения уравнений Элиашберга с ростом номера итерации.

2. Определена частотная зависимость, а также тонкая структура реальной части $\text{Re}\varphi(\omega)$ и мнимой части $\text{Im}\varphi(\omega)$ параметра порядка, отвечающие выбранной фазе I41/AMD металлического водорода при температурах $T = 185, 195, 205, 215\text{ K}$. Найдено изменение функциональной зависимости параметра порядка от частоты в зависимости от температуры.

3. Найдена величина энергетической щели в фазе I41/AMD сероводорода, которая оказалась равной 78 мэВ .

4. Показано, что при температурах выше критической параметр порядка весьма медленно стремится к нулю с ростом номера итерации, сохраняя функциональное поведение от частоты, характерное для сверхпроводящего состояния.

5. Все расчеты проводились из первых принципов. В работе не делалось никаких предположений и не использовалось никаких подгоночных параметров. Все рассмотрение проводилось на реальной оси так, чтобы можно было исследовать частотное поведение параметра порядка без процедуры аналитического продолжения одновременно с расчетом T_c . При температуре $220\text{ K} > T_c$, когда уравнения для параметра порядка приводят к крайне малым максимальным значениям параметра порядка $\text{Re}\varphi, \text{Im}\varphi \sim 10^{-8}$ при сотой итерации, зависимость параметра порядка от частоты аналогична зависимости параметра порядка от частоты для сверхпроводящего состояния.

6. Для появления высокого T_c в ЭФ системе критически важно принимать в учет переменный характер плотности электронных состояний в зоне проводимости. Учет непостоянства плотности электронных состояний в такой зоне приводит к возможности спаривания электронов во всем ферми-объеме, в отличие от обычно рассматриваемого спаривания в пределах слоя толщиной ω_D у поверхности Ферми.

7. Учет кулоновского псевдопотенциала электронов в сероводороде приводит к несущественному

уменьшению вычисляемого T_c . Значение T_c в металлическом водороде может быть резко повышено по сравнению с рассчитанным значением T_c путем изменения давления и подбора оптимального поведения $\text{Re}Z(\omega), \text{Im}Z(\omega), \text{Re}\chi(\omega), \text{Im}\chi(\omega)$ наряду с оптимальным поведением плотности электронных состояний $N_0(\varepsilon)$ при слабой электрон-дырочной неэквивалентности и при умеренном значении константы ЭФ связи.

Авторы благодарят Ю. Кагана за глубокое и стимулирующее обсуждение данной работы. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 14-11-00258).

1. N. W. Ashcroft, Phys. Rev. Lett. **21**, 1748 (1968).
2. Ю. Каган, Е. Г. Бровман, УФН **105**, 777 (1971).
3. Е. Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас, ЖЭТФ **34**(6), 1300 (1972).
4. Е. Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас, ЖЭТФ **35**(4), 783 (1972).
5. Ю. Каган, В. В. Пушкарев, А. Холас, ЖЭТФ **46**(3), 511 (1977).
6. Н. Н. Дегтяренко, Е. А. Мазур, Письма в ЖЭТФ **104**(5), в печати (2016).
7. J. M. McMahon and D. M. Ceperley, Phys. Rev. Lett. **106**, 165302 (2011).
8. M. D. Knudson, M. P. Desjarlais, A. Becker, R. W. Lemke, K. R. Cochrane, M. E. Savage, D. E. Bliss, T. R. Mattsson, and R. Redmer, Sci. Rep. **348**, 6242 (2015).
9. L. Hanyu, Z. Li, C. Wenwen, and M. Yanming, J. Chem. Phys. **137**, 074501 (2012).
10. I. I. Naumov, R. J. Hemley, R. Hoffmann, and N. W. Ashcroft, J. Chem. Phys. **143**, 064702 (2015).
11. M. I. Eremets, I. A. Troyan, and A. P. Drozdov, arXiv: 1601.04479v1 (2016).
12. M. Zaghoo, A. Salamat, and I. F. Silvera, arXiv: 1504.00259v1 (2015).
13. P. Dalley-Simpson, R. T. Howie, and E. Gregoryanz, Nature **529**, 63 (2016).
14. А. С. Александров, В. Н. Гребенев, Е. А. Мазур, Письма в ЖЭТФ **45**, 357 (1987).
15. С. В. Вонсовский, Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев, *Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений*, Наука, М. (1977).
16. Е. А. Мазур, Europhys. Lett. **90**, 47005 (2010).
17. Н. А. Кудряшов, А. Кутуков, Е. А. Мазур, ЖЭТФ **150**(3), 558 (2016).