

# Верхняя граница температуры сверхпроводящего перехода в теории Элиашберга–МакМиллана

М. В. Садовский<sup>1)</sup>

Институт электрофизики Уральского отделения РАН, 620016 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 3 июля 2024 г.

После переработки 3 июля 2024 г.

Принята к публикации 3 июля 2024 г.

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

DOI: 10.31857/S0370274X24080095, EDN: JWKVVA

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

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

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

Отсюда, казалось бы сразу следует, что ограничения на величину  $T_c$  просто отсутствуют, так что

<sup>1)</sup>e-mail: sadovski@iep.uran.ru

<sup>2)</sup>Фактически эта асимптотика достаточно неплохо работает уже при  $\lambda > 2$ .

в рамках электрон–фононного механизма спаривания можно получить весьма высокие значения  $T_c$ . Фактически дело обстоит несколько сложнее. Дело в том, что параметры  $\lambda$  и  $\langle\Omega^2\rangle$  в теории Элиашберга–МакМиллана не являются независимыми, что известно достаточно давно [4, 5, 9, 12].

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

а его градиент можно оценить как:

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

Отсюда получаем оценку (3):

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

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

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

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

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

$$a \sim r_s a_B = r_s \frac{\hbar^2}{m e^2} = r_s \frac{\hbar}{m c \alpha}, \quad (10)$$

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

$$p_F \sim \frac{\hbar}{r_s a_B} = \frac{m e^2}{\hbar r_s} = \frac{m c}{\hbar r_s} \alpha. \quad (11)$$

Тогда  $T_c^*$  (4) переписывается как:

$$T_c^* \sim \frac{0.2}{r_s} \sqrt{\frac{m}{M}} \alpha^2 m c^2 = \frac{0.2}{r_s} \sqrt{\frac{m}{M}} \frac{m e^4}{\hbar^2} = \frac{0.2}{r_s} \sqrt{\frac{m}{M}} \text{Ry}, \quad (12)$$

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

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

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

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

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