

КРИТИЧЕСКАЯ ТЕМПЕРАТУРА МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СЕРОВОДОРОДА ПРИ ДАВЛЕНИИ 225 ГПа

*Н. А. Кудряшов, А. А. Кутуков, Е. А. Мазур**

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 13 июня 2016 г.

Теория Элиашберга, обобщенная для электрон-фононных 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 SH_3 сероводорода под давлением. Рассматривается фононный вклад в аномальную электронную функцию Грина. 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 электрон-фононных взаимодействий, спектральная функция электрон-фононного взаимодействия, полученные расчетным путем, используются для расчета электронной аномальной функции Грина. Получено решение обобщенного уравнения Элиашберга с переменной плотностью электронных состояний. Получена зависимость действительной и мнимой частей параметра порядка в фазе SH_3 от частоты. В результате решения системы уравнений Элиашберга определено значение $T_c \approx 177$ К в фазе SH_3 сероводорода при давлении $P = 225$ ГПа.

DOI: 10.7868/S0044451016120000

1. ТЕОРИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ЗОНЫ С НЕПОСТОЯННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ

Целью настоящей работы является исследование поведения сверхпроводящего параметра порядка и T_c в веществах с сильным электрон-фононным (ЭФ) взаимодействием, позволяющее провести количественный расчет и предсказание сверхпроводящих свойств и T_c в различных фазах сероводорода [1, 2], а также в высокотемпературных материалах с ЭФ-механизмом сверхпроводимости, которые могут быть открыты в ближайшее время. Будем учитывать все особенности частотного поведения спектральной функции ЭФ-взаимодействия, характер изменения плотности электронных состояний $N_0(\omega)$, а также свойства вещества, в котором устанавливается сверхпроводящее состояние. Для этой цели в настоящей работе дополнительно развит пересмотренный вариант [3, 4] теории Мигдала–Элиашберга [5–20] для ЭФ-системы при нену-

левой температуре $T \neq 0$ в представлении Намбу, учитывающий непостоянство в пределах зоны плотности электронных состояний $N_0(\varepsilon)$, частотную и температурную зависимости комплексной перенормировки массы $\text{Re } Z(\omega, T)$, $\text{Im } Z(\omega, T)$, комплексную величину, обычно именуемую перенормировкой химического потенциала $\text{Re } \chi(\omega, T)$, $\text{Im } \chi(\omega, T)$, спектральную функцию ЭФ-взаимодействия, полученную расчетным путем, а также эффекты, вытекающие из электрон-дырочной неэквивалентности и конечности ширины зоны. В работе [21] было показано, что в случае сильной ЭФ-связи реконструкция действительной $\text{Re } \Sigma$ и мнимой $\text{Im } \Sigma$ частей собственно-энергетической части (СЧ) в материалах с переменной плотностью электронных состояний не ограничена областью частот ω порядка предельной фононной частоты ω_D , а распространяется 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 фононных частот, а отнюдь не только в окрестности поверхности Ферми $\mu - \omega_D < \omega < \mu + \omega_D$.

Учитывая указанное выше, будем рассматривать ЭФ-систему с гамильтонианом, который вклю-

* E-mail: EAMazur@mephi.ru

часть 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 функции Грина (ФГ) в дискретном наборе частотных точек

$$\omega_m = (2m + 1)\pi T, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

на мнимой оси может быть записана в виде

$$\hat{\Sigma}(i\omega_m) = i\omega_m [1 - Z(\mathbf{p}, \omega_m)] \hat{\tau}_0 + \chi(\mathbf{p}, \omega_m) \hat{\tau}_3.$$

Под $\chi(\xi, \omega)$ будет пониматься функция, обычно именуемая ренормализацией химического потенциала ЭФ-взаимодействием. Значение величины $\chi(\mathbf{p}, \omega_m)$, действительная 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 $Z(\mathbf{p}, \omega_m)$, действительная 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 действительной оси, за исключением дискретного набора точек на мнимой оси

$$\omega_m = (2m + 1)\pi T.$$

После выполнения аналитического продолжения

$$i\omega_p \rightarrow \omega + i\delta$$

фононный вклад в СЧ-часть электронной ФГ \hat{g}_R выражается следующим образом:

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

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

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

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 формулах (1), (2) 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 формуле (1) зависимостью $\alpha^2 F$ от переменных ξ, ξ' : $\alpha^2(\xi', \xi, z)F(\xi', \xi, z) \approx \alpha^2(z)F(z)$. Заменим $Z(\mathbf{p}', \omega)$ 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 $\varphi(-z') = \varphi^*(-z')$ [14] параметра порядка. Из формул (1), (2) с учетом стандартного выражения для запаздывающей ФГ $\hat{g}_R(\xi', z')$ получаем уравнения для действительной $\text{Re } \varphi(\omega)$ и мнимой $\text{Im } \varphi(\omega)$ частей аномальной части СЧ ФГ $\varphi(\omega)$ в виде следующей системы двух уравнений (3), (4):

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \varphi(\omega) = & -\frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} dz' [K^{ph}(z', \omega) - K^{ph}(-z', \omega)] \times \\ & \times \int_{-\mu}^{\infty} d\xi' \frac{N_0(\xi')}{N_0(0)} \times \\ & \times \operatorname{Im} \frac{\varphi(z')}{[Z(z')(z')]^2 - \varphi^2(z') - (\xi' + \chi(z'))^2} - \\ & - \frac{\mu^*}{\pi(1 - \mu^* \ln(\omega_c/\omega_D))} \int_0^{\omega_c} dz' \operatorname{th} \frac{z'}{2T} \int_{-\mu}^{\infty} d\xi' \frac{N_0(\xi')}{N_0(0)} \times \\ & \times \operatorname{Im} \frac{\varphi(z')}{Z^2(z')z'^2 - \varphi^2(z') - (\xi' + \chi(z'))^2}, \quad (3) \end{aligned}$$

где в формуле (3) первое слагаемое описывает роль ЭФ-взаимодействия, а второе — кулоновский вклад, имеющий стандартный вид [14]. Кулоновский псевдопотенциал электронов в металлическом сероводороде $\mu^* \approx 0.1$ выражается через усредненный кулоновский матричный элемент V_c стандартным образом:

$$\begin{aligned} \mu^* = & V_c N_0(0) / (1 + V_c N_0(0) \ln(E_F/\omega_D)), \\ & \omega_D \ll \omega_c \ll E_F, \end{aligned}$$

ω_c — энергетический диапазон эффективности кулоновского взаимодействия;

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

где

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

В формулах (3), (4) мы ожидаем малый кулоновский вклад в параметр порядка с учетом малости кулоновского псевдопотенциала в сероводороде $\mu^* \approx 0.1$ по сравнению со значительной константой $\lambda \sim 2.21$ ЭФ-взаимодействия в фазе SH_3 сероводорода. Выражения и графики для 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 были получены в работах [3, 4, 22, 24]. 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 действительной части комплексного аномального параметра порядка. В широкозонных материалах, таких как металлический сероводород, 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

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

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

Параметр порядка будем записывать в виде

$$\varphi(\omega) = \Delta(\omega) |Z(\omega)|,$$

$$|Z(z')| = (\text{Re}^2 Z(z') + \text{Im}^2 Z(z'))^{1/2},$$

интеграл по z' в (6), (7) берется в смысле главного значения, что отмечено символом P , при отрицательных z' величина $-|\text{Re}^2 Z(z') z'^2 - \text{Re}^2 \varphi(z') + \text{Im}^2 \varphi(z')|^{1/2}$ не может быть меньше, чем $-\mu$, так что интегрирование по z' при отрицательных z' обрывается при условии

$$|\text{Re}^2 Z(z') z'^2 - \text{Re}^2 \varphi(z') + \text{Im}^2 \varphi(z')|^{1/2} = \mu.$$

При z' таких, что

$$|\text{Re}^2 Z(z') z'^2 - \text{Re}^2 \varphi(z') + \text{Im}^2 \varphi(z')|^{1/2} < 0,$$

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 голь плотности электронных состояний $N_0(\omega)$, можно перейти от системы уравнений (6), (7) к обычной системе уравнений Элиашберга [5–18, 20], в которой пренебрегается шириной электронной зоны, спариванием вне ферми-поверхности, непостоянством плотности электронных состояний и эффектами электрон-дырочной неэквивалентности.

2. ВЫСОКОЕ T_c В СЕРОВОДОРОДЕ КАК СЛЕДСТВИЕ ПОВЕДЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ЗОНЕ

В данной работе для определения T_c и характера поведения с частотой комплексного параметра порядка φ при различных температурах решались

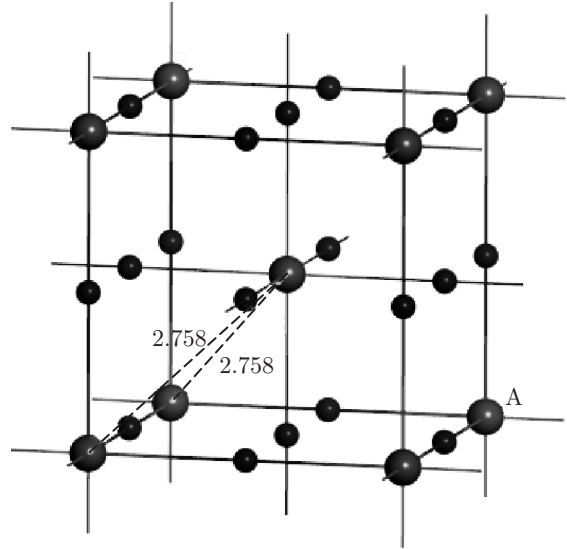


Рис. 1. Исследуемая структура SH_3 . Атомы серы представлены большим размером. Приведен рисунок из работы [22]

уравнения Элиашберга в виде нелинейной системы уравнений (6), (7) для комплексного параметра порядка φ в сероводороде в фазе SH_3 при давлении 225 ГПа с учетом переменного характера плотности электронных состояний $N_0(\omega, T)$. В (6), (7) учет кулоновского вклада в параметр порядка приводил к несущественному изменению частотного поведения параметра порядка и величины T_c в силу малости кулоновского псевдопотенциала $\mu^* \approx 0.1$ в фазе SH_3 по сравнению со значительной константой ЭФ-взаимодействия $\lambda \sim 2.273$ в данной фазе сероводорода.

Решение системы уравнений (6), (7) выполнено с помощью итерационного метода с учетом поведения спектральной функции ЭФ-взаимодействия (функции Элиашберга) $\alpha^2 F(z)$ [22, 23] и голь плотности электронных состояний для SH_3 -фазы сероводорода при давлении $P = 225$ ГПа (рис. 1, 2).

Поведение $K^{ph}(z', \omega)$ — функции (4) для фазы SH_3 сероводорода — представлено на рис. 3.

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 [3, 4, 22, 24]. Частотная зависимость перенормировки массового оператора $\text{Re } Z(\omega, T)$, $\text{Im } Z(\omega, T)$, а также величина, которую условно можно назвать «ренормализацией комплексного химического потенциала», $\text{Re } \chi(\omega)$, $\text{Im } \chi(\omega)$, представлены на рис. 4.

Установлено, что процесс сходимости решения действительной части параметра порядка $\text{Re } \varphi(\omega)$

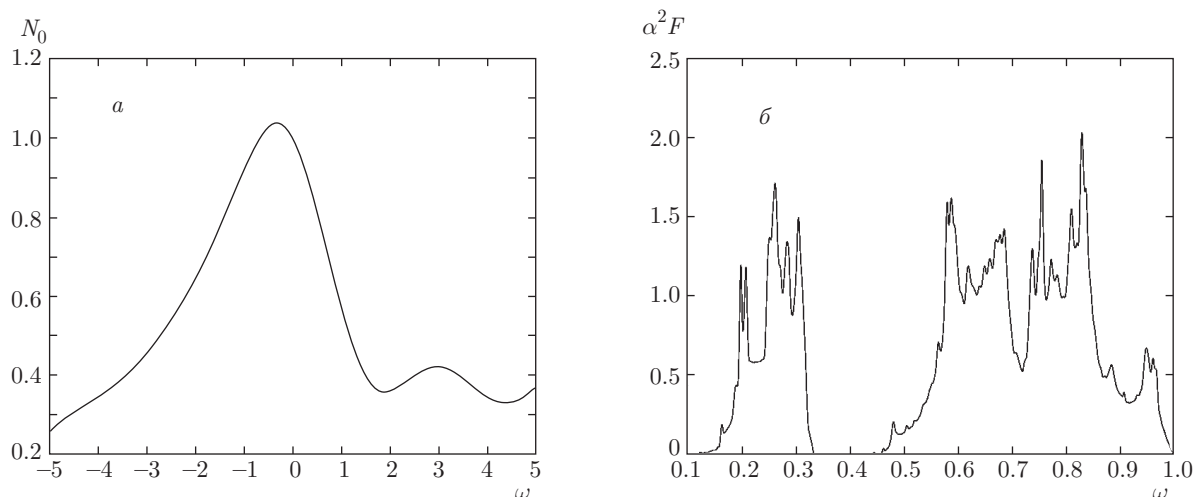


Рис. 2. а) Безразмерная «голая» полная плотность электронных состояний в сероводороде SH_3 при давлении 225 ГПа [22]. Частота ω выражена в безразмерных единицах (в долях максимальной частоты фононного спектра); б) спектральная функция электрон-фононного взаимодействия $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ в сероводороде SH_3 при давлении 225 ГПа [18]

при решении системы уравнений (6), (7) происходит при числе итераций порядка нескольких десятков. При $T = 180$ К и при $T = 300$ 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) является численное интегрирование несобственных интегралов с расходимостями, фигурирующими в этих уравнениях. Поведение действительной части параметра порядка $\text{Re } \varphi(\omega)$ и мнимой части параметра порядка $\text{Im } \varphi(\omega)$ при $T = 175, 180, 300$ К представлено на рис. 5–7. Решение для результирующего значения $T_c = 177$ К здесь не представлено в силу стремящихся к нулю значений параметра порядка при такой температуре.

Мнимая часть $\text{Im } \Delta(\omega)$ параметра порядка при малых частотах является отрицательной, а при значении безразмерной частоты равной 0.23 приобретает положительные значения. Таким образом,

мы установили величину энергетической щели в фазе SH_3 сероводорода, которая оказалась равной $0.23 \cdot 0.234$ эВ, т. е. примерно 600 К. На рис. 6 показан процесс обращения в нуль с ростом номера итерации решения для комплексной величины $\varphi(\omega)$ при температуре $T = 180$ К, что свидетельствует о том, что $T_c < 180$ К.

На рис. 7 показана зависимость от частоты при номере итерации 100 весьма малых величин $\text{Re } \varphi(\omega)$, $\text{Im } \varphi(\omega)$ при температуре $T = 300$ К. На рис. 7 видно, что величины $\text{Re } \varphi(\omega)$, $\text{Im } \varphi(\omega)$, уменьшаясь с ростом номера итерации, даже при $T = 300$ 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 привносящее в решение никакой функциональной зависимости от частоты ω .

На рис. 8 показана зависимость установившегося решения от температуры при температурах ниже критической. 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 написанное ранее, можно сделать следующие выводы.

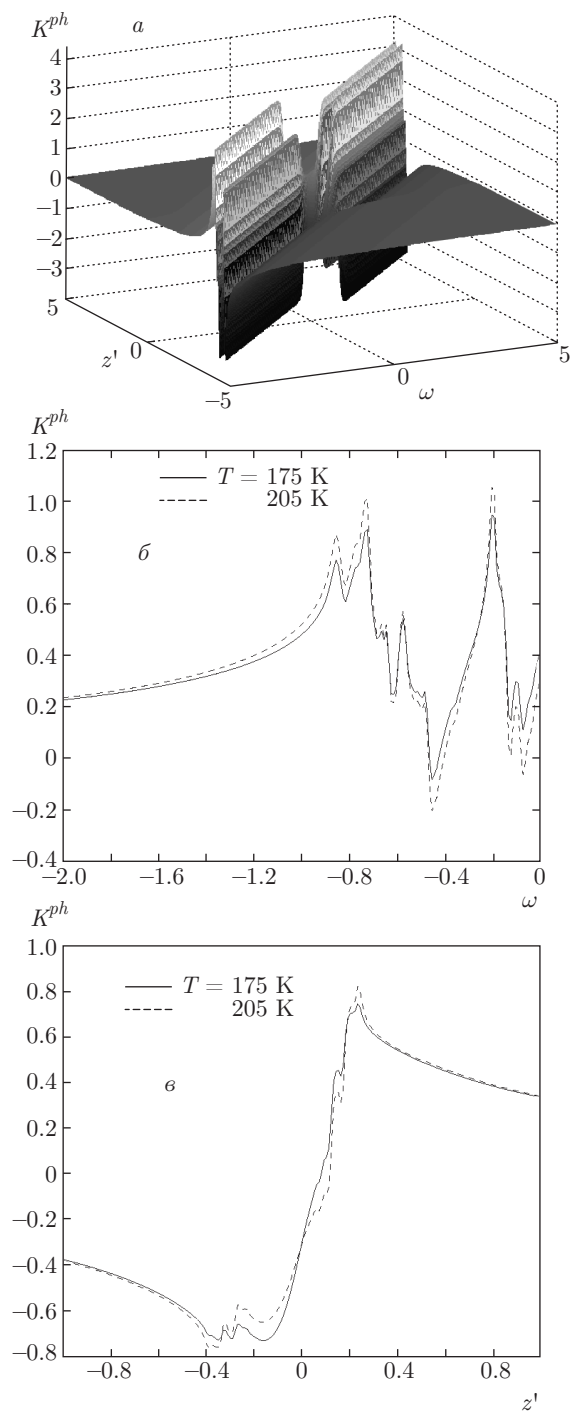


Рис. 3. а) Зависимость функции K^{ph} фазы металлического сероводорода SH_3 от двух безразмерных параметров z' и ω при температуре $T = 175$ К; б, в) сравнительное поведение графиков $K^{ph}(z', \omega)$ при $T = 175$ К и $T = 205$ К для фиксированного значения $z' = 0.11$, когда ω изменяется на отрезке $[-2; 0]$ (б) и фиксированного значения $\omega = -0.08$, когда z' изменяется на отрезке $[-1; 1]$ (в)

1. Решены обобщенные уравнения Элиашберга с учетом переменного характера плотности электронных состояний для металлического сероводорода. Получено количественное совпадение T_c для фазы SH_3 сероводорода с экспериментом. Установлена крайне медленная сходимость решения уравнений Элиашберга с ростом номера итерации.

2. Определена частотная зависимость, а также тонкая структура действительной части $\text{Re } \varphi(\omega)$ и мнимой части $\text{Im } \varphi(\omega)$ параметра порядка, отвечающие выбранной фазе SH_3 сероводорода при температурах $T = 175$ К, $T = 180$ К, $T = 300$ К. Найдено изменение функциональной зависимости параметра порядка от частоты в зависимости от температуры.

3. Найдена величина энергетической щели в фазе SH_3 сероводорода, которая оказалась равной примерно 600 К.

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. Метод решения уравнений Элиашберга на наборе дискретных точек мнимой оси, сталкивающийся с проблемой сходимости решения при малом порядке дискретной матрицы, недостаточно точно воспроизводит зависимость параметра порядка от частоты при аналитическом продолжении решения для параметра порядка на действительную ось частот в сравнении с методом решения уравнений Элиашберга на действительной оси.

6. Все расчеты проводились из первых принципов. В работе не делалось никаких предположений и не использовалось никаких подгоночных параметров. Все исследование проведено на действительной оси, так чтобы можно было изучить частотное поведение параметра порядка без процедуры аналитического продолжения одновременно с расчетом T_c . Мы получили значение $T_c \approx 177$ К, совпадающее с экспериментальным [2] значением в сероводороде при давлении 225 ГПа. При температуре 180 К $> T_c$ и даже при комнатной температуре $T = 300$ К, 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.

7. Три фактора, критическим образом влияющие на T_c в ЭФ-системе, а именно, переменный характер плотности электронных состояний $N_0(\varepsilon)$, свойства конкретного вещества, зависящие от перенормиров-

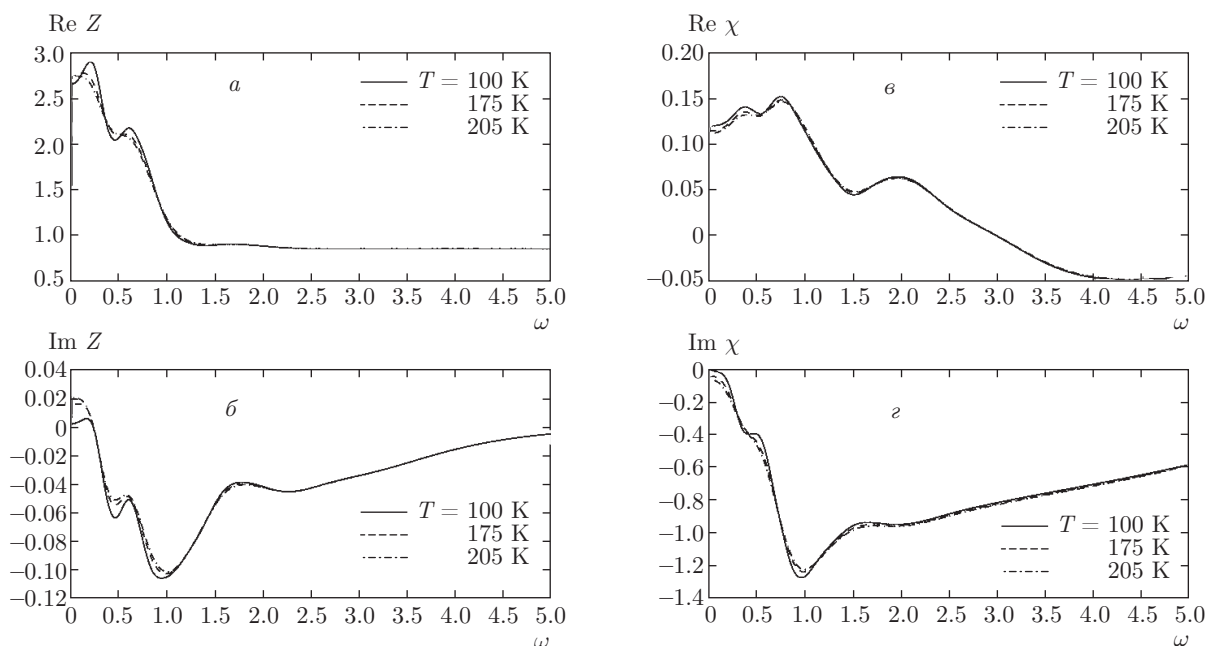


Рис. 4. Реконструированные параметры зоны проводимости металлического сероводорода в фазе SH_3 при различных температурах: *a* — действительная часть $\text{Re } Z(\omega)$ перенормировки массы $Z(\omega)$ электронной функции Грина электронов в фазе SH_3 сероводорода, *б* — мнимая часть $\text{Im } Z(\omega)$ перенормировки массы электрона в СЧ электронной функции Грина электронов, *в* — ренормализованная ЭФ-взаимодействием действительная часть перенормировки химического потенциала $\text{Re } \chi(\omega)$ в сероводороде, *г* — ренормализованная ЭФ-взаимодействием мнимая часть перенормировки химического потенциала $\text{Im } \chi(\omega)$ в сероводороде. Частота ω (здесь и далее на рис. 5–8) выражена в безразмерных единицах (в долях максимальной частоты фононного спектра, составляющей для данной фазы сероводорода 0.234 эВ). Результаты получены при $P = 225$ ГПа

ки массы электронов $\text{Re } Z(\omega)$, затухания $\text{Im } Z(\omega)$ носителей, действительной $\text{Re } \chi(\omega)$ и мнимой $\text{Im } \chi(\omega)$ составляющих перенормировки химического потенциала, а также вклады, пропорциональные $\text{Im } \Delta(\omega)$ в уравнениях Элиашберга, не были учтены в формализме предыдущих работ [6–18, 20]. Неучет вкладов, пропорциональных $\text{Im } \Delta(\omega)$, привел к нарушению соотношений Крамерса – Кронига для мнимой и действительной частей параметра порядка в уравнениях Элиашберга.

8. Для появления высокого значения T_c в ЭФ-системе критически важно учитывать 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.

9. Учет кулоновского псевдопотенциала электронов в сероводороде приводит к незначительному уменьшению вычисляемого T_c . Из настоящего рассмотрения с учетом значительного значения сверхпроводящей щели 600 К и из сохранения

структуры решения для параметра порядка для температур, больших T_c , становится ясно, что ЭФ-система сероводорода даже при температурах выше критической находится в «квазисверхпроводящем» состоянии. Из этого следует, что значение T_c в ЭФ-системах может быть резко повышено по сравнению с экспериментально определенным [1, 2] значением T_c в сероводороде 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. Возможно, что высокотемпературная сверхпроводимость может быть достигнута при воздействии на ЭФ-систему, находящуюся в «квазисверхпроводящем» состоянии, каким-либо слабым возмущением, природу которого еще предстоит установить.

Авторы благодарят Ю. Кагана за глубокое и стимулирующее обсуждение данной работы. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 14-11-00258).

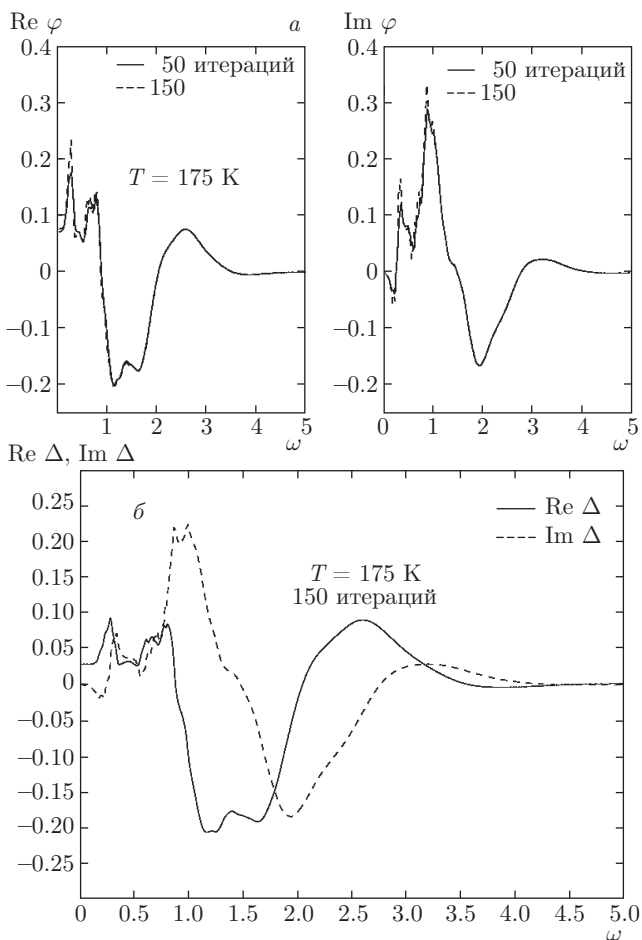


Рис. 5. Зависимость от частоты установившегося решения для действительной $Re \varphi(\omega)$ и мнимой $Im \varphi(\omega)$ частей (а); действительной $Re \Delta(\omega)$ и мнимой $Im \Delta(\omega)$ частей параметра порядка в фазе SH_3 сероводорода при $T = 175$ К при давлении $P = 225$ ГПа (б)

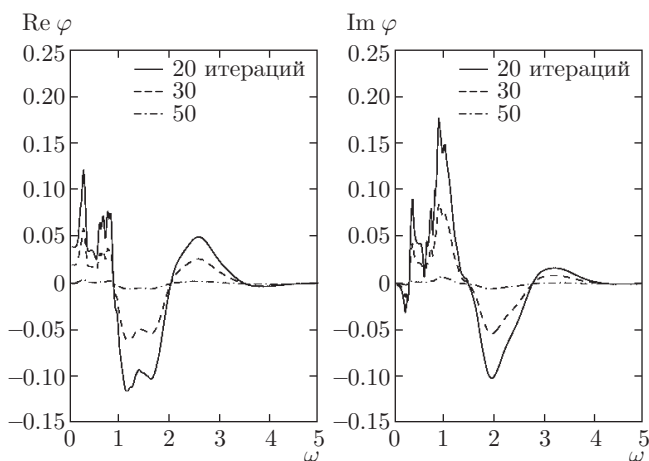


Рис. 6. Зависимость от номера итерации решения для действительной $Re \varphi(\omega)$ и мнимой $Im \varphi(\omega)$ частей в фазе SH_3 сероводорода при $T = 180$ К и давлении $P = 225$ ГПа

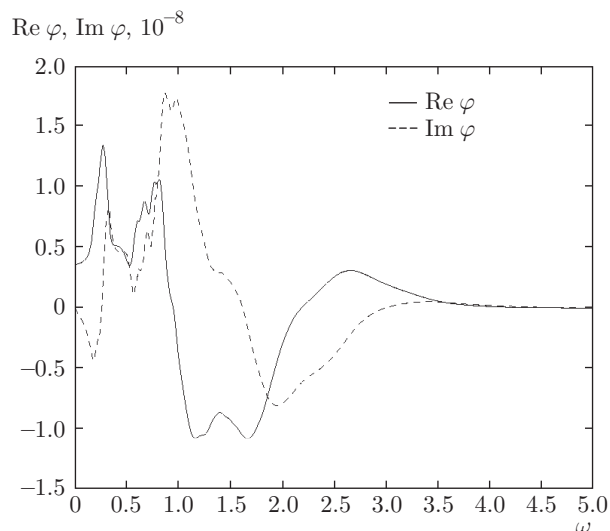


Рис. 7. Зависимость от частоты решения при ста итерациях для действительной $Re \varphi(\omega)$ и мнимой $Im \varphi(\omega)$ частей в фазе SH_3 сероводорода при $T = 300$ К и давлении $P = 225$ ГПа

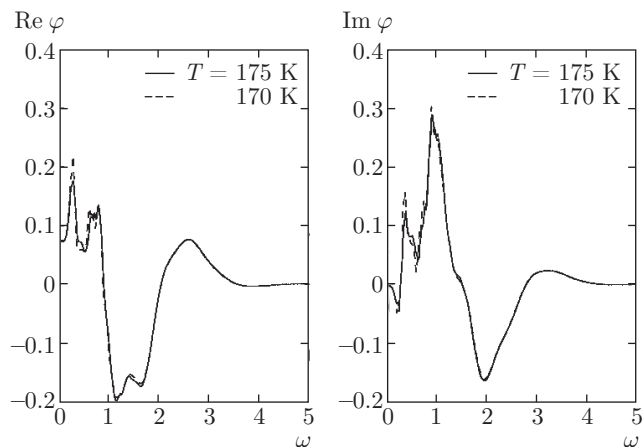


Рис. 8. Зависимость от температуры установившегося решения (50 итераций) для действительной $Re \varphi(\omega)$ и мнимой $Im \varphi(\omega)$ частей в фазе SH_3 сероводорода при давлении $P = 225$ ГПа

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Р. Drozdov, М. I. Eremets, and I. А. Troyan, arXiv:1412.0460.
2. А. Р. Drozdov, М. I. Eremets, I. А. Troyan, V. Ksenofontov, and S. I. Shylin, Nature **525**, 73 (2015).
3. Е. А. Mazur and Yu. Kagan, J. Supercond. Novel Magnet. **26**, 1163 (2013).
4. Е. А. Мазур, Ю. Каган, ЖЭТФ **148**, 275 (2015).

5. Г. М. Элиашберг, ЖЭТФ **38**, 966 (1969).
6. Г. М. Элиашберг, ЖЭТФ **39**, 1437 (1960).
7. P. B. Allen and R. C. Dynes, Phys. Rev. B **12**, 905 (1975).
8. W. L. McMillan, Phys. Rev. **167**, 331 (1968).
9. F. Marsiglio and J. P. Carbotte, Electron-phonon Superconductivity. In *Superconductivity, Volume 1: Conventional and Unconventional Superconductors*, ed. by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, pp. 73–162, Springer, Berlin–Heidelberg (2008).
10. S. Engelsberg and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **131**, 993 (1963).
11. D. G. Scallapino, *Superconductivity*, ed. by R. D. Parks, Dekker, New York, Vol. 1 (1969).
12. Дж. Шриффер, *Теория сверхпроводимости*, Наука, Москва (1970).
13. A. Morel and P. W. Anderson, Phys. Rev. **125**, 1263 (1962).
14. С. В. Вонсовский, Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев, *Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений*, Металлургия, Москва (1977).
15. *Проблема высокотемпературной сверхпроводимости*, под ред. В. Л. Гинзбурга, Д. А. Киржница, Наука, Москва (1977).
16. D. J. Scalapino, J. R. Schrieffer, and J. W. Wilkins, Phys. Rev. **148**, 263 (1966).
17. А. Е. Каракозов, Е. Г. Максимов, С. А. Машков, ЖЭТФ **68**, 1937 (1975).
18. В. Н. Гребенев, Е. А. Мазур, ФНТ **13**, 478 (1987).
19. W. E. Pickett, Rev. Phys. Rev. B **26**, 1186 (1982).
20. F. Marsiglio, J. Low Temp. Phys. **87**, 659 (1992).
21. А. С. Александров, В. Н. Гребенев, Е. А. Мазур, Письма в ЖЭТФ **45**, 357 (1987).
22. Н. А. Кудряшов, А. А. Кутуков, Е. А. Мазур, ЖЭТФ **150**, 558 (2016).
23. Н. Н. Дегтяренко, Е. А. Мазур, ЖЭТФ **148**, 1215 (2015).
24. E. A. Mazur, Europhys. Lett. **90**, 47005 (2010).