

Московский физико-технический институт
(государственный университет)
Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау РАН

«Теория сверхпроводимости за счёт
двухфононного обмена в
слабодопированном титанате стронция»
(Дипломная работа бакалавра)

студент 721 группы
Киселёв Д. Е.
научный руководитель
д.ф.-м.н., проф. Фейгельман М. В.

2021

Аннотация

В данной работе развивается теория сверхпроводящего спаривания в слабодопированном титанате стронция за счёт квадратичного взаимодействия электронной плотности и мягких оптических фононов. Оно приводит к статическому притягивающему потенциалу между электронами. Для концентраций свободных электронов $n \leq 10^{18} \text{см}^{-3}$ была найдена температура сверхпроводящего перехода T_c . Зависимость $T_c(n)$ оказалась в согласии с экспериментальными данными. Было показано, что уменьшение T_c за счёт статического давления и увеличение его за счёт изотопического эффекта при замене $^{16}\text{O} \rightarrow ^{18}\text{O}$ можно объяснить в рамках данной теории.

Оглавление

Аннотация	1
Введение	3
1 Притягивающий потенциал	5
2 Амплитуда рассеяния	9
3 Зависимость критической температуры от концентрации	13
4 Уменьшение критической температуры за счёт статического давления	15
5 Увеличение критической температуры за счёт изотопического замещения	17
6 Заключение	21

Введение

Титанат стронция известен достаточно давно, однако до сих пор остаётся объектом серьёзных дискуссий благодаря своим необычным свойствам. При нормальных условиях это полярный кристалл, параэлектрик, который при понижении температуры приближается к сегнетоэлектрическому переходу, однако его не достигает. Его можно допировать различными способами добиваясь перехода в сегнетоэлектрическое или в металлическое состояние. Металлом он становится при очень малых концентрациях свободных носителей заряда $n \sim 8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ [6] что гораздо меньше критического допирования для кремния ($n = 3.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) и германия ($n = 3.5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$). При больших концентрациях свободных зарядов материал становится сверхпроводником при n-допировании одним из трёх способов: при замене титана ниобием [7], стронция - лантаном [8] или выжигая часть кислорода [9]. Сверхпроводящий переход появляется при $n \sim 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ [9] что делает его одним из самых “разбавленных” сверхпроводников из известных на данный момент. Как следствие энергия Ферми оказывается очень маленькой, гораздо меньше энергии Дебая и классическая теория сверхпроводимости основанная на уравнениях Мигдала-Элиашберга неприменима.

Кроме того, одним из основных свойств данного материала является тот факт, что за счёт существования очень мягких поперечных оптических мод статическая диэлектрическая проницаемость оказывается порядка $\epsilon_0 \sim 2 \cdot 10^4$ из-за чего эффективный борковский радиус оказывается очень большим $a_B \sim 600 \text{ нм}$, гораздо больше значений $\sim 0.1 \text{ нм}$ для обычных металлов. Как следствие, кулоновское взаимодействие оказывается подавленным.

В течении последних пяти десятилетий возникло множество моделей описывающих механизм спаривания в титанате стронция [10–14] (в том числе взаимодействие электрона с одним фононом), однако они не смогли правильно описать критическую температуру сверхпроводящего перехода. Целью данной работы стало изучение процесса обмена двумя мягкими оптическими фононами между электронами предложенного в

[1](что соответствует диаграмме ниже) как возможного механизма сверхпроводимости в титанате стронция.

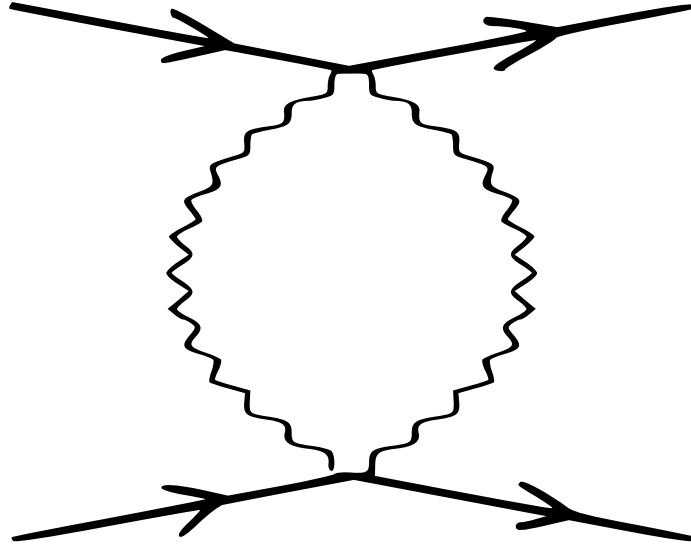


Рис. 1: Диаграмма соответствующая потенциалу взаимодействия между электронами за счёт двухфононного обмена. Прямые (волнистые) линии обозначают электронные (фононные) функции Грина.

Оказалось, что данный процесс приводит к короткодействующему притягивающему потенциалу, вида

$$V(x) \sim -\frac{1}{x^3} e^{-2\frac{x}{l_0}}, \quad (1)$$

где $l_0 = \frac{s}{\omega_T} \approx 3.3$ нм. Что в купе с малой энергией Ферми позволяет применить теорию развитую в [2] для нахождения температуры сверхпроводящего перехода. Кроме того, было показано, что в рамках данной теории можно качественно описать не укладывающиеся в стандартную теорию эффекты связанные с изотопическим замещением кислорода и статическим давлением.

Глава 1

Притягивающий потенциал

Получим выражение для притягивающего потенциала взаимодействия между двумя электронами. Для этого рассмотрим действие для фононов с дополнительным членом описывающим их взаимодействие с электронами предложенным в работе [1],

$$S = \int \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{u}}^2 - \frac{s^2}{2} m (\partial_\alpha u_\beta)^2 - \frac{1}{2} m \omega_T^2 \mathbf{u}^2 - mg \mathbf{u}^2 \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \right) d\mathbf{r} dt, \quad (1.1)$$

здесь $\omega_T = 1.5$ мэВ - нулевая частота поперечных оптических фононных мод, $s = 7.5 \cdot 10^5$ см/с - их скорость (константы взяты из [15]), а g - размерный параметр электрон-фононного взаимодействия, для определённости обезразмерим его как $g = \lambda \omega_L^2 a^3$, введя новый, уже безразмерный, параметр λ который мы в дальнейшем будем подбирать исходя из эксперимента. Здесь $\omega_L = 100$ мэВ - нулевая частота продольной оптической оси, $a = 4\text{\AA}$ - параметр решётки.

Мы хотим найти эффективный потенциал взаимодействия между двумя электронами. Для этого рассмотрим случай когда у нас есть два электрона в точках x_1 и x_2 . Тогда можно вместо оператора плотности электронов в действии выше написать $\rho(r) = \delta(r - x_1) + \delta(r - x_2)$. Теперь, используя такое действие, мы хотим найти симметричную по координатам электронов поправку к свободной энергии в первом исчезающем порядке по взаимодействию. Она и даст нам эффективный потенциал. Тогда для этой поправки имеем

$$\beta \delta F[V] \approx \frac{1}{2} \int \rho(r_1) V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, t_1 - t_2) \rho(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 dt_1 dt_2 = \quad (1.2)$$

$$= \iint V(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|, t_1 - t_2) dt_1 dt_2, \quad (1.3)$$

А с другой стороны, свободная энергия есть $F = -T \ln Z$. Записывая действие в мацубаровском времени (переход к нему, кроме того, даст лишний минус в выражении выше)

$$Z = \int D\mathbf{u}(\mathbf{q}, \omega) e^{iS_M} = \int D\mathbf{u}(\mathbf{q}, \omega) e^{\int -\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{u}}^2 - \frac{s^2}{2}m(\partial_\alpha u_\beta)^2 - \frac{1}{2}m\omega_T^2 \mathbf{u}^2 - mg\rho(x)\mathbf{u}^2 dx d\tau}. \quad (1.4)$$

Кроме того, следует заметить, что существует две вырожденные поляризации мягких оптических фононов. Несложным преобразованием можно свести выражение для статсуммы к обычному вещественному гауссовскому интегралу вида $\int Du e^{-\frac{1}{2}u\hat{L}u}$ где \hat{L} - некоторый оператор.

$$Z = \int Du_1(x, t) \int Du_2(x, t) e^{\frac{1}{\hbar} \int d\tau \int d^3x \int -\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{u}}^2 - \frac{s^2}{2}m(\partial_\alpha u)^2 - \frac{1}{2}m\omega_T^2 \mathbf{u}^2 - g\rho(x)\mathbf{u}^2} = \quad (1.5)$$

$$= \left(\int Du_1(x, t) e^{\frac{1}{\hbar} \int d\tau \int d^3x \int -\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{u}}^2 - \frac{s^2}{2}m(\partial_\alpha u)^2 - \frac{1}{2}m\omega_T^2 \mathbf{u}^2 - mg\rho(x)\mathbf{u}^2} \right)^2. \quad (1.6)$$

Этот интеграл тривиально берётся и в результате получаем выражение

$$Z = \det^{-1} \frac{1}{2\pi} \left(-m\partial_\tau^2 - ms^2\nabla^2 + m\omega_T^2 + 2mg\rho(x) \right). \quad (1.7)$$

Мы хотим выделить из $F = -T \ln Z$ наименьший по взаимодействию член, в который симметрично входят электроны. Таковым является квадратичный. Обозначим за \hat{L}_0 и \hat{L}_{int} операторы которые имеют вид в координатно-временном представлении с мацубаровским времени $\hat{L}_0 = -m\partial_\tau^2 - ms^2\nabla^2 + m\omega_T^2$, $\hat{L}_{int} = 2mg\rho(x)$. D_0 - обратный к L_0 . Тогда расписывая Z получаем

$$Z = \det^{-1} \left[\frac{1}{2\pi} \left(\hat{L}_0 + \hat{L}_{int} \right) \right] = \quad (1.8)$$

$$= \det^{-1} \left[\frac{1}{2\pi} \hat{L}_0 \left(1 + \hat{L}_0^{-1} \hat{L}_{int} \right) \right] = \quad (1.9)$$

$$= \det^{-1} \left(\frac{1}{2\pi} \hat{L}_0 \right) \times e^{\ln \det^{-1} (1 + \hat{D}_0 \hat{L}_{int})}. \quad (1.10)$$

Теперь разлагаем $\ln Z$

$$\ln Z = \ln \det^{-1} \frac{1}{2\pi} \hat{L}_0 - Tr \ln \left(1 + \hat{D}_0 \hat{L}_{int} \right) = \dots + \frac{1}{2} Tr \left(\hat{D}_0 \hat{L}_{int} \right)^2 + \dots \quad (1.11)$$

Теперь расписываем квадратичный член вставляя единицы $\int d^3x d\tau |\mathbf{x}, t\rangle \langle \mathbf{x}, t|$ (не забывая про мацубаровское время)

$$\ln Z_2 = -\frac{1}{2} \int dr_1 d\tau_1 \int d^3r_2 d\tau_2 D_0(r_1 - r_2) L(r_2) D_0(r_2 - r_1) L(r_1). \quad (1.12)$$

Оставляем только интересующие нас перекрестные члены

$$\ln Z_2 = -4m^2 g^2 \lambda^2 \int d\tau_1 d\tau_2 D_0(x_1 - x_2, \tau_1 - \tau_2) D_0(x_2 - x_1, \tau_2 - \tau_1). \quad (1.13)$$

Приравнивая к нашему выражению для поправки к свободной энергии через эффективный потенциал V и заменяя $x_1 - x_2 = r$ получаем выражение для потенциала

$$\int d\tau_1 d\tau_2 V(\mathbf{r}, \tau_1 - \tau_2) = -4m^2 g^2 \int d\tau_1 d\tau_2 D_0(\mathbf{r}, \tau_1 - \tau_2) D_0(-\mathbf{r}, \tau_2 - \tau_1). \quad (1.14)$$

Рассмотрим статический предел, тогда выражение под интегралом слева заменится на $V(\mathbf{r})\delta(\tau_1 - \tau_2)$ и тогда получаем для обычного статического потенциала

$$V(\mathbf{r}) = -4m^2 g^2 \int d\tau D_0(\mathbf{r}, \tau) D_0(-\mathbf{r}, -\tau). \quad (1.15)$$

Берём преобразование Фурье от функций Грина по времени

$$V(\mathbf{r}) = -4m^2 g^2 T^2 \sum_{\omega_n} \sum_{\omega_k} \int d\tau e^{-i\omega_n \tau + i\omega_k \tau} D_0(\mathbf{r}, \omega_n) D_0(-\mathbf{r}, \omega_k). \quad (1.16)$$

Интеграл по мацубаровскому времени собирается в $\frac{1}{T}\delta_{\omega_n, \omega_k}$ и снимает одну сумму

$$V(\mathbf{r}) = -4m^2 g^2 T \sum_{\omega_k} D_0(\mathbf{r}, \omega_k) D_0(-\mathbf{r}, \omega_k). \quad (1.17)$$

Итого

$$V(\mathbf{r}) = -T \sum_{\omega_k} [\dots] \xrightarrow{T \rightarrow 0} -4m^2 g^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} D_0(\mathbf{r}, \omega) D_0(-\mathbf{r}, \omega). \quad (1.18)$$

где $D_0(q, \omega) = \frac{1}{m\omega^2 + ms^2q^2 + m\omega_T^2}$. Тривиальным интегрированием найдём функцию Грина в координатном представлении

$$D_0(\mathbf{x}, \omega) = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{ms^2x} e^{-x \frac{\sqrt{\omega^2 + \omega_T^2}}{s}}. \quad (1.19)$$

Тогда для потенциала получаем

$$V = -4m^2g^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} D_0(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \omega) D_0(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, \omega) = \quad (1.20)$$

$$= -\lambda^2 \frac{a^6 \omega_L^4}{4\pi^2 s^4} \frac{1}{x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-2x \frac{\sqrt{\omega^2 + \omega_T^2}}{s}} = \quad (1.21)$$

$$= -\lambda^2 \frac{\hbar}{4\pi^3} \frac{a^6 \omega_L^4 \omega_T}{x^2 s^4} K_1 \left(\frac{2\omega_T}{s} x \right). \quad (1.22)$$

На больших масштабах $K_1(x)$ ведёт себя как затухающая экспонента, а на малых - как $1/x$ так что потенциал имеет обсуждавшийся во введении вид

$$V(x) \sim -\frac{1}{x^3} e^{-2\frac{x}{l_0}}, \quad (1.23)$$

где $l_0 = \frac{s}{\omega_T} \approx 3.3$ нм. Таким образом, получено притягивающее взаимодействие электронов за счёт двухфононного обмена.

Глава 2

Амплитуда рассеяния

Мы хотим воспользоваться результатом работы [2] который для случая $\omega_D \gg E_F$ позволяет выразить критическую температуру сверхпроводящего перехода через плотность состояний на уровне Ферми ν_0 и амплитуду рассеяния двух электронов друг на друге в s-канале - f_0

$$T_c = \frac{\gamma}{\pi} \left(\frac{2}{e} \right)^{7/3} E_F e^{-\frac{1}{\nu_0 |f_0|}}, \quad (2.1)$$

здесь $\gamma = \ln C \approx 1.78$, C —константа Эйлера, а e - основание натурального логарифма. Мы будем работать в пределах концентраций $5.5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3} < n < 1.2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Нижний предел задан пороговой концентрацией электронов обсуждавшейся выше, а верхний - краем первой зоны проводимости. Согласно [9] ферми-поверхность в титанате стронция при столь малых концентрациях близка к сфере, а значит, плотность состояний и энергию Ферми мы легко можем найти. Остаётся определить амплитуду взаимодействия.

Сначала найдём преобразование Фурье от описанного выше потенциала. Берём преобразование Фурье слева и справа в (1.18) и разлагаем в интегралы Фурье функции Грина в правой части уравнения

$$\tilde{V}(\mathbf{k}) = -4m^2 g^2 \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^3 q_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q} \mathbf{r}} D_0(\mathbf{q}_1, \omega) D_0(\mathbf{q}_2, \omega) \right] d^3 r = \quad (2.2)$$

$$= -4m^2 g^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^3 q_1}{(2\pi)^3} \int d^3 q \delta(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q} - \mathbf{k}) D_0(\mathbf{q}_1, \omega) D_0(\mathbf{q}_2, \omega) \right] = \quad (2.3)$$

$$= -4m^2 g^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} D_0(\mathbf{q} + \mathbf{k}, \omega) D_0(\mathbf{q}, \omega) \right]. \quad (2.4)$$

В дальнейших вычислениях важной окажется обрезка на больших импульсах, так что мы будем использовать простейшую модель спектра для оптических фононов в кубической зоне Бриллюэна $\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_T^2 + 4\frac{s^2}{a^2} (\sin^2(k_x a/2) + \sin^2(k_y a/2) + \sin^2(k_z a/2))$. Сначала найдём потенциал на нулевом импульсе.

$$\begin{aligned} \tilde{V}_0 = \tilde{V}(k=0) &= -4m^2 g^2 \int D_0(q, \omega) D_0(q, \omega) \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} = \quad (2.5) \\ &= -4g^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int \left(\frac{1}{\omega^2 + \omega_T^2 + 4\frac{s^2}{a^2} (\sin^2 \frac{q_x a}{2} + \sin^2 \frac{q_y a}{2} + \sin^2 \frac{q_z a}{2})} \right)^2 \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (2.6) \end{aligned}$$

Чтобы взять интеграл по ω замыкаем контур в верхней полуплоскости и сажаем интеграл на полюс, получаем

$$\tilde{V}_0 = -\lambda^2 \frac{1}{8\pi^3} \frac{a^6 \omega_L^4}{s^3} \int_{BZ} \frac{1}{[\omega_T^2 \frac{s^2}{a^2} + 4 (\sin^2 \frac{p_x}{2} + \sin^2 \frac{p_y}{2} + \sin^2 \frac{p_z}{2})]^{3/2}} d^3 p. \quad (2.7)$$

здесь интегрирование происходит по кубической зоне Бриллюэна т.е. каждая компонента вектора p пробегает от $-\pi$ до π . Можно найти удобную аналитическую формулу для этого интеграла, для этого заметим, что изменение кубической зоны интегрирования на сферическую, а спектра - на линейный не изменит главной зависимости от буквенных констант, а только изменит число получающееся из верхней обрезки. Для

сферической зоны интеграл берётся тривиально $\tilde{V}_0^{\text{Sphere}} = -\frac{\lambda^2}{2\pi^2} \frac{a^6 \omega_L^4}{s^3} \ln \frac{2\pi s}{\omega_T a \epsilon}$. Обозначим $W = \frac{\lambda^2}{2\pi^2} \frac{a^6 \omega_L^4}{s^3}$, $\kappa = \frac{\omega_T s}{a}$. Численными методами найдём интеграл (5.6) и подберём постоянную η которая получается из верхней обрезки так, чтобы величина $\tilde{V}_0 = -W \ln \frac{\eta}{\kappa}$ совпадала с численно посчитанным интегралом. Итого, окончательно получаем

$$\tilde{V}_0 = -W \ln \frac{\eta}{\kappa}, \quad (2.8)$$

где $\eta = 5.578$. В дальнейшем, окажется важно учесть также следующий член по внешнему импульсу k . Поправку можно найти аналитически, для этого заменим спектр на линейный и разложим интеграл (5.3) по малости внешнего импульса. Мы увидим, что интеграл для следующего члена быстро сходится, так, что спектр можно считать линейным, и обрезка на больших импульсах не важна. Обозначим $f(\mathbf{p}, \epsilon) = \epsilon^2 + \frac{a^2}{s^2} \omega_T^2 + p^2$ - функцию от обезразмеренных частоты и импульса, тогда для квадратичного члена можно записать:

$$\tilde{V}_2(\mathbf{k}) \approx -4g^2 \frac{1}{s^3} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\epsilon}{2\pi} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\epsilon + \frac{a^2}{s^2} \omega_T^2 + (\mathbf{p} + \mathbf{k}a)^2} \frac{1}{f(p)} - \frac{1}{f(p)^2} \right) \approx \quad (2.9)$$

$$\approx 4\lambda^2 \frac{a^6 \omega_L^4}{s^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{f^2(p)} \left(\frac{k^2 a^2}{f(p)} - 4 \frac{p^2 a^2 k^2 \cos^2 \theta}{f(p)^2} \right). \quad (2.10)$$

Как видим интегралы сходятся как p^{-4} что позволяет нам не беспокоиться о том что происходит на больших p . Берём интеграл и получаем в наших терминах W и κ выражение для потенциала

$$\tilde{V}(\mathbf{k}) \approx -W \left(\ln \frac{\eta}{\kappa} - \frac{1}{12} l_0^2 k^2 \right). \quad (2.11)$$

Остаётся только найти амплитуду взаимодействия электронов, тривиально интегрируя

$$f_0 = \frac{1}{2} \int_0^\pi \tilde{V}(2k_F \sin \theta/2) \sin \theta d\theta, \quad (2.12)$$

получаем

$$f_0 = -W\left(\ln\frac{\eta}{\kappa} - \frac{1}{6}l_0^2k^2\right). \quad (2.13)$$

Глава 3

Зависимость критической температуры от концентрации

Теперь мы можем непосредственно воспользоваться формулой для критической температуры из [2]

$$T_c = \frac{\gamma}{\pi} \left(\frac{2}{e}\right)^{7/3} E_F e^{-\frac{1}{\nu_0 |\lambda_0|}}, \quad (3.1)$$

здесь $\gamma = \ln C \approx 1.78$, C – константа Эйлера, а e – основание натурального логарифма. Строя графики для различных значений λ получаем

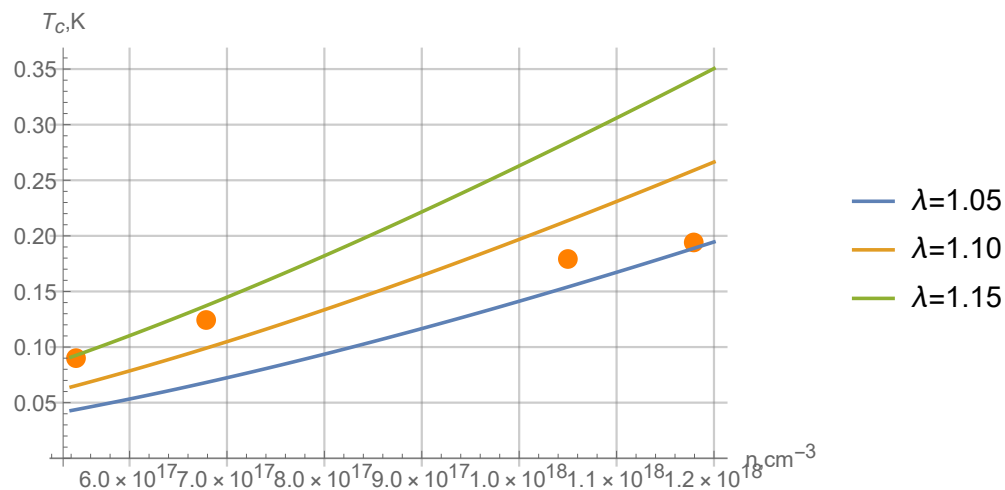


Рис. 3.1: График для зависимости критической температуры от концентрации для различных значений константы электрон-фононного взаимодействия. Оранжевые точки представляют экспериментальные данные из работы [3].

Лучше всего экспериментальным данным соответствует $\lambda = 1.10$, тем не менее некоторое расхождение присутствует и оно будет обсуждено ниже.

Глава 4

Уменьшение критической температуры за счёт статического давления

В работе [4] приводятся данные экспериментальной зависимости критической температуры и диэлектрической проницаемости ϵ от статического давления.

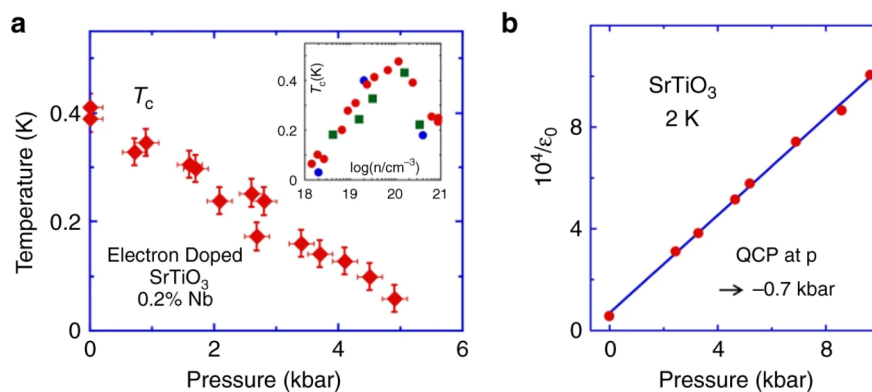


Рис. 4.1: Графики из [4] для зависимости критической температуры от статического давления при 0.2% допировании ниобием что соответствует $n = 3.4 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и обратной диэлектрической проницаемости от статического давления.

Как видно из графиков, убывание диэлектрической константы приводит к резкому падению критической температуры. Это можно объяснить в рамках развитой в данной работе теории. Согласно соотношению

Лиддана-Сакса-Теллера диэлектрическая проницаемость обратно пропорциональна квадрату частоты мягкой оптической моды и можно записать $\frac{\epsilon(P)}{\epsilon} = \frac{\omega_T^2}{\omega_T^2(P)}$. Таким образом, мы можем, используя экспериментальные данные на правой панели, найти зависимость ω_T от давления. После чего можно учесть эту зависимость в формуле для критической температуры и получить теоретическую кривую для $T_c(P)$. Строя графики для наибольшей и наименьшей из рассматриваемых нами концентраций получаем

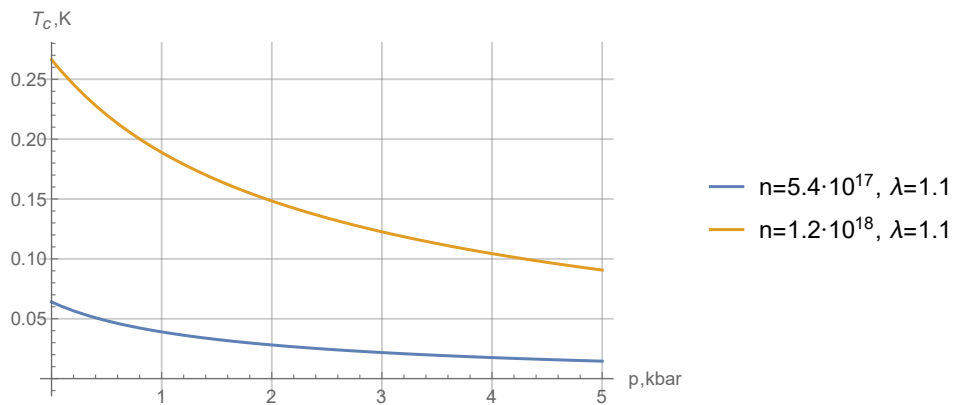


Рис. 4.2: Теоретический график для зависимости критической температуры от статического давления при различных концентрациях при $\lambda = 1.1$ и используя зависимость $\omega_T(P)$ полученную из данных [4].

Более аккуратное сравнение нашего предсказания с данными приведенными выше на левой панели невозможно, поскольку в них изучался образец с гораздо большей электронной плотностью $n = 3.4 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Однако в целом поведение схоже: получена монотонно убывающая функция и при изменении давления до 5 Кбар критическая температура меняется в несколько раз.

Глава 5

Увеличение критической температуры за счёт изотопического замещения

В обычных сверхпроводниках с фононным механизмом электрон-электронного притяжения, замещение части атомов их более тяжёлыми изотопами приводит обычно к небольшому уменьшению критической температуры. Причина заключается в том, что стандартная критическая температура $T_c = 1.13\omega_D e^{-1/\lambda_{eff}}$ пропорциональна дебаевской частоте, которая, в свою очередь, уменьшается с увеличением типичной массы атомов M , в то время как эффективная константа спаривания λ_{eff} не зависит от M как это следует из теории Элиашберга для сверхпроводников с фононным спариванием [16]. Однако данные из недавних статей [5, 17] демонстрируют совершенно иное поведение: при замещении 35% атомов ^{16}O в SrTiO_3 на более тяжёлые изотопы ^{18}O критическая температура возрастает в 1.5 раза на всём промежутке исследованных электронных плотностей $4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} < n < 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

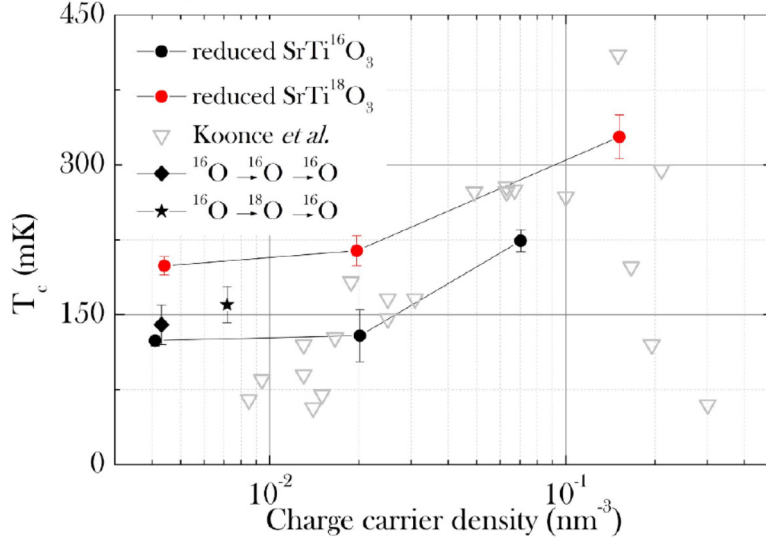


Рис. 5.1: Экспериментальный график из [5] для зависимости критической температуры от концентрации свободных электронов с изотопным замещением и без него.

Чтобы объяснить этот гигантский изотоп-эффект заметим, что при таком изотопическом замещении $SrTiO_3$ становится сегнетоэлектриком [18], откуда следует, что щель в оптическом спектре мягких фононов зануляется т.е. $\omega_T = 0$. Как результат, логарифмический интеграл для преобразования Фурье от потенциала $\tilde{V}^{iso}(\mathbf{k})$ расходится на нижнем пределе т.е. наша амплитуда увеличится и, как следствие, увеличится критическая температура. Кроме того, раз интеграл расходится, то вместо квадратичного разложения по импульсу придётся искать точное выражение. Для этого воспользуемся снова “трюком” с заменой кубической зоны Бриллюэна на сферическую. Будем искать разность $\Delta\tilde{V}(\mathbf{k}) = \tilde{V}^{iso}(\mathbf{k}) - \tilde{V}(\mathbf{k})$ тогда интеграл набирается на нижнем пределе и можно пользоваться линейным приближением для спектра. Берём интегралы по частоте замыкая контур интегрирования в верхней полуплоскости

$$\Delta\tilde{V}(\mathbf{k}) = -4\lambda^2 \frac{a^6 \omega_L^4}{s^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \int \left(\frac{1}{\epsilon^2 + (\mathbf{p} + \mathbf{k}a)^2} \frac{1}{\epsilon^2 + p^2} - \frac{1}{f^2(\epsilon, p)} \right) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{d\epsilon}{2\pi} = \quad (5.1)$$

$$= -\frac{1}{2\pi^2} \lambda^2 \frac{a^6 \omega_L^4}{s^3} \int \left(\frac{p^2}{2tpka + k^2 a^2} \frac{\sqrt{p^2 + 2tpka + k^2 a^2} - p}{p\sqrt{p^2 + 2tpka + k^2 a^2}} - \frac{p^2}{2\left(\frac{a^2}{s^2} \omega_T^2 + p^2\right)^{3/2}} \right) dp dt. \quad (5.2)$$

Рассмотрим первое слагаемое и обозначим $ka = q$ тогда интеграл по углу даст нам

$$\int \frac{p}{2tpka + k^2a^2} \frac{\sqrt{p^2 + 2tpka + k^2a^2} - p}{\sqrt{p^2 + 2tpka + k^2a^2}} dt = \frac{1}{q} \ln \left(\frac{2p + q}{p + |p - q|} \right). \quad (5.3)$$

Наконец, беря интеграл по импульсам

$$\Delta \tilde{V}(\mathbf{k}) = -W \left(\int_0^q \frac{1}{q} \ln \left(1 + \frac{2p}{q} \right) - \frac{p^2}{(\frac{a^2}{s^2} \omega_T^2 + p^2)^{3/2}} dp \right) - \quad (5.4)$$

$$- W \int_q^\infty \left(\frac{1}{q} \ln \left(\frac{2p + q}{2p - q} \right) - \frac{p^2}{(\frac{a^2}{s^2} \omega_T^2 + p^2)^{3/2}} \right) dp = \quad (5.5)$$

$$= -W \left(1 - \operatorname{arcsinh} \left(\frac{q}{2\kappa} \right) + \ln \frac{q + \sqrt{q^2 + 4\kappa^2}}{2q} \right). \quad (5.6)$$

И полный потенциал есть

$$\tilde{V}^{\text{iso}}(\mathbf{k}) = \Delta \tilde{V}(\mathbf{k}) + \tilde{V}(0) = -W \left(\ln \frac{\eta e}{ka} \right). \quad (5.7)$$

Используя формулу для амплитуды взаимодействия (2.12) получаем

$$f_0^{\text{iso}} = -W \ln \frac{\eta e^{3/2}}{2k_F a}. \quad (5.8)$$

Остаётся только найти отношение критических температур которое мы нашли в явном виде для наимизшей ($n_{low} = 5.4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$) и наивысшей ($n_{high} = 1.2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) из рассматриваемых концентраций.

$$\left(\frac{T_c^{\text{iso}}}{T_c} \right)_{n_{low}} = 2.5 \quad \left(\frac{T_c^{\text{iso}}}{T_c} \right)_{n_{high}} = 1.8 \quad (5.9)$$

Увы, данные представленные на рисунке выше для изотоп замещения начинаются с более высоких концентраций $n = 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ что не позволяет сравнить наши результаты напрямую. Однако общая тенденция выглядит весьма схоже. Заметим, что при более слабом изотопическом

замещении ω_T может быть только частично подавлена, так что увеличение критической температуры будет меньшим. Можно найти численным интегрированием критическую температуру как функцию щели поперечных мод оптического спектра ω_T . Процедура будет аналогична описанной в этом разделе с тем отличием, что на этапе формулы (5.2) нужно будет интегрировать численно. Получаем график ниже.

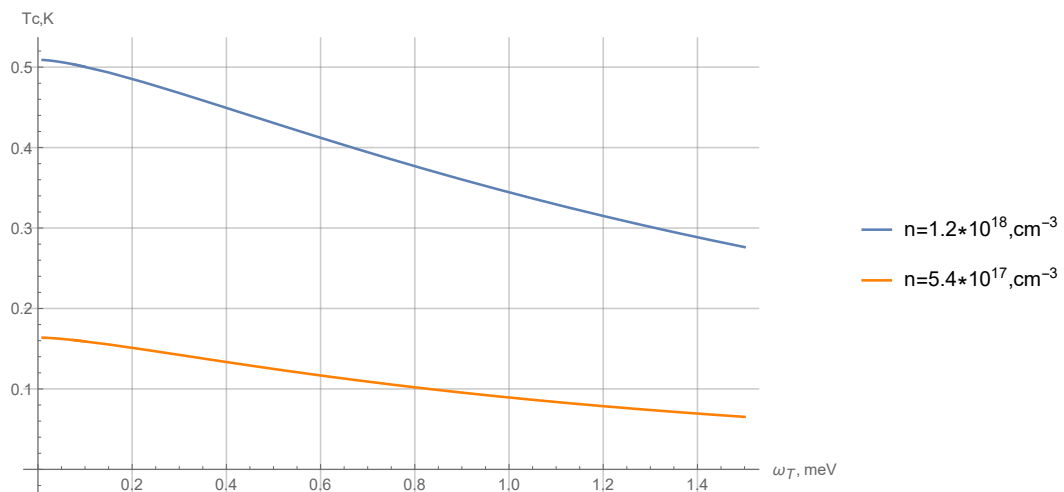


Рис. 5.2: Теоретическое предсказание для зависимости критической температуры от щели в спектре поперечных оптических мод для двух различных концентраций.

Он может служить предсказанием для дальнейших экспериментов по изотоп-замещению кислорода в титанате стронция.

Глава 6

Заключение

На основе работ [1,2] была развита теория способная предсказать температуру перехода в слабодопированном титанате стронция при плотности электронных состояний $n \leq n_{c1} = 1.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. В ней присутствует один подгоночный параметр λ который определяет взаимодействие электрона с парой поперечных оптических фононов. Сравнение с экспериментальными данными из [3] позволяет определить $\lambda \sim 1.1$ что довольно близко к значению найденному недавно в [19] $\lambda \approx 0.9$ совершенно иным методом. Развита теория находится в хорошем соответствии с экспериментами по влиянию на критическую температуру изотоп-эффекта [5, 17] и гидростатического давления [4].

Использованный предел малых концентраций свободных электронов продиктован в первую очередь желанием сосредоточиться на простейшей ситуации когда только первая зона заполняется проводящими электронами. При $n \geq n_{c1}$ когда начинает заполняться вторая зона проводимости [3] необходимы более сложные вычисления.

Кроме того, следует обратить внимание на тот факт, что было использовано приближение статического потенциала которое оправдано при $E_F < \hbar\omega_T$ однако E_F достигает $\hbar\omega_T$ уже при $n \geq 7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Однако можно оценить коэффициент при первом ненулевом порядке в разложении по малости энергий. Для этого учтём временную динамику, тогда выражение для потенциала будет выглядеть так

$$V(\mathbf{k}, \epsilon) = -4m^2g^2 \int d^3q d\omega D_0(\mathbf{q} + \mathbf{k}, \omega + \epsilon) D_0(\mathbf{q}, \omega). \quad (6.1)$$

Аналогично тому как мы искали квадратичную поправку по импульсам в Главе 3 можно найти первую исчезающую поправку по ϵ к потенциалу

на нулевом импульсе. Получится

$$V(0, \epsilon) \approx -W \left(\ln \left(\frac{\eta}{\kappa} \right) - \frac{\epsilon^2}{3\omega_T^2} \right). \quad (6.2)$$

Сам логарифм весьма велик ~ 4 , т.е. с единицей следует сравнивать величину $\sim \frac{1}{10} \frac{E_F^2}{\omega_T^2}$ - формальный параметр малости становится меньше. Не настолько чтобы совсем забыть про его существование, но всё же этот эффект будет проявлять себя при концентрациях больших чем $7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Также следует заметить, что некоторые эффекты которыми мы пренебрегли совершенно не обязаны быть малыми. Тем не менее они такими оказываются при детальной оценке, в первую очередь следует упомянуть зависимость эффективной щели ω_T от концентрации. Глядя на исходное действие, несложно понять, что если считать плотность электронов равномерно “размазанной” в пространстве, то $\psi^\dagger \psi$ даст нам просто их концентрацию и член взаимодействия даст поправку к третьему члену в действии. Т.е. казалось бы, мы должны заменить $\omega_T^2 \rightarrow \omega_T^2 + 2gn$. Эта замена привела бы к значительной поправке к текущему результату. Однако сравнение с экспериментом [20] показывает гораздо меньшее увеличение щели, порядка $\Delta\omega^2 \approx 0.3gn$ что не приводит к сколь угодно значительному увеличению щели на области наших концентраций. Отличие, по видимому, заключается в том, что ТО фононы взаимодействуют описанным образом как с электронами проводимости, так и с ионными дефектами, что и приводит к подавлению этого эффекта.

Следует упомянуть также, что при использовании соотношения Лиддана-Сакса-Теллера мы пренебрегли зависимостью щели продольных оптических фононов от давления согласно экспериментальным данным из [21].

Список литературы

- [1] K. L. Ngai, Phys. Rev. Lett. **32**, 215 (1974)
- [2] Л.П.Горьков и Т.К.Мелик-Бархударов, ЖЭТФ, **40**, 1452-1458 (1961)
- [3] Xiao Lin, German Bridoux, Adrien Gourgout, Gabriel Seyfarth, Steffen Kramer, Marc Nardone, Benoit Fauque, and Kamran Behnia, Phys. Rev. Lett. 112, 207002 (2014).
- [4] C. Enderlein, J. Ferreira de Oliveira, D. A. Tompsett, E. Baggio Saitovitch, S. S. Saxena, G. G. Lonzarich and S. E. Rowley, "Superconductivity mediated by polar modes in ferroelectric metals", Nature Comm. (2020), <https://doi.org/10.1038/s41467-020-18438-0>
- [5] A. Stucky, G. W. Scheerer, Z. Ren, D. Jaccard, J.-M. Pouchard, C. Barreateau, E. Giannini and D. van der Marel, Scientific Reports, 6:37582 (2016) DOI: 10.1038/srep37582
- [6] A. Spinelli, M. A. Torija, C. Liu, C. Jan, and C. Leighton, Electronic Transport in Doped SrTiO₃: Conduction Mechanisms and Potential Applications, Phys. Rev. B 81, 155110 (2010).
- [7] J. F. Schooley, W. R. Hosler, E. Ambler, J. H. Becker, M. L. Cohen, and C. S. Koonce, Dependence of the Superconducting Transition Temperature on Carrier Concentration in Semiconducting SrTiO₃, Phys. Rev. Lett. 14, 305 (1965).
- [8] H. Suzuki, H. Bando, Y. Ootuka, I. H. Inoue, T. Yamamoto, K. Takahashi, and Y. Nishihara, Superconductivity in Single-Crystalline Sr_{1-x}La_xTiO₃, J. Phys. Soc. Jpn. 65, 1529 (1996)
- [9] Xiao Lin, Zengwei Zhu, Benoit Fauque, and Kamran Behnia, Fermi Surface of the Most Dilute Superconductor PHYSICAL REVIEW X 3, 021002 (2013)

- [10] Appel, J. Soft-Mode Superconductivity in $SrTiO_{3-x}$. Phys. Rev. 1969, 180, 508–516
- [11] Eagles, D.M. Possible Pairing without Superconductivity at Low Carrier Concentrations in Bulk and Thin-Film Superconducting Semiconductors. Phys. Rev. 1969, 186, 456–463.
- [12] Gor'kov, L.P. Phonon mechanism in the most dilute superconductor n-type SrTiO₃. PNAS 2016, 113, 4646–4651.
- [13] Klimin, S.N.; Tempere, J.; van der Marel, D.; Devreese, J.T. Microscopic mechanisms for the Fermi-liquid behavior of Nb-doped strontium titanate. Phys. Rev. B 2012, 86, 045113.
- [14] Jarlborg, T. Tuning of the electronic screening and electron-phonon coupling in doped SrTiO₃ and WO₃. Phys. Rev. B 2000, 61, 9887–9890
- [15] Clerment Collignon, Yudai Awashima, Ravi, Xiao Lin, Carl Willem Rischau, Anissa Acheche, Baptiste Vignolle, Cyril Proust, Yuki Fuseya, Kamran Behnia, and Benoit Fauquier, Quasi-isotropic orbital magnetoresistance in lightly doped SrTiO₃, arXiv:2101.09062
- [16] Г.М.Элиашберг, "Взаимодействие между электронами и решёточными колебаниями в сверхпроводнике", ЖЭТФ 38, 966 (1960);
- [17] Tomioka, Y., Shirakawa, N., Shibuya, K. Inoue, I. H "Enhanced superconductivity close to a non-magnetic quantum critical point in electron-doped strontium titanate", Nat. Commun. 10, 738 (2019).
- [18] M. Itoh, R. Wang, Y. Inaguma, T. Yamaguchi, Y.-J. Shan, and T. Nakamura, "Ferroelectricity Induced by Oxygen Isotope Exchange in Strontium Titanate Perovskite", Phys. Rev. Lett. 82, 3540 (1999).
- [19] Kh. G. Nazaryan and M. V. Feigel'man, arxiv:2103.11425
- [20] J. L. M. van Mechelen, D. van der Marel, C. Grimaldi, A. B. Kuzmenko, N. P. Armitage, N. Reyren, H. Hagemann, and I. I. Mazin, "Electron-Phonon Interaction and Charge Carrier Mass Enhancement in SrTiO₃", PRL 100, 226403 (2008)
- [21] Частные обсуждения с D. van der Marel.