Сверхпроводимость при электрон-фононном взаимодействии: Теория Элиашберга

1) $H_0 = \sum_{\bar{k},\sigma} \xi_k a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} + \hbar \sum_{q<q_m} \omega_q b^+_q b_q$

$H = H_0 + H_{e-ph}$

$H_{e-ph} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\bar{p},\bar{q}<q_m} \alpha_{\vec{q}}\, a^+_{\bar{p}+\bar{q}} a_{\bar{p}} (b_{\bar{q}} + b^+_{-\bar{q}})$

$Q_{\bar{q}}$ - оператор смещений атомов в фурье-предст.

b^+_q - оператор рождения фонона

$Q_{\vec{q}} = \frac{b_{\vec{q}}}{\sqrt{2\bar{\rho}\,\omega(q)}}$

$$\boxed{\alpha^2_{\vec{q}} \simeq \lambda_{eph} \frac{\pi^2}{p_F m} \omega_q \equiv g^2 \frac{\omega_q}{2}}$$

(при малых q) $\leftarrow$ $\boxed{\omega_q \simeq sq}$

Тогда λ_{e-ph} - безразмерная постоянная $\lesssim 1$

Множители $\sqrt{\omega_q}$ написаны так, чтобы приводить к взаимодействию типа деформационного потенциала: $(\operatorname{div}\vec{u})\cdot\psi^+(x)\psi(x)$

Вообще говоря, в реальных кристаллах функция $\alpha_{\vec{q}}$ есть функция обоих импульсов электронов: $\alpha_{\bar{p},\bar{p}'}$ а не просто $\alpha_{\bar{q}}$

Операторы фононного поля можно определить как $\varphi(\bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_q \sqrt{\frac{\omega_q}{2}}\left[b_q e^{i\vec{q}\vec{r}-i\omega_q t} + b_q^+ e^{-(i\vec{q}\vec{r}-i\omega_q t)}\right]$

Тогда $H_{e-ph} = g\int \psi_\sigma^+(\bar{x})\psi_\sigma(\bar{x})\varphi(x)\,d^3x$ $\boxed{g^2=\lambda_{eph}\frac{2\pi^2}{mp_F}}$

Цель последующих вычислений:

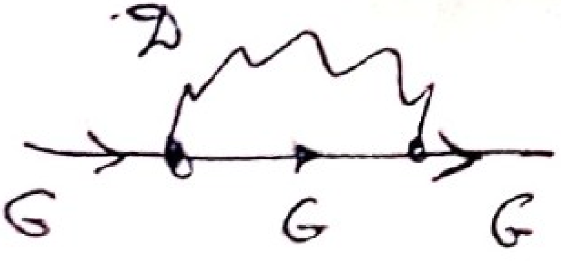
- Дать общее представление о способе построения теории сверхпроводимости для конкретных материалов
- Ответить на простой и общий вопрос: откуда берется утверждение про “изотопический эффект” в сверхпроводимости, согласно коему

$$T_c \sim M^{-1/2}$$

то есть весь эффект идет от ω_D а константа связи не меняется.

Г. М. Элиашберг, ЖЭТФ **38**, 966 (1960) - первая работа

"Теорема Мигдала": по параметру $\omega_D/E_F \sim \sqrt{m/M} \sim 10^{-2}$ все поправки к вершине эл.-фон. связи и к функции Грина фононов $\mathcal{D}(\bar{x}-\bar{x}')$ малы!



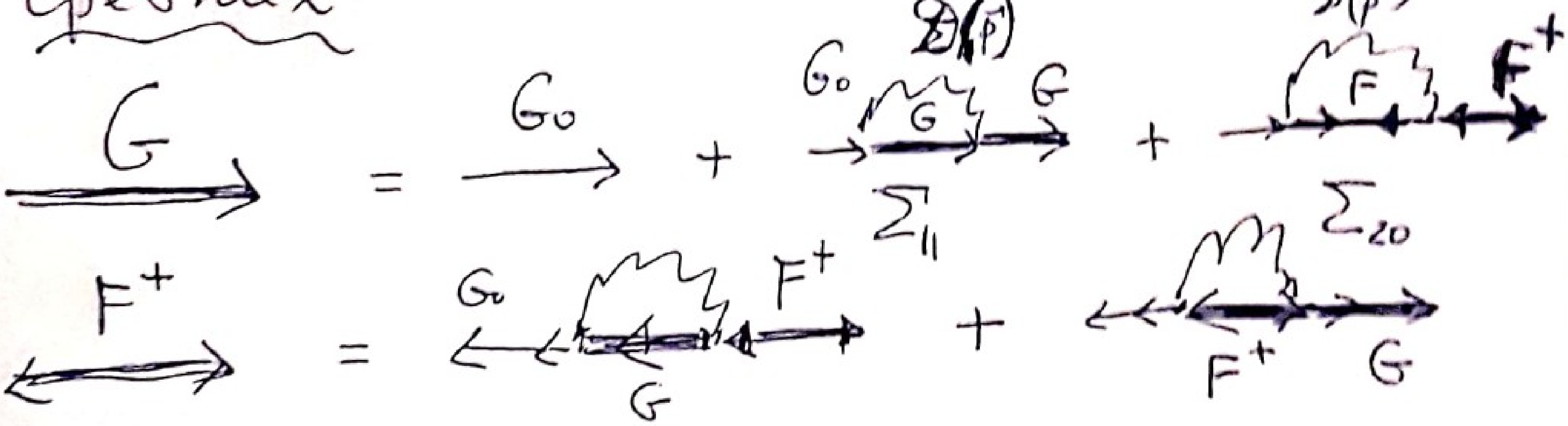
$$\mathcal{D}(\omega,q) = \frac{\omega_q}{2}\left[\frac{1}{\omega-\omega_q+i\delta} - \frac{1}{\omega+\omega_q-i\delta}\right]$$

Мацубаровские частоты:

$$\omega_n = 2\pi n T$$

$$\mathcal{D}(\omega_n,q) = -\frac{\omega_q^2}{\omega_n^2+\omega_q^2}$$

② Уравнения для ф.Г. при наличии аномальных средних



$$\Sigma_{11}(\bar p,\omega_n) = -T\sum_m \int (d\vec k)\, g^2\, \mathcal{D}(\bar p-\bar k, \omega_n-\omega_m)\, G(\bar k,\omega_m)$$

$$\Sigma_{20}(\bar p,\omega_n) = -T\sum_m \int (d\vec k)\, g^2\, \mathcal{D}(\bar p-\bar k, \omega_n-\omega_m)\, F(\bar k,\omega_m)$$

Уравнения Дайсона:

$$\begin{cases} \left(i\omega_n - \xi_p - \Sigma_{11}(\bar p,\omega_n)\right) G(\bar p,\omega_n) - \Sigma_{20}(p,\omega_n)\, F^{+}(\bar p,\omega_n) = 1 \\ \left[-i\omega_n - \xi_p - \Sigma_{11}(-\bar p,-\omega_n)\right] F^{+}(p,\omega_n) + \Sigma^{+}_{20}(p,\omega_n) = 0 \end{cases}$$

Решение матричного у-ния Дайсона: (5)

$$G(\bar p,\omega_n) = -\frac{i\omega_n + \xi_p + \Sigma_{11}(-\bar p,-\omega_n)}{\omega_n^2 + \xi_p^2 + \Sigma_{11}(\bar p,\omega_n)\times(i\omega_n+\xi_p) - \Sigma_{11}(-\bar p,-\omega_n)\times(i\omega_n-\xi_p) + \Sigma_{11}(p)\Sigma_{11}(-p) + \Sigma_{20}(\bar p,\omega_n)\Sigma^{+}_{20}(\bar p,\omega_n)}$$

Det $\longrightarrow$

$$F^{+}(\bar p,\omega_n) = \frac{-\Sigma^{+}_{20}(\bar p,\omega_n)}{\mathrm{Det}}$$

Σ_{20} играет роль Δ из BCS

$\Sigma_{11}(\omega_n)$ содержит части четные и нечетные по ω_n

По знаку $\vec{p}$ они все четные

$= \phi(E, \omega_n)$

$$\boxed{\Sigma_{20}(\omega_n) = \Sigma_{20}(-\omega_n) =}$$

для „обычной" сверхпроводимости

Гипотеза о возможности спаривания с нечетной $\Sigma_{20}(\omega)$ высказана В.Л. Березинским (1974)

Далее будем решать уравнения для self-energy выделив четную и нечетную части:

$$\frac{1}{2}\left[\Sigma_{11}(\bar{k},\omega_n)-\Sigma_{11}(\bar{k},-\omega_n)\right] \equiv i\omega_n\left[1-Z(\bar{k},\omega_n)\right]$$

$$\frac{1}{2}\left[\Sigma_{11}(\bar{k},\omega_n)+\Sigma_{11}(\bar{k},-\omega_n)\right] \equiv \chi(\bar{k},\omega_n)$$

это фактически сдвиг хим потенциала

(4)

$$Z(\bar{k},\omega_n) = 1 + T\sum_{\omega_m}\int d\bar{k}'\, g^2 \chi(k-k';\omega_n-\omega_m)(\omega_m/\omega_n)\frac{Z(\bar{k}',\omega_m)}{\omega_m^2 Z^2(\bar{k}',\omega_m) + (\xi_{k'} + \chi(\bar{k}',\omega_m))^2 + \phi^2(\bar{k}',\omega_m)}$$

(1)

$$\chi(\bar{k},\omega_n) = -T\sum_m \int d\bar{k}'\, g^2 \chi(\bar{k}-\bar{k}',\omega_n-\omega_m)\frac{\xi_{\bar{k}'} + \chi(\bar{k}',\omega_m)}{\omega_m^2 Z^2(\bar{k}',\omega_m) + (\xi_{k'} + \chi(k',\omega_m))^2 + \phi^2(\bar{k}',\omega_m)}$$

(2)

и уравнения на „параметр порядка"

(3)

$$\phi(\bar{k},\omega_n) = T\int d\bar{k}'\sum_m \left[g^2 \chi(k-k',\omega_n-\omega_m) - V^C_{\bar{k}\bar{k}'}\right]\frac{\phi(\bar{k}',\omega_m)}{\omega_m^2 Z^2(\bar{k}',\omega_m) + (\xi_{k'} + \chi(k',\omega_m))^2 + \phi^2(\bar{k}',\omega_m)}$$

$\leftarrow$ кулоновский член, добавлен

Кроме того, т.к. учет $\chi(\bar{k},\omega_n)$ приводит к сдвигу хим. потенциала, надо также написать уравнение на него, фиксировав плотность эл-нов:

$$n_e = -2T\sum_{\omega_m}\int(d\bar{k}')\,\frac{\varepsilon_{k'}-\mu+\chi(\bar{k}',\omega_m)}{\omega_m^2 Z^2(\bar{k}',\omega_m)+(\varepsilon_{k'}-\mu+\chi(k',\omega_m))^2+\phi^2_{(k',\omega_m)}}$$

Функция $\chi(\bar{k},\omega_n)$ отлична от нуля только при учете зависимости исходной плотности состояний $\nu(E)$ от E вблизи E_F. Если этим не интересоваться, т.е. положить $\nu(E)=\nu(E_F)=\nu_0$, то $\chi(k,\omega_n)=0$, уравнение для n_e также тривиально удовлетворяется.

Тогда остаются только 2 уравнения - на функции Z и ϕ

Обобщение для реальных металлов

Выше использована модель деформационного потенциала для акустических фононов, когда взаимодействие электронов с ними сводится к постоянной g, такой, что

$$g^2 = \frac{\lambda_{e\text{-}ph}}{\nu(E_F)} \qquad \nu(E_F) = \frac{m p_F}{2\pi^2\hbar^2} \qquad \lambda_{e\text{-}ph} \text{ - безразмер}$$

Такое представление удобно только в пределе $q \to 0$, в то время как реально главный вклад идет от фононов —

$q \sim K_{BZ}$ и $\omega \sim \omega_D$. В большинстве
литературе по э.-фон. вз. в научных
используется другое определение
фононной ф. Г., мы ее здесь обозначим

$$\tilde{D}(\omega,\bar{q}) = \frac{2}{\omega_q} D(\omega,q) = \left[\frac{1}{\omega-\omega_q-i\delta} - \frac{1}{\omega+\omega_q-i\delta}\right]$$

Вместо $g^2 D(\omega,\bar{q})$ будем писать $\alpha_q^2 \tilde{D}(\omega,\bar{q})$

где α_q - исходный матричный элемент

e-ph взаимодействия

Наша цель состоит сейчас в преобразовании уравнений (1)+(3) к виду, удобному для сравнения с эксп. данными по электр-фононным свойствам металлов.

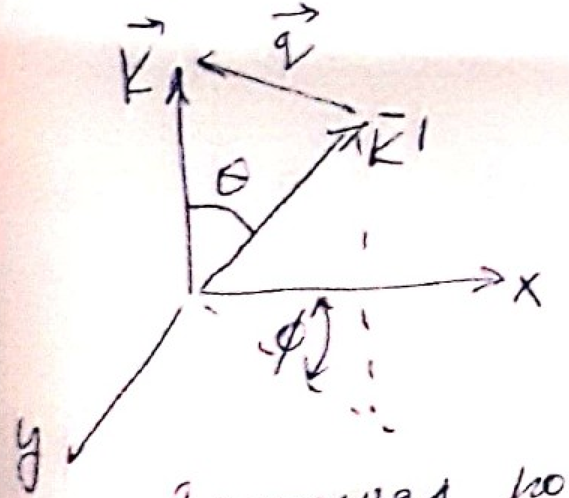
$$Z(\bar{k},\omega_n) = 1 + T\sum_{\omega_m}\int d\bar{k}' \frac{g^2 \mathcal{D}(\bar{k}-\bar{k}';\omega_n-\omega_m)(\omega_m/\omega_n)\, Z(\bar{k}',\omega_m)}{\omega_m^2 Z^2(\bar{k}',\omega_m) + (\xi_{k'} + \chi(\bar{k}',\omega_m))^2 + \phi^2(\bar{k}',\omega_m)} \quad (1)$$

$$\phi(\bar{k},\omega_n) = T\int d\bar{k}' \sum_m \left[g^2 \mathcal{D}(k-k';\omega_n-\omega_m) - V^c_{\bar{k}\bar{k}'}\right] \frac{\phi(\bar{k}',\omega_m)}{\omega_m^2 Z^2(\bar{k}',\omega_m) + (\xi_{k'} + \chi(k',\omega_m))^2 + \phi^2(\bar{k}',\omega_m)} \quad (3)$$

кулоновский член, добавлен

Для преобразования интеграла $d\vec{K}'$ важно, что энергии фононов $\lesssim \omega_D \ll E_F$

Поэтому импульсы электрона $\vec{K}$ и $\vec{K}'$ лежат вблизи Ферми-поверхности



$$\int \frac{d^3K'}{(2\pi)^3} \simeq \nu_0 \int dS_{K'} \int \frac{q\,dq}{2p_F^2}$$

$$-d\left(\frac{q^2}{2p_F^2}\right) = d(\cos\theta)$$

Интеграл по $d\cos\theta = -d\left(\frac{q^2}{2p_F^2}\right)$ сводится к усреднению $\alpha_q^2 \tilde{D}(\omega,\vec{q})$ по Ферми-поверхности

При этом ~~мы~~ используем спектральное представление для $\tilde{\mathcal{D}}(\omega,\vec{q})$:

$$\tilde{\mathcal{D}}(q, i\omega_n) = -\int_0^\infty d\Omega \, \frac{2\Omega}{\Omega^2+\omega_n^2} \mathcal{F}(q,\Omega)$$ ← фононная спектральная плотность

$$Z_{stat} \equiv \sum_n e^{-E_n/T}$$

$$\mathcal{F}(q,\Omega) = \frac{1}{Z_{stat}}\left[(1-e^{-\Omega/T})\sum_{nm} e^{-E_n/T} |\langle m|b_q + b^+_{-q}|n\rangle|^2 \delta(\Omega - E_{mn})\right]$$

При $T \ll \omega_D$ сводится к $\delta(\Omega-\omega_{\vec{q}})$

Таким образом интеграл по углу $d(\cos\theta)$

$$\int (d\bar{k}')\, \alpha^2_{\bar{k}-\bar{k}'}\, \tilde{D}(\omega, k-k')\, X(\xi_{k'}) =$$

$$= -\int_0^\infty d\omega \frac{2\omega}{\omega^2+\omega_n^2} \int d\xi_{\bar{k}'}\, \nu_0 \int d\Omega_{k'}\, \alpha^2_{\bar{k}-\bar{k}'}\, F(\bar{k}-\bar{k}', \omega)\, X(\xi_{k'})$$

$$= -\int_0^\infty d\omega \frac{2\omega}{\omega^2+\omega_n^2} \boxed{\alpha^2 F_{\bar{k}}(\omega)} \int d\xi_{k'}\, X(\xi_{k'})$$

эффективный эл-фон. матр элемент

Обычно его можно усреднить по ф.п. избавившись от зависимости от $\vec{k}$:

$$\boxed{\alpha^2 F(\omega) \equiv \frac{1}{\int_{\text{ф.п.}} d^2 k} \int_{\text{ф.п.}} d^2 k \int_{\text{ф.п.}} \nu_0\, d\Omega_{k'} \sum_\lambda |\alpha_\lambda(\bar{k}-\bar{k}')|^2\, \delta(\omega - \omega_\lambda(\bar{k}-\bar{k}'))}$$

X(ξ) – обозначает все, что осталось справа в у-ях (1),(3)

Индекс λ означает суммирование по поляризациям фононов

Новое обозначение: $\boxed{\lambda(\omega_n) \equiv \int_0^\infty \frac{2\omega\, \alpha^2 F(\omega)\, d\omega}{\omega^2 + \omega_n^2}}$

Это эффективная „константа связи“ имеющая частотную дисперсию.

При $\omega_n \to 0$ остается $\lambda = \int_0^\infty \frac{2\alpha^2 F(\omega)\, d\omega}{\omega}$

логарифмически взвешенная по спектру

В уравнения на $Z(\omega)$ и $\phi(\omega)$ входит именно функция $\lambda(\omega)$

F. Marsiglio, “Eliashberg theory: a short review”, Annals of Physics **417**, 168102 (2020).

F. Marsiglio

Journal of Low Temperature Physics, Vol. 87, Nos. 5/6, 1992

Пренебрегая пространственной дисперсией,
переходим от $\int\limits_{BZ}(dk)$ к интегралу $\int d\varepsilon\, \nu(\varepsilon)$

$\boxed{\text{для } \vec{k}-\vec{k}'}$ по электронной зоне провод.

При этом кулоновский член во 2-ом уравнении
надо ограничить на область $\varepsilon \in [\varepsilon_{min}, \varepsilon_{max}]$
$= [-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$

Эквивалентным образом можно
исключить расходимость, если
ограничить суммирование по ω_m :

$$
\begin{cases}
Z(\omega_n) = 1 + \dfrac{\pi T}{\omega_n} \sum\limits_m \lambda(\omega_n - \omega_m) \dfrac{\omega_m}{\sqrt{\omega_m^2 + \Delta^2(\omega_m)}} \\[2ex]
\Delta(\omega_n) Z(\omega_n) = \pi T \sum\limits_m \left[\lambda(\omega_n - \omega_m) - \overbrace{V}^{\nu(0)} \theta\left(\dfrac{W}{2} - |\omega_m|\right) \right] \dfrac{\Delta(\omega_m)}{\sqrt{\omega_m^2 + \Delta^2(\omega_m)}}
\end{cases}
$$

V – это постоянная, оставшаяся от кулоновского члена

Мы сделали замену $\Phi(\omega_n) \equiv Z(\omega_n)\Delta(\omega_n)$

Теперь можно решить уравнение на $\Delta(\omega_n)$ в области $\omega_D < |\omega_m| < W/2$, где Δ очень мало

Это сводится к замене

$$V \to V^* = \frac{V}{1 + V \ln \frac{W/2}{\omega_D}} \qquad \nu_0 V^* \equiv \mu^*$$

Окончательно, получаем у. Э. в виде:

$$\begin{cases} Z(\omega_n) = 1 + \dfrac{\pi T}{\omega_n} \sum\limits_m \lambda(\omega_n - \omega_m) \dfrac{\omega_m}{\sqrt{\omega_m^2 + \Delta^2(\omega_m)}} \\ \Delta(\omega_n) Z(\omega_n) = \pi T \sum\limits_m \left[\lambda(\omega_n - \omega_m) - \mu^* \theta(\omega_D - |\omega_m|) \right] \dfrac{\Delta(\omega_m)}{\sqrt{\omega_m^2 + \Delta^2(\omega_m)}} \end{cases}$$

Обратно к BCS: $\lambda(\omega_n) = \begin{cases} \lambda & \text{if } |\omega_n| < \omega_D \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$

$$\lambda = \int_0^\infty \frac{2\alpha^2 F(\Omega) d\Omega}{\Omega}$$

$$Z(\omega_n) = 1 + \frac{\pi T}{\omega_n} \sum_m \lambda(\omega_n - \omega_m)\, \mathrm{sgn}(\omega_m) = 1 + \lambda$$

здесь пренебрегли $\Delta \ll \omega_D$

Тогда

$$\Delta(\omega_n, T) = \begin{cases} \Delta(T), & |\omega_n| < \omega_D \\ 0, & |\omega_n| > \omega_D \end{cases}$$

$$\Delta(T) = \frac{\lambda - \mu^*}{1+\lambda} \pi T \sum_{|\omega_m| < \omega_D} \frac{\Delta(T)}{\sqrt{\omega_m^2 + \Delta^2(T)}}$$

что совпадает с BCS при $\lambda_0 = \dfrac{\lambda - \mu^*}{1+\lambda}$

Полная теория Элиашберга может быть использована когда есть данные о функции $\alpha^2F(\omega)$ и величине μ^*

Для простых металлов можно извлекать эти данные из экспериментов по туннельной плотности состояний [McMillan and J. Rowell 1969]

Phys. Rev. Lett. **14**, 108 (1965)

Изотопический эффект

При $\mu^* = 0$ $\quad T_c \sim \omega_D \exp\left[-\frac{1+\lambda}{\lambda}\right]$

λ не зависит от ω_D

$$\lambda = 2\int_0^\infty \frac{\alpha^2 F(\omega)\,d\omega}{\omega} \equiv 2\int_0^\infty \frac{\alpha^2 F(\omega\sqrt{M})\,d\omega}{\omega}$$

Логарифмическое среднее по спектру не зависит от M

Поэтому $\frac{d\ln T_c}{d\ln M} \equiv -\beta = -\frac{1}{2}$

Учет μ^* меняет β ! $\qquad \mu^* = \frac{\mu}{1+\mu\ln\frac{E_F}{\omega_D}}$

$\frac{d\mu^*}{d\ln M} = -\frac{1}{2}(\mu^*)^2$, тогда используем

$T_c = \omega_D \exp\left[-\frac{1+\lambda}{\lambda-\mu^*}\right]$ получим

$$\beta = -\frac{d\ln T_c}{d\ln M} = \frac{1}{2}\cdot\left[1 - \frac{(1+\lambda)(\mu^*)^2}{(\lambda-\mu^*)^2}\right] < 1/2$$