

## L1<sub>2</sub> 超导体的 T<sub>c</sub> 表达式

王 荣 耀      罗 槩 光      张 校  
(清华大学物理系)    (中国科学院物理研究所)    (清华大学物理系)  
1984年5月24日收到

### 提 要

通过对 L1<sub>2</sub> 超导体的研究,我们得出了这类超导体临界温度的表达式

$$T_c = \frac{15.9T_B V(B)G_A}{\sqrt{\bar{M}} \bar{V}(L1_2)G_B}$$

其中 T<sub>B</sub> 是 B 组元的超导转变温度, V(B) 是 B 组元的原子体积,  $\bar{V}(L1_2)$  为 L1<sub>2</sub> 化合物的平均原子体积,  $\bar{M}$  是 L1<sub>2</sub> 化合物的平均原子量, G<sub>A</sub>, G<sub>B</sub> 分别为 A 组元、B 组元的 Gordy 电负性值。

L1<sub>2</sub> 化合物为 AB<sub>3</sub> 型的金属互化物。在 L1<sub>2</sub> 化合物的 AB<sub>3</sub> 结构中, 二类线性链平行交替排列, 一类是 B 原子构成的线性链: B—B—B—B—B···; 另一类是 A, B 原子混合构成的线性链 B—A—B—A—B···。在晶体空间, 经过每个 B 原子, 交叉通过 6 列线性链, 链之间的夹角  $\varphi = 60^\circ$ ,  $\psi = 90^\circ$ , 这 6 列线性链分别平行晶体方向 [110], [101], [011], [ $\bar{1}10$ ], [10 $\bar{1}$ ], [0 $\bar{1}1$ ]。

我们通过对大量实验数据的研究, 发现 L1<sub>2</sub> 超导体的 T<sub>c</sub> 与化合物的平均原子量  $\bar{M}$  之间, 也有如下关系:

$$T_c \propto \frac{1}{\sqrt{\bar{M}}}$$

A 原子、B 原子吸引电子的能力与 Gordy 电负性值 G<sub>A</sub>, G<sub>B</sub> 有关。L1<sub>2</sub> 超导体的实验数据表明<sup>[1]</sup>:

$$T_c \propto \frac{G_A}{G_B}$$

$\frac{G_A}{G_B}$  表明, B 原子对价电子吸引愈弱, 愈有利于 T<sub>c</sub> 的提高。

60 多种 L1<sub>2</sub> 超导体中, 40 多种 L1<sub>2</sub> 超导体的平均原子体积  $\bar{V}(L1_2)$  都小于组元 B 纯元素的原子体积 V(B)<sup>[2]</sup>。所以  $\frac{V(B)}{\bar{V}(L1_2)}$  这个量强烈地反映了在 L1<sub>2</sub> 超导体中组元的体积受压缩的程度, 这项值大, 反映了电子-声子耦合作用强, 有利于 T<sub>c</sub> 的提高<sup>[3]</sup>。所以

$$T_c \propto \frac{V(B)}{\bar{V}(L1_2)}$$

综上所述, 我们导出了 L1<sub>2</sub> 超导体 T<sub>c</sub> 的表达式如下:

$$T_c = \frac{15.9T_B V(B)G_A}{\sqrt{\bar{M}} \bar{V}(L1_2)G_B}$$

$T_B$  在表达式中起很重要的作用。在文献 [3] 中, Dew-Hughes 的 A15 表达式只适用于周期表的 VB 族, 也就是说对  $A_3B$  型的 A15 超导体使用 Dew-Hughes<sup>[3]</sup> 表达式计算  $T_c$  时, 基组元只能是 V 基、Nb 基、Ta 基。当周期表中其他元素作为 A15 超导体的基组元时, Dew-Hughes<sup>[3]</sup> 的  $T_c$  表达式就要重新改进, 否则就不能适应。而我们的  $L1_2$  超导体的  $T_c$  表达式确能适用于整个周期表内, 特别是对化合物的  $T_c$  计算时,  $L1_2$  化合物的基组元, 既可以是过渡元素, 也可以是非过渡元素。

从 60 多种  $L1_2$  超导体中(目前  $L1_2$  化合物总量为 172 种), 我们列出所有  $T_c \geq 0.87K$  的实验值与计算值(见表 1)。

表 1

$AB_3^{[4]}$	$T_B(K)$	$a(\text{\AA})^{[4]}$	$G_A:G_B$	$T_c(K)$ (实)	$T_c(K)$ (计)	$AB_3^{[4]}$	$T_B(K)$	$a(\text{\AA})^{[4]}$	$G_A:G_B$	$T_c(K)$ (实)	$T_c(K)$ (计)
$Bi_{0.26}Ti_{0.74}$	2.39	4.677*	1.8:1.5	4.15	3.6	ThPb <sub>3</sub>	7.175	4.853	1.4:1.8	5.55	6.5
CaTi <sub>3</sub>	2.39	4.804	1.0:1.5	2.0	2.0	ThSn <sub>3</sub>	3.7	4.714	1.4:1.8	3.33	3.9
InLa <sub>3</sub>	5.4	5.07	1.5:1.1	9-10.4	1.2	ThTi <sub>3</sub>	2.39	4.748	1.0:1.9	0.87	1.5
LaPb <sub>3</sub>	7.175	4.903	1.1:1.8	4.10	5.2	TiLa <sub>3</sub>	5.4	5.06	1.5:1.1	8.86	1.1
LaSn <sub>3</sub>	3.732	4.771	1.1:1.7	6.02	3.4	YPb <sub>3</sub>	7.175	4.813	1.2:1.8	4.72	6.2
LaTi <sub>3</sub>	2.39	4.806	1.1:1.9	1.63	1.7	YTl <sub>3</sub>	2.39	4.678	1.2:1.9	1.52	2.0
LuGa <sub>3</sub>	1.196	4.191	1.2:1.5	2.3	1.7	YbAl <sub>3</sub>	1.175	4.203	1.1:1.5	0.94	1.5
NaPb <sub>3</sub>	7.236	4.884	0.9:1.6	5.62	5.3	ZrHg <sub>3</sub>	3.949	4.365	1.5:1.8	3.28	4.5

\* 仅  $Bi_{0.26}Ti_{0.74}$  的  $a$  值为作者的计算值, 其他  $L1_2$  超导体的  $a$  值都为实验值。

感谢清华大学徐亦庄和卢谦教授, 丁孝弘、秦明华和许崇桂副教授, 刘学臣、杜树立、纪恩源等同志, 她们在工作中给予了支持与帮助。

## 参 考 文 献

- [1] W. Gordy *et al.*, *J. Chem. Phys.*, **24**(1956), 439.
- [2] W. R. Pearson, *The Crystal Chemistry and Phys. of Metals and Alloys*, Wiley Interscience, New York, (1972), p. 145, p. 151.
- [3] D. Dew-Hughes, *Cryogenics*, **15**(1975), 435.
- [4] F. Laves, *Theory of Alloy Phase*, American Society for Metals, Cleveland, (1956), p. 184; M. V. Nevitt, *Electronic Structure and Alloy Chemistry of the Transition Elements*, Interscience, New York, (1963), p. 163; E. M. Савицкий и др., *Сверхпроводящие материалы, металлургия*, Москва, (1976), 16, 120; E. E. Havinga *et al.*, *J. of Phys. Chem. Sol.*, **31**(1970), 2653; B. W. Roberts, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **5**(1976), 581.

## AN EXPRESSION FOR THE CRITICAL TEMPERATURE $T_c$ OF $L1_2$ TYPE SUPERCONDUCTORS

WANG RONG-YAO

*(Department of Physics, Tsinghua University)*

LUO QI-GUANG

*(Institute of Physics, Academia Sinica)*

ZHANG XIAO

*(Department of Physics, Tsinghua University)*

### ABSTRACT

Through the examination of  $L1_2$  type superconductors, we obtained the expression for the superconducting critical temperature  $T_c$  of  $L1_2$  type superconductors:

$$T_c = \frac{15.9T_B V(B)G_A}{\sqrt{\bar{M}} \bar{V}(L1_2)G_B}$$

where  $T_B$  is the superconducting critical temperature of pure B,  $V(B)$  is the atomic volume of pure B,  $\bar{V}(L1_2)$  is the average atomic volume of the  $L1_2$  type compound,  $\bar{M}$  is the average atomic weight of the compound, and  $G_A$ ,  $G_B$  are Gordy electronegative values.