

超导临界温度理论 (I)*

吴杭生 蔡建华 龚昌德 吉光达 蔡俊道

提 要

本文求出了 Eliashberg 方程在 $T = T_c$ 时的解,得到了下面的临界温度级数表示式:

$$T_c = \alpha_0(\mu^*) \sqrt{\lambda \langle \omega^2 \rangle} \left\{ 1 + \frac{1}{\lambda} \alpha_1(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} + \frac{1}{\lambda^2} \left(\alpha_{21}(\mu^*) \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} + \alpha_{22}(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \right) + \frac{1}{\lambda^3} \left(\alpha_{31}(\mu^*) \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} + \alpha_{32}(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + \alpha_{33}(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \right) + \dots \right\},$$

其中 $\alpha_0(\mu^*)$, $\alpha_1(\mu^*)$ 等仅是 μ^* 的函数。新的 T_c 公式表明了, T_c 不仅依赖于 λ , μ^* 和 $\langle \omega^2 \rangle$, 而且依赖于有效声子谱 $\alpha^2 F(\omega)$ 的各级矩 $\langle \omega^{2n} \rangle$ 。

一、引 言

我们知道,只要已知一个材料的有效声子谱 $\alpha^2 F(\omega)$ 和库仑赝势 μ^* ,便可以由强耦合超导电性理论^[1]计算出它的临界温度,精确度达到百分之几。可惜, Eliashberg 方程很复杂,迄今为止,人们只能在数值解的基础上,拚凑出一个近似的 T_c 公式来,其中最著名的是 McMillan 工作^[2]以及最近的 Allen 和 Dynes 工作^[3]。然而,要搞清楚 $\alpha^2 F(\omega)$ 和 μ^* 是怎样影响 T_c 的,因而有助于发现提高超导临界温度的新途径,一个正确的临界温度公式无疑是必须的。

把 Eliashberg 方程在 Matsubara 表象中写出来,并加以线性化,可以看出, T_c 是下面方程的根^[4,3]:

$$\det |K_{mn}| = \begin{vmatrix} K_{00} & K_{01} & K_{02} & \cdots & K_{0N-1} \\ K_{10} & K_{11} & K_{12} & \cdots & K_{1N-1} \\ K_{20} & K_{21} & K_{22} & \cdots & K_{2N-1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ K_{N-10} & K_{N-11} & K_{N-12} & \cdots & K_{N-1N-1} \end{vmatrix} = 0. \quad (1)$$

N 应足够地大,使由此式定出的 T_c 不受 N 的影响。在上式中¹⁾

$$K_{mn} = \lambda(m-n) + \lambda(m+n+1) - 2\mu^* - \delta_{mn} \left(2m+1 + \lambda(0) + 2 \sum_{l=1}^m \lambda(l) \right), \quad (2)$$

* 1977 年 6 月 1 日收到。

1) 如果没有特别的说明,本文以及随后文章采用的符号和文献 [3] 相同。

$$\lambda(n) = 2 \int_0^\infty d\omega \frac{\alpha^2 F(\omega) \omega}{\omega^2 + (2\pi n T)^2}, \quad (3)$$

$$\mu^* = \mu^*(N).$$

本文求出了方程(1)的解,证明了严格的 T_c 公式应具有如下形式:

$$T_c = \alpha_0(\mu^*) \sqrt{\lambda \langle \omega^2 \rangle} \left\{ 1 + \frac{1}{\lambda} \alpha_1(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} + \frac{1}{\lambda^2} \left(\alpha_{21}(\mu^*) \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} + \alpha_{22}(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \right) + \frac{1}{\lambda^3} \left(\alpha_{31}(\mu^*) \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} + \alpha_{32}(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + \alpha_{33}(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \right) + \dots \right\}, \quad (4)$$

其中 $\alpha_0(\mu^*)$, $\alpha_1(\mu^*) \dots$ 都只是 μ^* 的函数,它们的表达式在文中给出。(4)式清楚地表明了, T_c 不仅依赖 λ , μ^* 和 $\langle \omega^2 \rangle$, 而且还依赖于 $\alpha^2 F(\omega)$ 的各级矩 $\langle \omega^{2n} \rangle$. 这是新 T_c 公式区别于前人的 T_c 公式最重要的一点. 这个区别说明了,像 McMillan 以及 Allen 和 Dynes 的 T_c 公式不仅是近似的,而更重要的是没有能正确地概括出 $\alpha^2 F(\omega)$ 对 T_c 的影响.

为了清楚起见,我们先在第二节和第三节研究方程(1)的一级和二级近似解¹⁾,第四节再讨论严格解.

在随后的几篇文章中,我们将研究新 T_c 公式(4)的收敛性质;计算出式中包含的系数;分析了提高 T_c 的途径;计算出各种超导体的临界温度,并和实验进行了比较.

二、一级近似解

Allen 和 Dynes 正确地指出^[3],一级近似只需保留行列式 $\det |K_{mn}|$ 的第一个对角元素,即

$$K_{00} = \lambda(1) - 2\mu^* - 1 = 0. \quad (5)$$

然而,他们没有能找到此方程的正确求解方法. 他们先假设 $\alpha^2 F(\omega)$ 是 Einstein 谱,即

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda \omega_E}{2} \delta(\omega - \omega_E). \quad (6)$$

此时,(5)式简化成代数方程,故可直接解出

$$T_{c1} = \frac{\sqrt{\lambda \omega_E^2}}{2\pi} \frac{1}{(1 + 2\mu^*)^{1/2}} \left(1 - \frac{1 + 2\mu^*}{\lambda} \right)^{1/2}. \quad (7)$$

然后把 ω_E^2 换成 $\langle \omega^2 \rangle$, 使此式适用于任意的 $\alpha^2 F(\omega)$ 谱. 下面我们将指出,这种推广在一般情形下是错误的,只有在 $\lambda \gg 1$ 时才能给出正确的结果.

利用等式

$$\frac{1}{\omega^2 + (2\pi n T)^2} = \int_0^\infty dx e^{-x[\omega^2 + (2\pi n T)^2]}, \quad (8)$$

把(3)式改写为

$$\lambda(n) = 2 \int_0^\infty d\omega \int_0^\infty dx \alpha^2 F(\omega) \omega e^{-x[\omega^2 + (2\pi n T)^2]}. \quad (9)$$

1) 这两节的主要结果已在文献 [5] 中作过报道.

将 $e^{-x\omega^2}$ 展成级数, 先对 ω 积分, 再对 x 积分, 求得

$$\lambda(n) = \lambda \sum_{l=1}^{\infty} (-)^{l-1} \frac{\langle \omega^{2l} \rangle}{(2\pi T)^{2l}} \frac{1}{n^{2l}}. \quad (10)$$

取 $n = 1$, 并令 $T = T_{c1}$, 把此式代入 (5) 式, 得到

$$\sum_{l=1}^{\infty} (-)^{l-1} \frac{\langle \omega^{2l} \rangle}{(2\pi T_{c1})^{2l}} = \frac{1 + 2\mu^*}{\lambda}. \quad (11)$$

用 Lagrange 定理^[6]将此式反解, 获得如下展开式:

$$(2\pi T_{c1})^{-2} = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\mu^*) \frac{1}{\lambda^n}, \quad (12)$$

其中

$$b_1(\mu^*) = \frac{1 + 2\mu^*}{\langle \omega^2 \rangle}; \quad (13a)$$

$$b_2(\mu^*) = \frac{(1 + 2\mu^*)^2}{\langle \omega^2 \rangle} \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2}; \quad (13b)$$

$$b_3(\mu^*) = \frac{(1 + 2\mu^*)^3}{\langle \omega^2 \rangle} \left\{ 2 \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} - \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} \right\}; \quad (13c)$$

$$b_4(\mu^*) = \frac{(1 + 2\mu^*)^4}{\langle \omega^2 \rangle} \left\{ \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} - 5 \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + 5 \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \right\}; \quad (13d)$$

.....

$$b_n(\mu^*) = \frac{(1 + 2\mu^*)^n}{n \langle \omega^2 \rangle^n} \sum_{l=1}^{n-1} (-)^l C_l^{n+l-1} \beta_{n-1}^{(l)}, \quad n \geq 2. \quad (13e)$$

在 (13e) 式中,

$$\beta_{n-1}^{(l)} = \sum_{\{m_i\}} \prod_{i=1}^l \beta_{m_i}, \quad (14)$$

$$\left(\sum_{i=1}^l m_i = n-1 \right)$$

其中

$$\beta_m = (-)^m \frac{\langle \omega^{2(m+1)} \rangle}{\langle \omega^2 \rangle}. \quad (14a)$$

把 (12) 式改写成另一种形式,

$$T_{c1} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{1 + 2\mu^*}} \sqrt{\lambda \langle \omega^2 \rangle} \left\{ 1 - \frac{1}{\lambda} \frac{1}{2} (1 + 2\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} \right. \\ + \frac{1}{\lambda^2} (1 + 2\mu^*)^2 \left(\frac{1}{2} \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} - \frac{5}{8} \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \right) - \frac{1}{\lambda^3} (1 + 2\mu^*)^3 \\ \times \left(\frac{1}{2} \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} - \frac{7}{4} \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + \frac{21}{16} \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \right) + \dots \left. \right\}. \quad (15)$$

(12) 或 (15) 式就是临界温度的一级近似公式。

注意到当 $\alpha^2 F(\omega)$ 是 Einstein 谱时, $b_n(\mu^*) = \frac{1}{\omega_E^2} (1 + 2\mu^*)^n$, 代入 (12) 式, 便得到 (7) 式; 但如果把 (7) 式中的 ω_E^2 换成 $\langle \omega^2 \rangle$, 一般得不出 (15) 式。由此可见, Allen 和 Dynes 的推广在一般情形下是错误的。

三、二级近似解

二级近似须取 $\det |K_{mn}|$ 的左上角 2×2 行列式^[3], 即

$$\begin{vmatrix} K_{00} & K_{01} \\ K_{10} & K_{11} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \lambda(1) - 2\mu^* - 1 & \lambda(1) + \lambda(2) - 2\mu^* \\ \lambda(1) + \lambda(2) - 2\mu^* & \lambda(3) - 2\lambda(1) - 2\mu^* - 3 \end{vmatrix} = 0. \quad (16)$$

上式中的 $\lambda(n)$ 用 (10) 式代入, 并让 $T = T_{c2}$, 经化简后, 得到

$$\lambda^2 y^2 A_2(y) + \lambda y A_1(y) - 3 = 0, \quad (17)$$

其中

$$y = (2\pi T_{c2})^{-2}; \quad (18)$$

$$\begin{aligned} A_2(y) = & \sum_{m_1=1}^{\infty} \sum_{m_2=1}^{\infty} (-)^{m_1+m_2} \left[\left(1 + \frac{1}{2^{2m_1}}\right) \left(1 + \frac{1}{2^{2m_2}}\right) \right. \\ & \left. + \left(2 - \frac{1}{3^{2m_2}}\right) \langle \omega^{2m_1} \rangle \langle \omega^{2m_2} \rangle y^{m_1+m_2-2} \right]; \end{aligned} \quad (19)$$

$$A_1(y) = \sum_{n=1}^{\infty} (-)^{n+1} \left[\left(1 + \frac{1}{3^{2n}}\right) - \left(6 - \frac{2}{3^{2n}} + \frac{4}{2^{2n}}\right) \mu^* \right] \langle \omega^{2n} \rangle y^{n-1}. \quad (20)$$

注意到, λ 是正实数, 由 (17) 式解得

$$\lambda y = \phi(y), \quad (21)$$

其中

$$\phi(y) = \frac{-A_1(y) + \sqrt{A_1^2(y) + 12A_2(y)}}{2A_2(y)}. \quad (22)$$

应用 Lagrange 定理, 由 (21) 式解得

$$\begin{aligned} (2\pi T_{c2})^{-2} = & \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\mu^*) \frac{1}{\lambda^n} \\ = & \frac{b_1(\mu^*)}{\lambda} \left\{ 1 + \frac{1}{\lambda} \frac{b_2(\mu^*)}{b_1(\mu^*)} + \frac{1}{\lambda^2} \frac{b_3(\mu^*)}{b_1(\mu^*)} + \frac{1}{\lambda^3} \frac{b_4(\mu^*)}{b_1(\mu^*)} + \dots \right\}, \end{aligned} \quad (23)$$

其中

$$b_n(\mu^*) = \frac{1}{n!} \frac{d^{n-1}}{dy^{n-1}} (\phi(y))^n \Big|_{y=0}. \quad (24)$$

考虑到 μ^* 一般仅约 0.1, 把 $\phi(y)$ 按 μ^* 作泰勒级数展开, 代入 (24) 式, 经过一定代数运算后, 得到

$$b_1(\mu^*) = \frac{0.7851}{\langle \omega^2 \rangle} (1 + 2.598\mu^* - 0.1043\mu^{*2} + 0.1166\mu^{*3} - 0.1349\mu^{*4} + \dots); \quad (24a)$$

$$\frac{b_2(\mu^*)}{b_1(\mu^*)} = 0.7382(1 + 2.636\mu^* - 0.0496\mu^{*2} + 0.0526\mu^{*3} - 0.0569\mu^{*4} + \dots) \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2}; \quad (24b)$$

$$\begin{aligned} \frac{b_3(\mu^*)}{b_1(\mu^*)} = & 1.088(1 + 5.269\mu^* + 6.842\mu^{*2} + 0.157\mu^{*3} + 0.173\mu^{*4} + \dots) \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \\ & - 0.5704(1 + 5.244\mu^* + 6.737\mu^{*2} - 0.212\mu^{*3} \\ & + 0.235\mu^{*4} + \dots) \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3}; \end{aligned} \quad (24c)$$

$$\begin{aligned} \frac{b_4(\mu^*)}{b_1(\mu^*)} = & 1.999(1 + 7.903\mu^* + 20.67\mu^{*2} + 17.66\mu^{*3} - 0.360\mu^{*4} + \dots) \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \\ & - 2.101(1 + 7.879\mu^* + 20.50\mu^{*2} + 17.14\mu^{*3} + 0.442\mu^{*4} \\ & + \dots) \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + 0.4463(1 + 7.844\mu^* + 20.27\mu^{*2} \\ & + 16.89\mu^{*3} - 0.533\mu^{*4} + \dots) \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4}; \end{aligned} \quad (24d)$$

.....

(23)式可等价地写成如下形式:

$$\begin{aligned} T_{c_2} = & 0.1796\sqrt{\lambda\langle\omega^2\rangle}(1 - 1.299\mu^* + 2.583\mu^{*2} - 5.743\mu^{*3} \\ & + 13.42\mu^{*4} + \dots) \left\{ 1 - \frac{0.3691}{\lambda} (1 + 2.636\mu^* - 0.0486\mu^{*2} + 0.0526\mu^{*3} \right. \\ & - 0.0569\mu^{*4} + \dots) \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} + \frac{1}{\lambda^2} \left[0.2852(1 + 5.244\mu^* + 6.737\mu^{*2} \right. \\ & - 0.212\mu^{*3} + 0.235\mu^{*4} + \dots) \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} - 0.3396(1 + 5.268\mu^* + 6.837\mu^{*2} \\ & - 0.160\mu^{*3} + 0.177\mu^{*4} + \dots) \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \left. \right] - \frac{1}{\lambda^3} \left[0.2231(1 + 7.844\mu^* \right. \\ & + 20.27\mu^{*2} + 16.89\mu^{*3} - 0.533\mu^{*4} + \dots) \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} - 0.7347(1 + 7.879\mu^* \\ & + 20.50\mu^{*2} + 17.05\mu^{*3} - 0.446\mu^{*4} + \dots) \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + 0.5228(1 + 7.902\mu^* \\ & + 20.66\mu^{*2} + 17.66\mu^{*3} - 0.364\mu^{*4} + \dots) \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \left. \right] + \dots \left. \right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

把(15)式和(25)式进行比较,发现它们的函数形式是完全一样的,仅仅系数不同而已。由此很自然地想到,严格解也应具有同样的函数形式。下一节的分析证实了这个猜测是正确的。

四、严 格 解

上面两节采用的求解方法,可直接用来处理方程(1),只不过数学稍复杂一点罢了.

首先,利用(10)式,把行列式的元素 K_{ij} 改写成

$$K_{ij} = \lambda y \left[\sum_{n=1}^{\infty} (-)^{n+1} S_{ij}(n) \langle \omega^{2n} \rangle y^{n-1} \right] - [2\mu^* + (2i+1)\delta_{ij}], \quad (26)$$

其中

$$y = (2\pi T_c)^{-2}; \quad (27)$$

$$S_{ij}(n) = S_{ji}(n) = \begin{cases} \frac{1}{(i-j)^{2n}} + \frac{1}{(i+j+1)^{2n}} & \text{当 } i \neq j \text{ 时;} \\ \frac{1}{(2i+1)^{2n}} - 2 \sum_{l=1}^i \frac{1}{l^{2n}} & \text{当 } i = j \text{ 时.} \end{cases} \quad (28a)$$

$$(28b)$$

把(26)式代入(1)式,经过适当化简后,得到

$$\begin{aligned} \lambda^N y^N \sum_{l=1}^{\infty} \delta_{N+l-1}^{(N)} y^{l-1} - \lambda^{N-1} y^{N-1} \sum_{l=1}^{\infty} \delta_{N+l-2}^{(N-1)} y^{l-1} + \dots \\ + (-)^{N-1} \lambda y \sum_{l=1}^{\infty} \delta_l^{(1)} y^{l-1} + (-)^N \delta^{(0)} = 0. \end{aligned} \quad (29)$$

系数 $\delta_{N+l-1}^{(N)}, \delta_{N+l-2}^{(N-1)}, \dots, \delta^{(0)}$ 分别为

$$\delta_{N+l-1}^{(N)} = (-)^{l-1} \sum_{n_1, n_2, \dots, n_N} \Delta(n_1, n_2, \dots, n_N) \langle \omega^{2n_1} \rangle \langle \omega^{2n_2} \rangle \dots \langle \omega^{2n_N} \rangle; \quad (30a)$$

$$\left(\sum_{i=1}^N n_i = N+l-1 \right)_{n_i \geq 1}$$

$$\delta_{N+l-2}^{(N-1)} = (-)^{l-1} \sum_{n_1, n_2, \dots, n_{N-1}} \bar{\Delta}(\mu, n_1, n_2, \dots, n_{N-1}) \langle \omega^{2n_1} \rangle \langle \omega^{2n_2} \rangle \dots \langle \omega^{2n_{N-1}} \rangle; \quad (30b)$$

$$\left(\sum_{i=1}^{N-1} n_i = N+l-2 \right)_{n_i \geq 1}$$

$$\delta_{N+l-3}^{(N-2)} = (-)^{l-1} \sum_{n_1, n_2, \dots, n_{N-2}} \bar{\Delta}(\mu, \mu, n_1, n_2, \dots, n_{N-2}) \langle \omega^{2n_1} \rangle \langle \omega^{2n_2} \rangle \dots \langle \omega^{2n_{N-2}} \rangle; \quad (30c)$$

$$\left(\sum_{i=1}^{N-2} n_i = N+l-3 \right)_{n_i \geq 1}$$

.....;

$$\delta_l^{(1)} = (-)^{l-1} \bar{\Delta}(\mu, \mu, \dots, \mu, l) \langle \omega^{2l} \rangle; \quad (30d)$$

$$\delta^{(0)} = \Delta(\mu, \mu, \dots, \mu). \quad (30e)$$

$\Delta(\dots)$ 表示一个 $N \times N$ 行列式,圆括号中第 i 个字母如果是 n_i ,意味着行列式的第 i

列元素为

$$S_{i-1,0}(n_i), S_{i-1,1}(n_i), \dots, S_{i-1,N-1}(n_i);$$

如果是 μ , 意味着行列式的第 i 列元素为

$$\underbrace{\mu_0, \mu_0, \dots, \mu_0}_{i-1 \text{ 个}}, \mu_{2i+1}, \underbrace{\mu_0, \dots, \mu_0}_{N-i \text{ 个}},$$

其中 $\mu_n = 2\mu^* + n$. 例如

$$\Delta(n_1, n_2, \dots, n_N) = \begin{vmatrix} S_{0,0}(n_1) & S_{0,1}(n_1) & \dots & S_{0,N-1}(n_1) \\ S_{1,0}(n_2) & S_{1,1}(n_2) & \dots & S_{1,N-1}(n_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_{N-1,0}(n_N) & S_{N-1,1}(n_N) & \dots & S_{N-1,N-1}(n_N) \end{vmatrix}; \quad (31a)$$

$$\Delta(\mu, \mu, \dots, \mu) = \begin{vmatrix} \mu_1 & \mu_0 & \mu_0 & \dots & \mu_0 & \mu_0 \\ \mu_0 & \mu_3 & \mu_0 & \dots & \mu_0 & \mu_0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mu_0 & \mu_0 & \mu_0 & \dots & \mu_0 & \mu_{2N-1} \end{vmatrix}; \quad (31b)$$

$$\Delta(\mu, n_1, n_2, \dots, n_{N-1}) = \begin{vmatrix} \mu_1 & \mu_0 & \dots & \mu_0 \\ S_{1,0}(n_1) & S_{1,1}(n_1) & \dots & S_{1,N-1}(n_1) \\ S_{2,0}(n_2) & S_{2,1}(n_2) & \dots & S_{2,N-1}(n_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_{N-1,0}(n_{N-1}) & S_{N-1,1}(n_{N-1}) & \dots & S_{N-1,N-1}(n_{N-1}) \end{vmatrix}. \quad (31c)$$

$\bar{\Delta}(\mu, \dots, \mu n_1, \dots, n_{N-m})$ 上的一横表示把 $\mu, \dots, \mu, n_1, \dots, n_{N-m}$ 作各种可能的排列 (所有希腊字母 μ 认为是一样的, 所有拉丁字母 n_i 也认为是一样的, 它们各自之间的排列应从总排列中除掉). 对应每一种排列, 写下一个圆括号中字母次序和此排列相同的 Δ , 把它们加起来, 便是 $\bar{\Delta}(\mu, \dots, \mu n_1, \dots, n_{N-m})$. 以 $\bar{\Delta}(\mu, \mu, n_1, n_2)$ 为例. μ, μ, n_1, n_2 共有六种不同的排列, 即

$$\begin{array}{lll} \mu, \mu, n_1, n_2; & \mu, n_1, \mu, n_2; & \mu, n_1, n_2, \mu; \\ n_1, \mu, \mu, n_2; & n_1, \mu, n_2, \mu; & n_1, n_2, \mu, \mu. \end{array}$$

因此

$$\begin{aligned} \bar{\Delta}(\mu, \mu, n_1, n_2) &= \Delta(\mu, \mu, n_1, n_2) + \Delta(\mu, n_1, \mu, n_2) + \Delta(\mu, n_1, n_2, \mu) \\ &\quad + \Delta(n_1, \mu, \mu, n_2) + \Delta(n_1, \mu, n_2, \mu) + \Delta(n_1, n_2, \mu, \mu). \end{aligned} \quad (32)$$

易证, $\bar{\Delta}(\underbrace{\mu, \dots, \mu}_{m \text{ 个}}, \underbrace{n_1, n_2, \dots, n_{N-m}}_{N-m \text{ 个}})$ 共包含了 $C_m^N = \frac{N!}{m!(N-m)!}$ 个 $N \times N$ 行列式.

(29) 式和二级近似下的 (17) 式是对应的. 由于 (17) 式是 λ 的二次方程, 故可以把它改写成 (21)–(22) 式. (29) 式则不同了, 它是 λ 的高次方程, 企图把它作类似的变换显然是无希望的. 然而, 这个困难是不难克服的. 假设

$$\lambda y = \phi(y) \quad (33)$$

是 (29) 式的一个根, 其中

$$\phi(y) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n y^{n-1}. \quad (34)$$

把(33)–(34)式代入(29)式,并比较两端的 y^{n-1} 系数,得到

$$b_{N+1}^{(N)} - b_{N-1}^{(N-1)} + b_{N-1}^{(N-2)} + \cdots + (-)^{N-1} b_2^{(1)} + (-)^N \delta^{(0)} = 0; \quad (35a)$$

$$b_{N+n}^{(N)} - b_{N+n-1}^{(N-1)} + b_{N+n-2}^{(N-2)} + \cdots + (-)^{N-1} b_{n+1}^{(1)} = 0, \quad n \geq 2. \quad (35b)$$

其中

$$b_{N+n}^{(N)} = \sum_{m_1 m_2 \cdots m_{N+1}} \delta_{N+m_1-1}^{(N)} a_{m_1} a_{m_2} \cdots a_{m_{N+1}}; \quad (36a)$$

$$\left(\sum_{i=1}^{N+1} m_i = N+n \right)$$

$$m_i \geq 1$$

$$b_{N+n-1}^{(N-1)} = \sum_{m_1 m_2 \cdots m_N} \delta_{N+m_1-2}^{(N-1)} a_{m_1} a_{m_2} \cdots a_{m_N}; \quad (36b)$$

$$\left(\sum_{i=1}^N m_i = N+n-1 \right)$$

$$m_i \geq 1$$

$$b_{N+n-2}^{(N-2)} = \sum_{m_1 m_2 \cdots m_{N-1}} \delta_{N+m_1-3}^{(N-2)} a_{m_1} a_{m_2} \cdots a_{m_{N-1}}; \quad (36c)$$

$$\left(\sum_{i=1}^{N-1} m_i = N+n-2 \right)$$

$$m_i \geq 1$$

.....;

$$b_{n+1}^{(1)} = \sum_{m_1 m_2} \delta_{m_1}^{(1)} a_{m_1} a_{m_2}. \quad (36d)$$

$$\left(m_1 + m_2 = n+1 \right)$$

$$m_1, m_2 \geq 1$$

(35a) 和 (35b) 式是系数 $a_1, a_2, \cdots$ 所满足的方程.

先研究(35a)式. 由(36a)–(36d)式知

$$b_{N+1}^{(N)} = \delta_N^{(N)} a_1^N; \quad (37a)$$

$$b_N^{(N-1)} = \delta_{N-1}^{(N-1)} a_1^{N-1}; \quad (37b)$$

$$b_{N-1}^{(N-2)} = \delta_{N-2}^{(N-2)} a_1^{N-2}; \quad (37c)$$

.....;

$$b_2^{(1)} = \delta_1^{(1)} a_1. \quad (37d)$$

$\delta_N^{(N)}, \delta_{N-1}^{(N-1)}, \cdots, \delta_1^{(1)}$ 是由(30a)–(30d)式给定的. 它们是

$$\delta_N^{(N)} = \Delta(1, 1, \cdots, 1) \langle \omega^2 \rangle^N; \quad (38a)$$

$$\delta_{N-1}^{(N-1)} = \bar{\Delta}(\mu, 1, 1, \cdots, 1) \langle \omega^2 \rangle^{N-1}; \quad (38b)$$

$$\delta_{N-2}^{(N-2)} = \bar{\Delta}(\mu, \mu, 1, 1, \cdots, 1) \langle \omega^2 \rangle^{N-2}; \quad (38c)$$

.....;

$$\delta_1^{(1)} = \bar{\Delta}(\mu, \mu, \cdots, \mu, 1) \langle \omega^2 \rangle. \quad (38d)$$

把(37a)–(38d)式以及(30e)式代入(35a)式,得到定 a_1 的方程

$$\Delta(1, 1, \cdots, 1) \langle \omega^2 \rangle^N a_1^N - \bar{\Delta}(\mu, 1, 1, \cdots, 1) \langle \omega^2 \rangle^{N-1} a_1^{N-1}$$

$$+ \bar{\Delta}(\mu, \mu, 1, 1, \cdots, 1) \langle \omega^2 \rangle^{N-2} a_1^{N-2} + \cdots + (-)^{N-1} \bar{\Delta}(\mu, \mu, \cdots, \mu, 1) \langle \omega^2 \rangle a_1$$

$$+ (-)^N \Delta(\mu, \mu, \dots, \mu) = 0. \quad (39)$$

由此可见, a_1 应具有如下的函数形式:

$$a_1 = \sigma(\mu^*) \frac{1}{\langle \omega^2 \rangle}. \quad (40)$$

$\sigma(\mu^*)$ 仅依赖 μ^* . 它满足

$$f_1(\sigma) = \Delta(1, 1, \dots, 1)\sigma^N - \bar{\Delta}(\mu, 1, 1, \dots, 1)\sigma^{N-1} + \bar{\Delta}(\mu, \mu, 1, 1, \dots, 1)\sigma^{N-2} \\ + \dots + (-)^{N-1} \bar{\Delta}(\mu, \mu, \dots, \mu, 1)\sigma + (-)^N \Delta(\mu, \mu, \dots, \mu) = 0. \quad (41)$$

这是 σ 的 N 次代数方程, 共有 N 个根, 但只有一个是正实根^[4,3], 应选此根为 $\sigma(\mu^*)$.

取 $n = 2, 3, 4, \dots$, 由 (35b) 式可依次定出 $a_2, a_3, a_4, \dots$. 结果如下:

$$a_2 = \sigma_4(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2}; \quad (42)$$

$$a_3 = \sigma_6(\mu^*) \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} + \sigma_{44}(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^3}; \quad (43)$$

$$a_4 = \sigma_8(\mu^*) \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} + \sigma_{64}(\mu^*) \frac{\langle \omega^6 \rangle \langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} + \sigma_{444}(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^4}; \quad (44)$$

.....,

其中

$$\sigma_4(\mu^*) = \frac{f_2(\sigma)}{f_1'(\sigma)}; \quad (45)$$

$$\sigma_6(\mu^*) = -\frac{f_3(\sigma)}{f_1'(\sigma)}; \quad (46a)$$

$$\sigma_{44}(\mu^*) = -\frac{f_{22}(\sigma)}{f_1'(\sigma)} + \frac{1}{2!} \frac{1}{f_1'(\sigma)} \frac{d}{d\sigma} \left[\frac{(f_2(\sigma))^2}{f_1'(\sigma)} \right]; \quad (46b)$$

$$\sigma_8(\mu^*) = \frac{f_4(\sigma)}{f_1'(\sigma)}; \quad (47a)$$

$$\sigma_{64}(\mu^*) = \frac{f_{32}(\sigma)}{f_1'(\sigma)} - \frac{1}{f_1'(\sigma)} \frac{d}{d\sigma} \left[\frac{f_3(\sigma)f_2(\sigma)}{f_1'(\sigma)} \right]; \quad (47b)$$

$$\sigma_{444}(\mu^*) = \frac{f_{222}(\sigma)}{f_1'(\sigma)} - \frac{1}{f_1'(\sigma)} \frac{d}{d\sigma} \left[\frac{f_{22}(\sigma)f_2(\sigma)}{f_1'(\sigma)} \right] \\ + \frac{1}{3!} \frac{1}{f_1'(\sigma)} \frac{d}{d\sigma} \left\{ \frac{1}{f_1'(\sigma)} \frac{d}{d\sigma} \left[\frac{(f_2(\sigma))^3}{f_1'(\sigma)} \right] \right\}; \quad (47c)$$

.....,

注意到, σ 是 $f_1 = 0$ 的单重根, 故 $f_1'(\sigma) = \frac{d}{d\sigma} f_1(\sigma) \neq 0$. $f_n(\sigma)$, $f_{n_1 n_2}(\sigma)$ 和 $f_{n_1 n_2 n_3}(\sigma)$ 都是 σ 的多项式, 分别为

$$f_n(\sigma) = \Delta[n, 1, 1, \dots, 1]\sigma^N - \bar{\Delta}[\mu, n, 1, 1, \dots, 1]\sigma^{N-1} \\ + \bar{\Delta}[\mu, \mu, n, 1, 1, \dots, 1]\sigma^{N-2} - \dots + (-)^{N-1} \bar{\Delta}(\mu, \mu, \dots, \mu, n)\sigma; \quad (48) \\ f_{n_1 n_2}(\sigma) = \Delta[n_1, n_2, 1, 1, \dots, 1]\sigma^N - \bar{\Delta}[\mu, n_1, n_2, 1, 1, \dots, 1]\sigma^{N-1}$$

$$+ \bar{\Delta}[\mu, \mu, n_1, n_2, 1, 1, \dots, 1] \sigma^{N-2} + \dots \\ + (-)^{N-2} \bar{\Delta}[\mu, \mu, \dots, \mu, n_1, n_2] \sigma^2; \quad (49)$$

$$f_{n_1 n_2 n_3}(\sigma) = \Delta[n_1, n_2, n_3, 1, 1, \dots, 1] \sigma^N - \bar{\Delta}[\mu, n_1, n_2, n_3, 1, 1, \dots, 1] \sigma^{N-1} \\ + \bar{\Delta}[\mu, \mu, n_1, n_2, n_3, 1, 1, \dots, 1] \sigma^{N-2} - \dots \\ + (-)^{N-3} \bar{\Delta}[\mu, \mu, \dots, \mu, n_1, n_2, n_3] \sigma^3. \quad (50)$$

在以上诸式中,出现了两个新的简化代号 $\Delta[n_1, n_2, \dots, n_N]$ 和 $\bar{\Delta}[\mu, \mu, \dots, \mu, n_1, n_2, \dots, n_{N-m}]$. 它们的定义是: 把拉丁字母 $n_1, n_2, \dots$ 作各种可能的排列, 对应一种排列 $\bar{n}_1, \bar{n}_2, \dots$ 写下一个 $N \times N$ 行列式 $\Delta(\bar{n}_1, \bar{n}_2, \dots, \bar{n}_N)$ (或 $\bar{\Delta}(\mu, \dots, \mu, \bar{n}_1, \bar{n}_2, \dots, \bar{n}_{N-m})$), 它们之和就是 $\Delta[n_1, n_2, \dots, n_N]$ (或 $\bar{\Delta}[\mu, \dots, \mu, n_1, \dots, n_{N-m}]$). 例如

$$\Delta[2, 1, 1, 1] = \Delta(2, 1, 1, 1) + \Delta(1, 2, 1, 1) + \Delta(1, 1, 2, 1) + \Delta(1, 1, 1, 2); \quad (51)$$

$$\bar{\Delta}[\mu, 2, 1, 1] = \bar{\Delta}(\mu, 2, 1, 1) + \bar{\Delta}(\mu, 1, 2, 1) + \bar{\Delta}(\mu, 1, 1, 2). \quad (52)$$

显然

$$\Delta[n, n, \dots, n] = \Delta(n, n, \dots, n); \quad (53)$$

$$\bar{\Delta}[\mu, \dots, \mu, n, n, \dots, n] = \bar{\Delta}(\mu, \dots, \mu, n, n, \dots, n); \quad (54)$$

$$\bar{\Delta}[\mu \mu \dots \mu n] = \bar{\Delta}(\mu \mu \dots \mu n). \quad (55)$$

总结以上讨论可以看到, 只要求出方程 (41) 的正实根 σ , 代入 (45)–(50) 式, 便可依次算出 $\sigma_4, \sigma_6, \dots$; 再代入 (40), (42)–(44) 式, 便得到了 $a_1, a_2 \dots$. 这样, 也就确定了 $\phi(y)$.

和第二、三节一样, 用 Lagrange 定理把 (33) 式反解, 获得下面的临界温度的级数表示式:

$$(2\pi T_c)^{-2} = \sigma(\mu^*) \frac{1}{\lambda \langle \omega^2 \rangle} \left\{ 1 + \frac{1}{\lambda} \sigma_4(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} + \frac{1}{\lambda^2} \left[\sigma(\mu^*) \sigma_6(\mu^*) \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} \right. \right. \\ + (\sigma(\mu^*) \sigma_{44}(\mu^*) + \sigma_4(\mu^*) \sigma_4(\mu^*)) \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \Big] \\ + \frac{1}{\lambda^3} \left[\sigma(\mu^*) \sigma(\mu^*) \sigma_8(\mu^*) \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} + (\sigma(\mu^*) \sigma(\mu^*) \sigma_{64}(\mu^*) \right. \\ + 3\sigma(\mu^*) \sigma_4(\mu^*) \sigma_6(\mu^*)) \frac{\langle \omega^6 \rangle \langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + (\sigma(\mu^*) \sigma(\mu^*) \sigma_{444}(\mu^*) \\ + 3\sigma(\mu^*) \sigma_4(\mu^*) \sigma_{44}(\mu^*) + \sigma_4(\mu^*) \sigma_4(\mu^*) \sigma_4(\mu^*)) \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \Big] + \dots \Big\}. \quad (56)$$

由此式直接得到 (4) 式, 其中

$$\alpha_0(\mu^*) = \frac{1}{2\pi \sqrt{\sigma(\mu^*)}}; \quad (57)$$

$$\alpha_1(\mu^*) = -\frac{1}{2} \sigma_4(\mu^*); \quad (58)$$

$$\alpha_{21}(\mu^*) = -\frac{1}{2} \sigma(\mu^*) \sigma_6(\mu^*); \quad (59a)$$

$$\alpha_{22}(\mu^*) = -\frac{1}{2} \sigma(\mu^*) \sigma_{44}(\mu^*) - \frac{1}{8} \sigma_4(\mu^*) \sigma_4(\mu^*); \quad (59b)$$

$$\alpha_{31}(\mu^*) = -\frac{1}{2} \sigma(\mu^*) \sigma(\mu^*) \sigma_8(\mu^*); \quad (60a)$$

$$\alpha_{32}(\mu^*) = -\frac{1}{2} \sigma(\mu^*) \sigma(\mu^*) \sigma_{64}(\mu^*) - \frac{3}{4} \sigma(\mu^*) \sigma_6(\mu^*) \sigma_4(\mu^*); \quad (60b)$$

$$\begin{aligned} \alpha_{33}(\mu^*) = & -\frac{1}{2} \sigma(\mu^*) \sigma(\mu^*) \sigma_{444}(\mu^*) - \frac{3}{4} \sigma(\mu^*) \sigma_4(\mu^*) \sigma_{44}(\mu^*) \\ & - \frac{1}{16} \sigma_4(\mu^*) \sigma_4(\mu^*) \sigma_4(\mu^*); \end{aligned} \quad (60c)$$

.....

考虑到 μ^* 是个小量, 把 $\alpha_0, \alpha_1 \cdots$ 展成 μ^* 的幂级数:

$$\begin{aligned} \alpha_0(\mu^*) &= \alpha_0^{(0)} + \alpha_0^{(1)} \mu^* + \alpha_0^{(2)} \mu^{*2} + \cdots; \\ \alpha_1(\mu^*) &= \alpha_1^{(0)} + \alpha_1^{(1)} \mu^* + \alpha_1^{(2)} \mu^{*2} + \cdots; \\ \alpha_{21}(\mu^*) &= \alpha_{21}^{(0)} + \alpha_{21}^{(1)} \mu^* + \alpha_{21}^{(2)} \mu^{*2} + \cdots; \\ &\cdots \end{aligned} \quad (61)$$

因为 $\alpha_0(\mu^*), \alpha_1(\mu^*), \alpha_{21}(\mu^*), \cdots$ 只是 μ^* 的函数, 所以 (61) 式中的各系数 $\alpha_0^{(0)}, \alpha_0^{(1)}, \alpha_0^{(2)} \cdots$ 是一些常数, 和 $\alpha^2 F$ 及 μ^* 都没有关系。

五、结 束 语

我们求出了方程 (1) 的解, 得到临界温度公式 (4)。它是一个按 $\alpha^2 F$ 各级矩展开的级数。在下一篇文章^[7]中, 我们研究了此级数的收敛性质, 并得到如下结论: 公式 (4) (必要时可作一定的解析延拓) 不仅适用于强耦合超导体, 而且还适用于中间耦合和大部分弱耦合超导体。

新的 T_c 公式表明了, 一个超导材料的临界温度 T_c 是被它的有效声子谱 $\alpha^2 F(\omega)$ 的各级矩 $\langle \omega^{2n} \rangle$ 决定的。这是新 T_c 公式区别于前人的 T_c 公式最重要一点。这个区别说明了, 像 McMillan 以及 Allen 和 Dynes 的 T_c 公式不仅是近似的, 更重要的是没有能正确地概括出 $\alpha^2 F(\omega)$ 对 T_c 的影响。

在以后的文章中, 我们将计算出 $\alpha_0^{(0)}, \alpha_0^{(1)}, \alpha_1^{(0)}, \cdots$; 把 (4) 式给出的结果和实验进行比较; 分析提高 T_c 的途径等。

参 考 文 献

- [1] D. J. Scalapino, Superconductivity, ed by Parks, I (1969), 500.
- [2] W. L. McMillan, *Phys. Rev.*, **167** (1968), 331.
- [3] P. B. Allen and R. C. Dynes, *Phys. Rev.*, **B12** (1975), 905.
- [4] C. S. Owen and D. J. Scalapino, *Physica*, **55** (1971), 691.
- [5] 蔡建华、吴杭生, 物理学报, **26** (1977), 550.
- [6] E. T. Whittaker and G. N. Watson, *Modern Analysis* (1951), p. 132.
- [7] 龚昌德、吴杭生、蔡建华、蔡俊道、吉光达, 物理学报 (待发表)。

THEORY OF THE SUPERCONDUCTING CRITICAL TEMPERATURE (I)

WU HANG-SHENG CAI JIAN-HUA GONG CHANG-DE
JI GUANG-DA CAI JUN-DAO

ABSTRACT

In this paper, we have solved the Eliashberg equation for $T = T_c$, obtaining a series expression for the superconducting critical temperature

$$T_c = \alpha_0(\mu^*) \sqrt{\lambda \langle \omega^2 \rangle} \left\{ \left(1 + \frac{1}{\lambda} \alpha_1(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} + \frac{1}{\lambda^2} (\alpha_{21}(\mu^*) \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} + \alpha_{22}(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4}) \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{\lambda^3} \left((\alpha_{31}(\mu^*) \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} + \alpha_{32}(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + \alpha_{33}(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6}) + \dots \right) \right\},$$

where $\alpha_0(\mu^*)$, $\alpha_1(\mu^*)$ etc. depend upon μ^* only. This new T_c formula shows that T_c is determined not only by λ , $\langle \omega^2 \rangle$ and μ^* , but also by the various moments $\langle \omega^{2n} \rangle$ of the effective phonon spectrum.