

超导临界温度严格公式的探讨*

蔡建华 吴杭生

(南 京 大 学) (中国科学技术大学)

—

近来 Allen 和 Dynes^[1] 对 Eliashberg 方程重新进行了数值分析, 并提出了一个新的 T_c 公式. 他们先就 Einstein 谱的情形, 在一级和二级近似导出了 T_c 的一个渐近公式. 在二级近似下, $T_c = 0.180\lambda^{\frac{1}{2}}\omega_E$, 当 $\lambda > 10$, $\mu^* = 0$ 时, 其中 λ 是电-声子耦合常数, μ^* 是库仑赝势. 然后把 ω_E 换成 $\langle\omega^2\rangle^{\frac{1}{2}}$,

$$T_c = 0.180(\lambda\langle\omega^2\rangle)^{\frac{1}{2}}, \text{ 当 } \lambda \gg 1 \text{ 时.} \quad (1)$$

这里

$$\langle\omega^n\rangle = \frac{2}{\lambda} \int_0^\infty \frac{\alpha^2 F}{\omega} \omega^n d\omega. \quad (2)$$

并认为(1)式适用于任何有效声子谱 $\alpha^2 F$. (1) 式是他们的 T_c 公式的一个重要依据. Allen 和 Dynes 的这种推广是不严密的, 造成了象 Leavens^[2] 那样的批评.

然而, 在一级和二级近似, 对于任意 $\alpha^2 F$ 谱, Eliashberg 方程可以严格求解, 由此并可以探讨严格的 T_c 公式. 一级近似的 Eliashberg 方程是^[1]

$$2 \int_0^\infty \frac{\omega \alpha^2 F}{\omega^2 + (2\pi T_{cl})^2} d\omega = 1 + 2\mu^*. \quad (3)$$

将因子 $[\omega^2 + (2\pi T_{cl})^2]^{-1}$ 按 $(\omega/2\pi T_{cl})^2$ 的幂次展开, 逐项积分, 应用定义(2)式, 然后用 Lagrange 定理^[3]进行反解, 得到一级近似的 T_c 展开式:

$$(2\pi T_{cl})^{-2} = \frac{1 + 2\mu^*}{\lambda\langle\omega^2\rangle} \left\{ 1 + \frac{\langle\omega^4\rangle}{\langle\omega^2\rangle^2} \frac{1 + 2\mu^*}{\lambda} + \left(2 \frac{\langle\omega^4\rangle^2}{\langle\omega^2\rangle^4} - \frac{\langle\omega^6\rangle}{\langle\omega^2\rangle^3} \right) \left(\frac{1 + 2\mu^*}{\lambda} \right)^2 + \dots \right\}. \quad (4)$$

在二级近似下, 得到形式相同的展开式, 仅是系数不同.

$$\begin{aligned} (2\pi T_{cl})^{-2} &= \frac{b_1(\mu^*)}{\lambda} \left\{ 1 + \frac{b_2(\mu^*)}{b_1(\mu^*)} \frac{1}{\lambda} + \frac{b_3(\mu^*)}{b_1(\mu^*)} \frac{1}{\lambda^2} + \dots \right\}. \\ b_1(\mu^*) &= \frac{0.785}{\langle\omega^2\rangle} (1 + 2.60\mu^* - 0.104\mu^{*2} + 0.117\mu^{*3} - 0.135\mu^{*4} + o(\mu^{*5})), \\ \frac{b_2(\mu^*)}{b_1(\mu^*)} &= 0.738 \frac{\langle\omega^4\rangle}{\langle\omega^2\rangle^2} (1 + 2.64\mu^* - 0.049\mu^{*2} + 0.0526\mu^{*3} - 0.057\mu^{*4} \\ &\quad + o(\mu^{*5})), \\ \frac{b_3(\mu^*)}{b_1(\mu^*)} &= 1.088 \frac{\langle\omega^4\rangle^2}{\langle\omega^2\rangle^4} (1 + 5.27\mu^* + 6.84\mu^{*2} - 0.157\mu^{*3} + 0.173\mu^{*4} + o(\mu^{*5})) \\ &\quad - 0.571 \frac{\langle\omega^6\rangle}{\langle\omega^2\rangle^3} (1 + 5.24\mu^* + 6.74\mu^{*2} - 0.212\mu^{*3} + 0.235\mu^{*4} \\ &\quad + o(\mu^{*5})). \end{aligned} \quad (5)$$

* 1977年3月11日收到.

将系数简化, 准确到百分之一以内, 由(5)式可得

$$T_{cl} = 0.180(\lambda\langle\omega^2\rangle)^{\frac{1}{2}} \left\{ 1 - 0.369 \frac{\langle\omega^4\rangle}{\langle\omega^2\rangle^2} \frac{1}{\lambda} - \left(0.340 \frac{\langle\omega^4\rangle^2}{\langle\omega^2\rangle^4} - 0.285 \frac{\langle\omega^6\rangle}{\langle\omega^2\rangle^3} \right) \frac{1}{\lambda^2} + \dots \right\} \quad (6)$$

其中 $\lambda = \lambda/(1 + 2.62\mu^*)$. 在 $\mu^* = 0$ 情形, 当 $\lambda \rightarrow \infty$, $T_{cl} \rightarrow 0.180(\lambda\langle\omega^2\rangle)^{\frac{1}{2}}$, 正好是 Allen 和 Dynes 的渐近公式(1).

试将(6)式和实验作比较, 表 1 中列出了 Pb 和 Nb₃Sn 的 λ , μ^* , $(T_c)_{\text{实验}}$, $\langle\omega^2\rangle^{\frac{1}{2}}$, $\frac{\langle\omega^4\rangle}{\langle\omega^2\rangle^2}$ 和 $\frac{\langle\omega^6\rangle}{\langle\omega^2\rangle^3}$ 的数值, 以及用这些数据代入(6)式, 算得的 $(T_{cl})_{\text{计算}}$. $\frac{\langle\omega^4\rangle}{\langle\omega^2\rangle^2}$ 的数值是从 Allen 和 Dynes^[1] 的图 7 读出, 而 $\frac{\langle\omega^6\rangle}{\langle\omega^2\rangle^3}$ 的数值是将该图的曲线外延而得的. 其余数据均取自该文的表 I 和表 II. 考虑到(6)式仅仅是二级近似, 还考虑到 $\frac{\langle\omega^4\rangle}{\langle\omega^2\rangle^2}$ 和 $\frac{\langle\omega^6\rangle}{\langle\omega^2\rangle^3}$ 数据的准确性差, 可以认为理论和实验的符合是满意的. (因为外延误差太大, 没有对 $\alpha\text{-Pb}_{0.45}\text{Bi}_{0.55}$ 和 Hg 作计算.)

表 1

	λ	μ^*	$(T_c)_{\text{实验}}$ (K)	$\langle\omega^2\rangle^{1/2}$ (K)	$\frac{\langle\omega^4\rangle}{\langle\omega^2\rangle^2}$	$\frac{\langle\omega^6\rangle}{\langle\omega^2\rangle^3}$	$(T_{cl})_{\text{计算}}$ (K)
Pb	1.55	0.105	7.2	65	1.51	2.85	7.2
Nb ₃ Sn	1.67	0.10	18.1	163	1.77	4.00	18.4

我们证明了, 严格的展开式具有相同形式:

$$T_c = c_0(\mu^*)(\lambda\langle\omega^2\rangle)^{\frac{1}{2}} \left\{ 1 + c_1(\mu^*) \frac{\langle\omega^4\rangle}{\langle\omega^2\rangle^2} \frac{1}{\lambda} + \left(c_2^{(1)}(\mu^*) \frac{\langle\omega^4\rangle^2}{\langle\omega^2\rangle^4} + c_2^{(2)}(\mu^*) \frac{\langle\omega^6\rangle}{\langle\omega^2\rangle^3} \right) \frac{1}{\lambda^2} + \dots \right\}, \quad (7)$$

其中各系数的计算已在进行之中, 我们也还在研究小 λ 情形的 T_c 公式. 详细推导和结果, 将另行发表.

二

最近 Leavens^[2] 对 Allen 和 Dynes 的 T_c 公式, 提出了异议. 他认为 $\lambda \rightarrow \infty$ 仅仅是 $T_c \rightarrow 0.182(\lambda\langle\omega^2\rangle)^{\frac{1}{2}}$ 的必要而非充分条件, 不能保证后者一定成立.

我们证明了如下的结果:

假设有效声子谱 α^2F 满足如下性质: 当 $\omega = 0$, $\alpha^2F = 0$, 且 $\frac{d}{d\omega}(\alpha^2F)$ 为有限, 则从下列三个极限之一必定导致另外两个:

$$(a) \lambda \rightarrow \infty, \quad (b) \frac{\omega_0}{2\pi T_c} \rightarrow 0, \quad (c) \frac{\lambda \langle \omega^2 \rangle}{(2\pi T_c)^2} \rightarrow \text{常数},$$

ω_0 是 $\alpha^2 F$ 谱的频率上界. 任何实际材料的 $\alpha^2 F$ 谱总归满足上述性质, 所以 Leavens 的责难并不成立.

Leavens 同意 (a) 式是 (c) 式的必要条件, 因此只要证明充分性. 由 λ 的定义

$$\lambda \equiv 2 \int_0^{\omega_0} \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2 F, \quad (8)$$

上面假设的 $\alpha^2 F$ 谱的性质, 保证了积分在下限收敛. 唯有当 $\alpha^2 F$ 在整个或部分频段上增大, 才可能使 $\lambda \rightarrow \infty$. 再看 (3) 式 (令 $\mu^* = 0$), 这里 T_{c1} 是 T_c 的下界. 因被积函数恒正, 如果 $\alpha^2 F$ 增大, 使 $\lambda \rightarrow \infty$, 唯一的可能是 $T_{c1} \rightarrow \infty$, 或者 $\frac{\omega_0}{2\pi T_{c1}} \rightarrow 0$, 因而按 Leavens^[2] 的意见, 渐近公式 (c) 成立.

(b) 式是 (c) 式的充分条件, 这是显然的^[2]. 这里再证明必要性. 以 $(2\pi T_{c1})^2$ 乘 (3) 式 ($\mu^* = 0$), 利用 (c) 式 [在一级近似下, (c) 式右边的常数应是 1], 我们有

$$2 \int_0^{\omega_0} d\omega \omega \alpha^2 F \left[1 - \frac{1}{1 + (\omega/2\pi T_{c0})^2} \right] \rightarrow 0.$$

被积函数恒正, 必须有 $\omega_0/2\pi T_{c1} \rightarrow 0$.

Leavens 还列举了三条具体的反对意见. 考虑到 (b) 式是 (c) 式的充要条件, 很显然, 在极限情形, $\delta T_c / \delta \alpha^2 F$ 应位于线性阶段^[4], 所以他的第一点反对意见是不存在的.

其次, 令

$$A \equiv \int d\omega \alpha^2 F, \quad (9)$$

则 $\omega_0(2\pi T_c) \ll (2\pi T_c)^2 = (2\pi \times 0.182)^2 \lambda \langle \omega^2 \rangle \leq 2(0.364\pi)^2 \omega_0 A$ 或者

$$T_c \ll 4\pi(0.182)^2 A = 0.417 A.$$

因此他的第二点反对意见也不存在. 至于第三点, 则由上述我们得到的 T_c 展式, 也自然地消除了.

从 (7) 式可见, 当 $\lambda \rightarrow \infty$, 正确的渐近公式是

$$T_c \rightarrow c_0(\mu^*) \sqrt{\lambda \langle \omega^2 \rangle}, \quad \text{当 } \lambda \gg c_1(\mu^*) \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} \text{ 时.}$$

Allen 和 Dynes 不加区分地把条件写成 $\lambda \gtrsim 10$ 是不恰当的.

参 考 文 献

- [1] P. B. Allen and R. C. Dynes, *Phys. Rev.*, **B12** (1975), 905.
- [2] C. R. Leavens, *Solid State Comm.*, **19** (1976), 395.
- [3] E. T. Whittaker and G. N. Watson, "Modern Analysis", § 7.32.
- [4] G. Bergmann and D. Rainer, *Zs. für Physik*, **263** (1972), 59.

SEARCH FOR A RIGOROUS FORMULA OF THE SUPERCONDUCTING CRITICAL TEMPERATURE

CAI JIAN-HUA

(Nanjing University)

WU HANG-SHENG

(University of Science and Technology of China)