

不均匀超导体基本方程及微粒解*

刘 福 绥

(北京大学物理系)

提 要

在 Matsubara 表象中用 Nambu 方法把 Элиашберг 强耦合超导理论推广到空间不均匀情形,并得到微粒壳层模型解。

一、引 言

近几年来,对微粒超导体的理论和实验研究是很活跃的(有关的总结可见文献[1—3])。其原因有两个方面:一是受寻找高 T_c 材料的激励;另一是理论上的意义。微粒超导性涉及空间不均匀体系强耦合超导体理论,而且不可避免的涉及表面晶格动力学、表面电子态等一系列近几年来很活跃的研究课题。

本文的目的在于,对电声子作用机制超导性提出空间不均匀情形下的基本方程,并用于讨论微粒超导性。首先给出适合于描写空间不均匀体系的电声子相互作用哈密顿量,它是用电子场和声子场算符表达的。利用这个哈密顿量推导出空间不均匀超导体的基本积分微分方程,相当于 Элиашберг 方程^[4]的推广。

对于微粒,我们有如下的分析:在微粒表面敷电介质层、敷铜等情况下,表面层原子受到的作用力和大块物体内部原子受到的作用力不同。因此表面原子的平衡位置受到偏离理想点阵的无序畸变。由于原子间作用是近距的,这一无序畸变局限在表面 3—5 层原子间。Bergman 曾证明固体中原子无序排列能使 Элиашберг 函数低频升高^[5],从而对超导性,特别是 T_c 值,有影响。因此,在讨论微粒超导性问题时必须计及表面无序的影响。此外,Allen 和 De Wette 证明^[6],在表面的 3—5 层原子间,明显出现弹性软化情况,相当于声子频谱向低频端移动。这也对 T_c 值发生影响。

二、不均匀强耦合超导体 Элиашберг 方程

Элиашберг 曾在电声子作用超导性机构假设下,建立了强耦合超导体的基本方程组^[4](对于弱耦合超导体也是适用的)。和 Элиашберг 工作相比,本工作有三点变动:1. 体系空间不均匀;2. $T > 0\text{K}$; 3. 考虑电子间库仑作用。后两个因素在文献[9]中讨论均匀超导体时已经考虑了。

* 1977 年 12 月 20 日收到。

一个包含有离子和电子的体系,其总的哈密顿量可写为

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = & \int d\mathbf{x} \phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + \sum_i V(\mathbf{x} - \mathbf{R}_i) \right] \phi_{\sigma}(\mathbf{x}) + \sum_i \frac{p_i^2}{2M} \\ & + \int d\mathbf{x} \phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \sum_i \mathbf{q}_i \cdot \nabla_{\mathbf{R}_i} V(\mathbf{x} - \mathbf{R}_i) \phi_{\sigma}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \tilde{V}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \\ & + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \phi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2} \phi_{\sigma'}(\mathbf{x}') \phi_{\sigma}(\mathbf{x}) - \mu N, \quad (1)\end{aligned}$$

其中 $\phi(\mathbf{x})$ 为电子场算符; $\mathbf{R}_i$ 为离子在平衡位置的坐标; 对表面壳层的原子来说, $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_i^0 + \delta \mathbf{r}_i$, $\delta \mathbf{r}_i$ 是第 i 个离子平衡位置相对 $\mathbf{R}_i^0$ 的偏离, 对内部原子来说, $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_i^0$, $\mathbf{R}_i^0$ 是理想晶格格点位置; $\mathbf{x}, \mathbf{x}'$ 为电子坐标, $\mathbf{q}_i$ 为第 i 个原子对平衡位置的偏离. 按文献 [5] $\mathbf{q}_i$ 可表示为

$$\mathbf{q}_i = \left(\frac{1}{NMV} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{q}\lambda} \left(\frac{1}{2Q_{\mathbf{q}\lambda}} \right)^{\frac{1}{2}} (b_{\mathbf{q}\lambda} + b_{-\mathbf{q}\lambda}^{\dagger}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i^0}, \quad (2)$$

N 为单位体积中离子数, M 为离子质量, V 为体系体积. 以下的讨论忽略对超导转变无贡献的离子振动动能, 离子间相互作用势能, 以及电子和在平衡位置上的离子间的相互作用能. 这样得到的哈密顿量称为约化哈密顿量, 用 H 表示. 为了讨论方便, 引入 Nambu 二分量电子场算符, 定义为^[9]

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \phi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \phi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}, \quad (3)$$

约化哈密顿量 H 可表示为

$$\begin{aligned}H = & \int d\mathbf{x} \bar{\phi}^{\dagger}(\mathbf{x}) \tau_3 \left[-\frac{\nabla^2}{2m} - \mu \right] \bar{\phi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \bar{\phi}^{\dagger}(\mathbf{x}) \tau_3 \bar{\phi}^{\dagger}(\mathbf{x}') \tau_3 \\ & \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2} \bar{\phi}(\mathbf{x}') \bar{\phi}(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{x} \bar{\phi}^{\dagger}(\mathbf{x}) \tau_3 \sum_i \mathbf{q}_i \cdot \nabla_{\mathbf{R}_i} V(\mathbf{x} - \mathbf{R}_i) \bar{\phi}(\mathbf{x}) \\ & + \text{常数项}. \quad (4)\end{aligned}$$

为了讨论 $T > 0\text{K}$ 问题, 采用 Matsubara 表象, 海森堡表象中的算符可定义为

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{x}x_0) &= e^{Hx_0} \phi(\mathbf{x}) e^{-Hx_0}, \\ \varphi_{\mathbf{q}\lambda}(x_0) &= e^{Hx_0} \varphi_{\mathbf{q}\lambda} e^{-Hx_0} = e^{Hx_0} (b_{\mathbf{q}\lambda} + b_{-\mathbf{q}\lambda}^{\dagger}) e^{-Hx_0}.\end{aligned} \quad (5)$$

同理, 可定义 2×2 矩阵格林函数 (又称 Горьков-Nambu 函数) 为

$$\begin{aligned}\hat{G}(\mathbf{x}x_0, \mathbf{x}'x'_0) &= -\langle UT[\bar{\phi}(\mathbf{x}\tau)\bar{\phi}^{\dagger}(\mathbf{x}'\tau')] \rangle \\ &= \begin{bmatrix} G(\mathbf{x}x_0, \mathbf{x}'x'_0) & F(\mathbf{x}x_0, \mathbf{x}'x'_0) \\ F^{\dagger}(\mathbf{x}x_0, \mathbf{x}'x'_0) & -G(\mathbf{x}'x'_0, \mathbf{x}x_0) \end{bmatrix}, \quad (6)\end{aligned}$$

其中 $\langle A \rangle \equiv \text{Tr}(e^{-\beta H} A) / \text{Tr} e^{-\beta H}$. $U = 1 + R + R^{\dagger}$. $R^{\dagger}$ (或 R) 可把 N 电子体系的状态变为相应的 $N + 2$ (或 $N - 2$) 电子体系的状态. 又为了讨论不均匀超导体的方便, 定义声子格林函数为

$$\begin{aligned}D(\mathbf{x}x_0, \mathbf{x}'x'_0) &= -\left\langle T \left[\sum_i \mathbf{q}_i(x_0) \cdot \nabla_{\mathbf{R}_i} V(\mathbf{x} - \mathbf{R}_i), \right. \right. \\ & \quad \left. \left. \sum_i \mathbf{q}_i(x'_0) \cdot \nabla_{\mathbf{R}_i} V(\mathbf{x}' - \mathbf{R}_i) \right] \right\rangle. \quad (7)\end{aligned}$$

这个定义和常用的不同之处在于把相互作用系数也包含在定义中.

从海森堡表象电子场算符运动方程及 2×2 矩阵格林函数定义出发, 按 Мигдал 定理^[1]在准确到 ω_D/ω_F 的近似下, 忽略所有对三端顶角部分的声子修正, 对库仑作用的处理和文献[9]相同, 即重整化为屏蔽库仑作用, 并使裸电子-离子势有屏蔽修正, $V(\mathbf{x}-\mathbf{R}_i) \rightarrow V_s(\mathbf{x}-\mathbf{R}_i)$. 在上述近似下, 即可得到 2×2 矩阵格林函数的运动方程为

$$\left(-\frac{\partial}{\partial x_0} \hat{I} + \frac{\nabla^2}{2m} \hat{t}_3 + \mu \hat{t}_3\right) \hat{G}(\mathbf{x}x_0, \mathbf{x}'x'_0) = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(x_0-x'_0)\hat{I} - \int d^4z \hat{t}_3 \hat{G}(\mathbf{x}x_0, \mathbf{z}z_0) \hat{t}_3 [D_s(\mathbf{x}x_0, \mathbf{z}z_0) + \tilde{V}_c(\mathbf{x}, \mathbf{z})] \hat{G}(\mathbf{z}z_0, \mathbf{x}'x'_0), \quad (8)$$

其中

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{t}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{t}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{t}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

x_0, x'_0, z_0 代表相应的虚时间. 声子格林函数角标 s 表示 $V(\mathbf{x}-\mathbf{R}_i) \rightarrow V_s(\mathbf{x}-\mathbf{R}_i)$. $\tilde{V}_c(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ 表示屏蔽库仑作用. (9)式用 Feynman 图表示见图 1.



图 1

(8)式即空间不均匀体系的 Элиашберг 方程. 它含有非线性积分项, 其求解是很困难的, 变换到动量空间求解较简单些. 以下设微粒 $2R \lesssim \xi$, 用壳层模型近似, 此时对 (8) 式的求解可得到极大的简化.

三、微粒壳层模型解

在动量空间讨论(8)式的求解问题. 按壳层模型把 D_s 函数中对离子求和分成对表面壳层离子求和以及对内部离子求和的两个部分, 把电声子作用势 V_s , 电子屏蔽库仑作用势 $\tilde{V}_c$ 作傅里叶级数展开, 并代入(2)式, 取单位体积, $N_{\text{表}} = N_{\text{内}} = N$ (即颗粒各处粒子数密度相同, 忽略表面壳层粒子数密度的微小下降), 则(8)式化为

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\partial}{\partial x_0} \hat{I} + \frac{\nabla^2}{2m} \hat{t}_3 + \mu \hat{t}_3 \right] \hat{G}(\mathbf{x}x_0, \mathbf{x}'x'_0) = \delta(x_0-x'_0)\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\hat{I} \\ & - \int d\mathbf{z} d\mathbf{z}_0 \hat{t}_3 \hat{G}(\mathbf{x}x_0, \mathbf{z}z_0) \hat{t}_3 \left\{ -\left\langle T \left[\sum_{i \text{ 表}} \left(\frac{1}{NMV_{\text{表}}} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \mathbf{\epsilon}_{\mathbf{q}\lambda} \cdot \nabla_{\mathbf{R}_{i \text{ 表}}} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{x}-\mathbf{R}_{i \text{ 表}})} \right. \right. \right. \\ & \times V_s(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{i \text{ 表}}} \left(\frac{1}{2Q_{\mathbf{q}\lambda}} \right)^{\frac{1}{2}} (b_{\mathbf{q}\lambda} + b_{\mathbf{q}\lambda}^+)_{\text{表}} + \sum_{i \text{ 内}} \left(\frac{1}{NMV_{\text{内}}} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{q}_1 \lambda_1} \mathbf{\epsilon}_{\mathbf{q}_1 \lambda_1} \cdot \nabla_{\mathbf{R}_{i \text{ 内}}} \\ & \times \sum_{\mathbf{p}_1} e^{i\mathbf{p}_1(\mathbf{x}-\mathbf{R}_{i \text{ 内}})} V_s(\mathbf{p}_1) e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{R}_{i \text{ 内}}} \left(\frac{1}{2Q_{\mathbf{q}_1 \lambda_1}} \right)^{\frac{1}{2}} (b_{\mathbf{q}_1 \lambda_1} + b_{\mathbf{q}_1 \lambda_1}^+)_{\text{内}} \left. \right] \right\} \\ & \times \left[\sum_{i \text{ 表}} \left(\frac{1}{NMV_{\text{表}}} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{q}_2 \lambda_2} \mathbf{\epsilon}_{\mathbf{q}_2 \lambda_2} \cdot \nabla_{\mathbf{R}_{i \text{ 表}}} \sum_{\mathbf{p}_2} e^{-i\mathbf{p}_2(\mathbf{z}-\mathbf{R}_{i \text{ 表}})} V_s(\mathbf{p}_2) e^{-i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{R}_{i \text{ 表}}} \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left(\frac{1}{2Q_{\mathbf{q}_2\lambda_2}} \right)^{\frac{1}{2}} (b_{\mathbf{q}_2\lambda_2}^+ + b_{-\mathbf{q}_2\lambda_2})_{\text{表}} + \sum_{j\text{内}} \left(\frac{1}{NM V_{\text{内}}} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{q}_3\lambda_3} \epsilon_{\mathbf{q}_3\lambda_3} \\
& \times \nabla_{\mathbf{R}_{j\text{内}}} \sum_{\mathbf{p}_3} e^{-i\mathbf{p}_3(\mathbf{z}-\mathbf{R}_{j\text{内}})} V_s(\mathbf{p}_3) e^{-i\mathbf{q}_3\mathbf{R}_{j\text{内}}} \left(\frac{1}{2Q_{\mathbf{q}_3\lambda_3}} \right)^{\frac{1}{2}} (b_{\mathbf{q}_3\lambda_3}^+ + b_{-\mathbf{q}_3\lambda_3})_{\text{内}} \Big] \Big] \Big] \\
& + \sum_{\mathbf{p}_4} e^{i\mathbf{p}_4(\mathbf{x}-\mathbf{z})} \tilde{V}_c(\mathbf{p}_4) \Big\} \hat{G}(\mathbf{z}z_0, \mathbf{x}'x'_0). \quad (10)
\end{aligned}$$

(10)式中为了简单起见,已设电子间库仑作用在微粒内是均匀的,这是考虑到电子间库仑作用对超导性影响相对来说较弱,而且它不象电声子作用那样有明显的表面壳层存在,因此对电子库仑作用作了均匀近似.

以下对(10)式求解的过程实际上也是逐步引入近似的过程.在相应运算步骤引入的近似有三个:壳层模型近似^[7]; Bergman 无序金属的三个简化近似^[5]; $2R \lesssim \xi$ 条件下 Cooper 平均相互作用近似^[8].

按壳层模型,表面声子严格局域在表面壳层内,因此动量空间声子格林函数满足

$$-\langle T(\varphi_{\mathbf{q}\lambda}(x_0)_{\text{内}}, \varphi_{\mathbf{q}'\lambda'}^+(z_0)_{\text{表}}) \rangle = -\langle T(\varphi_{\mathbf{q}\lambda}(x_0)_{\text{表}}, \varphi_{\mathbf{q}'\lambda'}^+(z_0)_{\text{内}}) \rangle = 0, \quad (11)$$

其中 $\varphi_{\mathbf{q}\lambda}(x_0)$ 定义为

$$\varphi_{\mathbf{q}\lambda}(x_0) = b_{\mathbf{q}\lambda}(x_0) + b_{-\mathbf{q}\lambda}^+(x_0). \quad (12)$$

一个实际的微粒表面声子自然不可能严格局域在表面壳层内,但表面波向体内深处衰减很快,因此(11)式是近似成立的.在(10)式中交叉项 $\left\{ \sum_{i\text{内}} [\cdots] \cdot \sum_{i\text{表}} [\cdots] \right\}$ 和数中有正数也有负数,总和中必有部分相干抵消,而 $\left\{ \sum_{i\text{内}} [\cdots] \cdot \sum_{i\text{内}} [\cdots] \right\}$ 和 $\left\{ \sum_{i\text{表}} [\cdots] \sum_{i\text{表}} [\cdots] \right\}$ 两项则不同,下面将证明它们可以化为各绝对值平方项之和.应用上述近似,(10)式可化为

$$\begin{aligned}
& \left[-\frac{\partial}{\partial x_0} \hat{t} + \frac{\nabla^2}{2m} \hat{t}_3 + \mu \hat{t}_3 \right] \hat{G}(\mathbf{x}x_0, \mathbf{x}'x'_0) = \delta(x_0 - x'_0) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\
& - \int d\mathbf{z} d\mathbf{z}_0 \hat{t}_3 \hat{G}(\mathbf{x}x_0, \mathbf{z}z_0) \hat{t}_3 \left\{ \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\mathbf{q}\lambda} [\mathcal{J}'_{\mathbf{p}_1\mathbf{q}\lambda\text{内}} \mathcal{J}'_{\mathbf{p}_2\mathbf{q}\lambda\text{内}}{}^* D_{\lambda(\mathbf{q}, x_0 - z_0)\text{内}} \right. \\
& + \mathcal{J}'_{\mathbf{p}_1\mathbf{q}\lambda\text{表}} \mathcal{J}'_{\mathbf{p}_2\mathbf{q}\lambda\text{表}}{}^* D_{\lambda(\mathbf{q}, x_0 - z_0)\text{表}}] e^{i\mathbf{p}_1\mathbf{x} - i\mathbf{p}_2\mathbf{z}} + \sum_{\mathbf{p}} \tilde{V}_c(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}(\mathbf{x} - \mathbf{z})} \Big\} \\
& \cdot \hat{G}(\mathbf{z}z_0, \mathbf{x}'x'_0), \quad (13)
\end{aligned}$$

其中

$$\mathcal{J}'_{\mathbf{p}\mathbf{q}\lambda} = -i\epsilon_{\mathbf{q}\lambda} \cdot \mathbf{p} V_s(\mathbf{p}) \left(\frac{1}{2NM V Q_{\mathbf{q}\lambda}} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_i - i\mathbf{q}\mathbf{R}_i^0}, \quad (14)$$

$$D_{\lambda(\mathbf{q}, x_0 - z_0)} = -\langle T[\varphi_{\mathbf{q}\lambda}(x_0), \varphi_{\mathbf{q}\lambda}^+(z_0)] \rangle. \quad (15)$$

在(13),(14)两式中 $\mathcal{J}$ 函数上有“'”,表示对原子的求和不是在单位体积内作的,而是对相应体积而言的.

(13)式所讨论的体系仍是有表面壳层和内部的不均匀体系,我们不准一般地求解这样的方程,但由(13)式可看出有表面壳层的超导体中的电声子作用是由表面壳层和内部的电声子作用相加而成.当讨论的超导体是直径 $2R \lesssim \xi$ 的微粒时,可对(13)式作重要

的简化处理. 微粒尺寸条件 $2R \leq \xi$ 有明显的物理意义, 即电子近似在微粒整个体积内关联, 因此微粒内性质不同的两个区域中的电声子作用都对电子关联有贡献. 所以可以引入等效电声子作用 $[EP]_{\mathbf{p}, \mathbf{p}_2, \mathbf{q}, \lambda}$, 它由两部分相加而成:

$$[EP]_{\mathbf{p}, \mathbf{p}_2, \mathbf{q}, \lambda} = [\mathcal{J}'_{\mathbf{p}_1, \mathbf{q}, \lambda} \mathcal{J}'_{\mathbf{p}_2, \mathbf{q}, \lambda} D_{\lambda}(\mathbf{q}, x_0 - z_0)_{\text{内}} + \mathcal{J}'_{\mathbf{p}_1, \mathbf{q}, \lambda} \mathcal{J}'_{\mathbf{p}_2, \mathbf{q}, \lambda}^* D_{\lambda}(\mathbf{q}, x_0 - z_0)_{\text{表}}]. \quad (16)$$

相应地有表面壳层的不均匀的微粒可以等效地考虑为由 $[EP]_{\mathbf{p}, \mathbf{p}_2, \mathbf{q}, \lambda}$ 所表示的均匀的微粒. 显然, 用等效的均匀电声子作用描写微粒超导性和用有内部及表面壳层电声子作用不均匀性的微粒描写超导性是等效的(此即 Cooper 平均相互作用近似^[8]).

以下对微粒 ($2R \leq \xi$) 超导性的讨论转化为讨论具有用等效电声子作用所描写的均匀微粒的超导性问题. 对于后者其格林函数将只和空间变量之差有关. 因此, 在对 (13) 式作傅里叶变换时, $\hat{G}$ 将只和一个动量值有关. 前面已分析过表面壳层内原子是无序的. 在以下的处理中引用 Bergman 处理大块无序金属时所作的三个简化假设^[5], 即无序金属中声子谱不变, 和有序时相同; 原子势是刚性的, 与原子位置无关; 原子对平衡位置的无序偏离 $\delta \mathbf{r}_i$ 可用高斯分布表示. 按 Bergman 第一个假设可以认为表面壳层的声子谱对应着表面壳层原子均匀分布的情形. 按 Bergman 第二个假设, 运算的适当步骤可把对原子的求和 $\left(\sum_i\right)$ 转化为求和中任一项的 NV 倍(此处 V 代表求和所遍及的体积). 把 (13) 式的傅里叶变换式用高斯分布求平均(其求平均之方法同文献^[5]), 可得

$$\left(i\omega_n \hat{I} - \frac{P^2}{2m} \hat{t}_3 + \mu \hat{t}_3\right) \hat{G}(\hat{P}, i\omega_n) = 1 - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p}, m, \lambda} \hat{t}_3 \hat{G}(\mathbf{p}, i\omega_m) \hat{t}_3 \cdot \{[EP]_{\mathbf{P}-\mathbf{p}, \mathbf{q}, \lambda, \omega_n, \omega_m}^{(1)} + \tilde{V}_c(\mathbf{P} - \mathbf{p})\} \cdot \hat{G}(\mathbf{P}, i\omega_n), \quad (17)$$

其中 $[EP]_{\mathbf{P}-\mathbf{p}, \mathbf{q}, \lambda, \omega_n, \omega_m}^{(1)}$ 代表等效电声子作用, 和 (16) 式有系数之差, 定义为

$$[EP]_{\mathbf{P}-\mathbf{p}, \mathbf{q}, \lambda, \omega_n, \omega_m}^{(1)} = V_{\text{表}} |\mathcal{J}_{\mathbf{P}-\mathbf{p}, \lambda}|^2_{\text{表之动量守恒部分}} \cdot D_{\lambda}(\mathbf{P} - \mathbf{p}, i\omega_n - i\omega_m)_{\text{表}} + \int d\mathbf{q} V_{\text{表}} \cdot |\mathcal{J}_{\mathbf{P}-\mathbf{p}, \lambda}|^2_{\text{表之动量不守恒部分}} \cdot D_{\lambda}(\mathbf{q}, i\omega_n - i\omega_m)_{\text{表}} + V_{\text{内}} \cdot |\mathcal{J}_{\mathbf{P}-\mathbf{p}, \lambda}|^2_{\text{内}} \cdot D_{\lambda}(\mathbf{P} - \mathbf{p}, i\omega_n - i\omega_m)_{\text{内}}, \quad (18)$$

$$|\mathcal{J}_{\mathbf{P}-\mathbf{p}, \lambda}|^2_{\text{表之动量不守恒部分}} = |V_s(\mathbf{P} - \mathbf{p})|^2 \cdot |\mathbf{P} - \mathbf{p}|^2 \cdot \frac{1}{2MN\Omega_{\mathbf{q}, \lambda}} \cdot N^2(1 - e^{-|\mathbf{P}-\mathbf{p}|^2 \delta^2}), \quad (19)$$

$$|\mathcal{J}_{\mathbf{P}-\mathbf{p}, \lambda}|^2_{\text{表之动量守恒部分}} = |V_s(\mathbf{P} - \mathbf{p})|^2 \cdot |\mathbf{P} - \mathbf{p}|^2 \cdot \frac{1}{2MN\Omega_{\mathbf{q}, \lambda}} \cdot N^2 \cdot e^{-|\mathbf{P}-\mathbf{p}|^2 \delta^2} \cdot \delta_{\mathbf{P}-\mathbf{p}, \mathbf{q}}, \quad (20)$$

其中 δ 表示无序晶体原子对理想点阵之平均偏移.

把 (17) 式中的声子格林函数用谱函数表示, 并且把对 $\mathbf{p}$ 求和用积分代换, 设费密面电子态密度 $N(0)_{\text{表}} = N(0)_{\text{内}} = N(0)$, 和均匀超导体的相应方程比较, 即可得

$$(V_{\text{内}} + V_{\text{表}})(\alpha^2 F)_{\text{等效}} = V_{\text{表}}(\alpha^2 F)_{\text{表}} + V_{\text{内}}(\alpha^2 F)_{\text{内}}, \quad (21)$$

其中

$$(\alpha^2 F)_{\text{表}} = \sum_{\lambda} (\alpha_{\lambda}^2 F_{\lambda})_{\text{表}}, \quad (22)$$

$$(\alpha^2 F)_{\text{内}} = \sum_{\lambda} (\alpha_{\lambda}^2 F_{\lambda})_{\text{内}},$$

$$(\alpha_\lambda^2 F_\lambda)_{\text{表}} = (\alpha_\lambda^2(\nu) F_\lambda(\nu))_{\text{表}} = \frac{N(0)}{8\pi p_F^2} \int d\Omega_q \int_0^{2p_F} q dq [V_{\text{表}} \cdot |\mathcal{J}_{q\lambda}|^2_{\text{表动守恒}} B_\lambda(\mathbf{q}\nu)_{\text{表}} \\ + \sum_Q V_{\text{表}} |\mathcal{J}_{Q\lambda}|^2_{\text{表动不守恒}} \cdot B_\lambda(\mathbf{Q}\nu)_{\text{表}}], \quad (23)$$

$$(\alpha_\lambda^2 F_\lambda)_{\text{内}} = (\alpha_\lambda^2(\nu) F_\lambda(\nu))_{\text{内}} = \frac{N(0)}{8\pi p_F^2} \int d\Omega_q \int_0^{2p_F} q dq V_{\text{内}} \cdot |\mathcal{J}_{q\lambda}|^2_{\text{内}} \cdot B_\lambda(\mathbf{q}, \nu)_{\text{内}}. \quad (24)$$

以下采用和文献[12, 13]相同的方法即可得出决定 T_c 的隐函数方程. 和文献[12, 13]结果所不同的只是把 $\alpha^2 F$ 换以 $(\alpha^2 F)_{\text{等效}}$ 而已. 由此可见, 只要已知表面壳层及内部的 Элиашберг 函数, 就能求出微粒 ($2R \lesssim \xi$) 超导体的 T_c . 在我们的另一个工作中, 适当选取了一些超导体的 Элиашберг 函数, 根据本文(21)式求出了微粒超导体之等效 Элиашберг 函数, 同时自然的包含了微粒之尺寸参数, 并进一步用已有之 T_c 公式(见文献[14]), 求出 Pb, Sn, In 等微粒超导体的 T_c 随尺寸变化的关系, 取得了和实验数据较好的符合^[7].

四、讨 论

本文(21)式是 Cooper 早年理论结果^[8]的推广. 由文献[15, 16]的 T_c 公式易证, 在弱耦合极限下, ω^{-1} 次矩 $\lambda \equiv 2 \int \frac{\alpha^2 F}{\omega} d\omega \cong N(0)\nu$, 按照文献[8]的看法, 对微粒有等效的 λ 为

$$\lambda = \frac{\lambda_{\text{表}} V_{\text{表}} + \lambda_{\text{内}} V_{\text{内}}}{V_{\text{表}} + V_{\text{内}}}. \quad (25)$$

(25)式是用(21)式求 ω^{-1} 次矩的特殊情形. 本文在得到(21)式时和 Cooper^[8] 同样, 也使用了微粒之平均相互作用近似, 但是求 $\alpha^2 F$ 的等效公式时各部分 $\alpha^2 F$ 的权重因子——体积是证明的结果, 文献[8]给出的(25)式中的体积权重因子的形式, 严格来说, 只是一个假设. 易证, 在 $N(0)_{\text{表}} \cong N(0)_{\text{内}} \cong N(0)$ 时, $(\alpha^2 F)_{\text{等效}} = [V_{\text{表}} N(0)_{\text{表}} (\alpha^2 F)_{\text{表}} + V_{\text{内}} N(0)_{\text{内}} (\alpha^2 F)_{\text{内}}] / [V_{\text{表}} N(0)_{\text{表}} + V_{\text{内}} N(0)_{\text{内}}]$.

参 考 文 献

- [1] M. Strongin, *Physica*, **55** (1971), 155.
- [2] S. Kobayashi, *Solid State Phys. (Japan)*, **10** (1975), 237.
- [3] B. Abeles, "Applied Solid State Science," ed. R. Wolf, **6** (1976), 83.
- [4] Г. М. Элиашберг, *ЖЭТФ*, **38**(1960), 966.
- [5] G. Bergman, *Phys. Rev.*, **B3** (1971), 3797.
- [6] R. E. Allen, F. W. De Wette, *Phys. Rev.*, **179** (1969), 873.
- [7] 赵志贤、刘福绥、韩汝珊, 物理学报, 待发表.
- [8] Leon N. Cooper, *Phys. Rev. Letters*, **6** (1961), 689.
- [9] D. J. Scalapino, J. R. Schriber, J. M. Wilkins, *Phys. Rev.*, **148** (1966), 263.
- [10] Yoichiro Nambu, *Phys. Rev.*, **117** (1960), 648.
- [11] А. Б. Мигдал, *ЖЭТФ*, **34** (1958), 1438.
- [12] G. Bergman, *Z. Phys.*, **263** (1973), 59.
- [13] P. B. Allen, R. C. Dynes, *Phys. Rev.*, **B12** (1975), 905.
- [14] Steven G. Louie, Marvin L. Cohen, *Solid State Com.*, **22** (1977), 1.
- [15] W. L. McMillan, *Phys. Rev.*, **167** (1968), 31.
- [16] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schriber, *Phys. Rev.*, **108** (1957), 1175.

BASIC EQUATION OF INHOMOGENEOUS SUPERCONDUCTOR AND ITS SOLUTION FOR SMALL PARTICLES

LIU FU-SUI

(Department of Physics, Beijing University)

ABSTRACT

This paper uses the Nambu method in Matsubara representation to extend the Eliashberg strong-coupling superconductivity theory for the case of spatial variance. The shell model solution for small particles is given.