

有效声子谱对超导体临界温度的影响*

李 宏 成

(中国科学院物理研究所)

提 要

本文由超导体强耦合能隙方程出发, 对 64 种有效声子谱求得了近 3500 个临界温度的数值解。它们说明, 在谱面积 A 不变时, T_c 具有条件极值 $(T_c/A)_{\max}$, T_c 主要取决于 $\alpha^2 F(\omega)$ 上峰的位置及其面积, 与峰的宽度关系不大。控制 $\langle \omega \rangle$ 及 $\langle \omega^2 \rangle$ 两个参量时, 用双 δ 谱来代替 L 谱所产生的误差为 3.2%。本文分析并澄清了文献中关于“ $\lambda = 2$ 极限”的争论。

一、引 言

给定有效声子谱 $\alpha^2 F(\omega)$ 与库仑赝势 μ^* 后, 根据超导体强耦合理论^[1], 通过数值计算, 可求出超导体的临界温度 T_c 。但是由于计算过于复杂, 直到 1968 年之后, 由于电子计算机的广泛采用, 关于 T_c 的讨论才取得了显著的进展^[2-8]。

1968 年 McMillan^[2] 根据 Nb 的声子谱 $F(\omega)$, 并对 α^2 作了简化假设, 求得了 25 个 T_c 的数值解, 并得出一个近似公式:

$$T_c = \frac{\langle \omega \rangle}{1.20} \exp \left\{ - \frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - (1 + 0.62\lambda)\mu^*} \right\}, \quad (1.1)$$

其中

$$\lambda = 2 \int_0^\infty \alpha^2 F(\omega) \frac{d\omega}{\omega}, \quad (1.2)$$

$$\langle \omega^n \rangle = \frac{2}{\lambda} \int_0^\infty \omega^{n-1} \alpha^2 F(\omega) d\omega, \quad (1.3)$$

λ 称为电声子耦合常数。

McMillan 分析了一些超导体的 λ 值以后, 认为对于同一类超导体,

$$\lambda \langle \omega^2 \rangle = \text{const.} \quad (1.4)$$

他根据 (1.1) 与 (1.4) 式得出两个推论: (1) $\langle \omega \rangle$ 降低, 即声子软化时, T_c 升高; (2) 对于 $\mu^* = 0$, 在 $\lambda = 2$ 时, T_c 最大。后来人们把它称为“ $\lambda = 2$ 极限”。

Bergmann^[3] 等人对一系列已测得 $\alpha^2 F(\omega)$ 的超导体, 计算了 T_c 对 $\alpha^2 F(\omega)$ 的函数微商 $\frac{\delta T_c}{\delta \alpha^2 F(\omega)}$ (简称为 $D(\omega)$)。 $D(\omega)$ 给出 $\alpha^2 F(\omega)$ 不同部分对 T_c 贡献的大小。关于 $D(\omega)$

* 1978 年 1 月 17 日收到。

的性质,他们得出: $D(\omega)$ 恒大于零;在低频时 $D(\omega) \propto \omega$;在高频时 $D(\omega) \propto \frac{1}{\omega}$; 中间有一个极大值,位于 $\omega \cong 2\pi T_c$ 附近. 他们还得出,声子软化有时可提高 T_c , 有时可使 T_c 降低,当 $D(\omega)$ 的峰与 $\alpha^2 F(\omega)$ 的低频峰(位于 ω_{TA})重合时, T_c 达到极大 $T_{c \max}$, 因而 $\frac{T_{c \max}}{\omega_{TA}} \cong \frac{1}{2\pi}$.

Allen 和 Dynes 采用三种有效声子谱 $\alpha^2 F(\omega)$, 利用矩阵形式的能隙方程,求得了 300 多个 T_c 的数值解^[4]. 他们得出, T_c 随 λ 增加而单调上升,不存在极大值,否定了“ $\lambda = 2$ 极限”. 他们认为,为了提高 T_c , 要“不断地努力使 λ 超过 2”^[5].

Leavens^[6] 讨论了对 T_c 最有利的谱形问题,证明了最有利的谱形为 Einstein 谱:

$$\alpha^2 F(\omega) = A\delta(\omega - \omega_0), \quad (1.5)$$

A 为 $\alpha^2 F(\omega)$ 曲线下的面积:

$$A = \int \alpha^2 F(\omega) d\omega. \quad (1.6)$$

他得出,对于 $\mu^* = 0$ 和 A 不变的情况,在 $\lambda = 1.143$ 时, T_c 达到极大值 $T_{c \max} = 0.2309A$. 这个结果又支持 McMillan T_c 有极大值的结论. Leavens 还指出^[7], Allen, Dynes 得出的 T_c 渐近公式 $T_c = 0.182\sqrt{\lambda\langle\omega^2\rangle}$ 在一般情况下是不成立的.

综上所述,由于隧道实验的进展,积累了一些超导体的 $\alpha^2 F(\omega)$, 又由于电子计算机的广泛采用,进行了大量的数值计算,关于 T_c 的研究取得了显著的进展. 但由于不同的研究者从不同的侧面来讨论这个问题,所得结论存在一些分歧,有些分歧甚至是很尖锐的. 它直接涉及人们对提高超导体 T_c 的前途的估计问题. “ $\lambda = 2$ 极限”曾一度使人们悲观,而 Allen-Dynes 的“ T_c 无限制”的结论又使人们很乐观. 因此,将 $\alpha^2 F(\omega)$ 对 T_c 的影响问题,作一个更全面的讨论,澄清分歧,是十分必要的.

本文由矩阵形式的能隙方程出发,采用几类模型化的声子谱,对 64 种不同的 $\alpha^2 F(\omega)$ 谱形求得了近 3500 个数值解,讨论谱形各种参数对 T_c 的影响,澄清目前文献上存在的分歧.

二、计算方法

本文的计算方法与文献[4]相似,要点如下. 为了求出 T_c , 需对下列方程求解:

$$\det(K_{mn}) = 0, \quad (2.1)$$

$$K_{mn} = \lambda_{m-n} + \lambda_{m+n+1} - 2\mu^*(N) - \delta_{mn} \left[2m + 1 + \lambda_0 + 2 \sum_{l=1}^m \lambda_l \right], \quad (2.2)$$

$$\lambda_n = 2 \int_0^\infty \frac{\alpha^2 F(\omega) \omega d\omega}{\omega^2 + (2\pi n T)^2}, \quad (2.3)$$

$$\frac{1}{\mu^*(N)} = \frac{1}{\mu_c^*} + \ln \left(\frac{\omega_c}{\omega_N} \right), \quad (2.4)$$

$$\omega_N = (2N + 1)\pi T.$$

μ_c^* 是在切断频率 ω_c 下的等效库仑赝势.

根据(1.2)式,给定 $\alpha^2 F(\omega)$ 后, λ 就固定了.为了计算谱形不变下的 T_c - λ 曲线,我们将上面的方程改变一下.引入 $G(u)$:

$$G(u) = \frac{2}{\lambda} \cdot \frac{\alpha^2 F(u)}{u}, \quad (2.5)$$

$$u = \frac{\omega}{\omega_0}, \quad x = \frac{T}{\omega_0}, \quad (2.6)$$

可把(2.3)式改写为

$$\lambda_n = \lambda V(n), \quad (2.7)$$

$$V(n) = \int_0^\infty \frac{G(u)u^2 du}{u^2 + (2\pi n x)^2}. \quad (2.8)$$

$G(u)$ 具有归一性 $\int G(u)du = 1$,它只与 $\alpha^2 F(\omega)$ 的形状有关,而与 $\alpha^2 F(\omega)$ 的绝对值无关. $V(n)$ 只与谱形有关与 λ 大小无关.在改变 λ 时,只需按(2.7)式简单地计算 λ_n 即可,而无需再进行积分计算了.

计算时,先给定谱形 $\alpha^2 F(\omega)$,求出归一化的 $G(u)$,计算出 $V(n)$,再给定 x 值(即 T_c 值),将(2.7)式中的 λ 作为可调参量,调整 λ ,使(2.1)式成立,从而确定了一组 x 与 λ 数值.这样求出的是 $\frac{T_c}{\omega_0}$ - λ 曲线.

利用(1.3)式,可得

$$\frac{T_c}{\langle \omega \rangle} = \frac{x}{\bar{\omega}_1}, \quad (2.9)$$

$$\bar{\omega}_n = \frac{\langle \omega^n \rangle^{1/n}}{\omega_0}. \quad (2.10)$$

根据 A 与 $\langle \omega \rangle$ 的定义((1.6)与(1.3)式)可得

$$\frac{T_c}{A} = \frac{2x}{\lambda \bar{\omega}_1}. \quad (2.11)$$

因而由 x - λ 曲线可以很容易地得出 $\frac{T_c}{\langle \omega \rangle}$ - λ 与 $\frac{T_c}{A}$ - λ 曲线.

为了进行较广泛的讨论,我们着重于几类模型化的声子谱.其中包括最简单的 Einstein 谱,如(1.5)式所示.稍复杂一点的谱可用两个 δ 峰来表示:

$$\alpha^2 F(\omega) = \beta [a\delta(\omega - b\omega_0) + \delta(\omega - \omega_0)], \quad (2.12)$$

简称为双 δ 谱. $b\omega_0$ 为双 δ 谱的低频峰,与 ω_{TA} 对应.比较接近实际的谱形是 Lorentz 型谱,它可写为

$$\alpha^2 F(u) = \begin{cases} \beta \left[\frac{a}{(u-b)^2 + c^2} - \frac{a}{(u+b)^2 + c^2} \right. \\ \quad \left. + \frac{1}{(u-1)^2 + d^2} - \frac{1}{(u+1)^2 + d^2} \right], & u \leq 1+d, \\ 0 & u > 1+d, \end{cases} \quad (2.13)$$

简称为L谱。L谱具有两个峰,都可具有一定的宽度。 a, b, c, d 可改变峰的相对高度、位置和峰的宽度。 β 与 ω_0 改变 $\alpha^2 F(\omega)$ 的高度与宽度,而不影响它的相对形状。

对于上述几类模型谱,当 a, b, c, d 中有一个改变后,就得到了一种新的谱形。取不同的参量,可构成相当广泛的谱形。本文对其中64种谱形进行了计算,得到了大约3500个 T_c 数值解。

为了方便起见,我们采用 $\omega_c = 10\omega_0$ 作为切断频率。在计算中,不固定矩阵的阶数 N ,而是按下式:

$$N = IFIX \left\{ \frac{5\omega_0}{\pi T_c} - 0.5 \right\}$$

选择 N ,以使求和切断频率 ω_N 尽可能地接近于预定的 ω_c ,这是与文献[4]的作法不同的。在这里 $IFIX(\xi)$ 表示取宗量 ξ 的整数部分。我们把 N 的最大值限制为32。

三、结 果

1. $\frac{T_c}{\langle \omega \rangle} - \lambda$ 与 $\frac{T_c}{A} - \lambda$ 曲线的一般特点

典型的结果如图1至3所示。图1为双 δ 谱的结果。为了清楚起见,图1只划出了 b 为0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 0.95的五组曲线。在图上 $b = 0.95$ 的双 δ 谱与Einstein谱的结果不能区分。

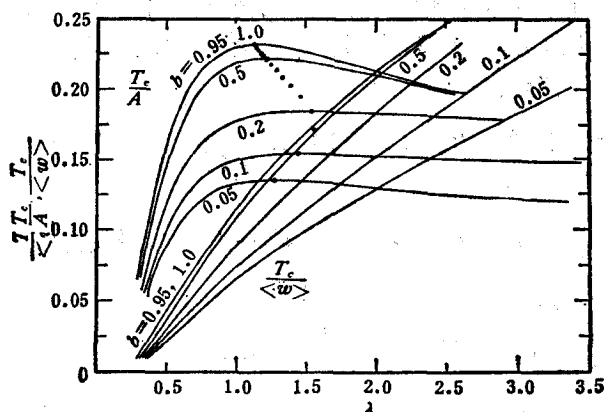


图1 双 δ 谱的 $\frac{T_c}{\langle \omega \rangle} - \lambda$ 与 $\frac{T_c}{A} - \lambda$ 曲线

$\mu^* = 0, a = 1, \text{“} \cdot \text{”}$ 为 $\frac{T_c}{A}$ 极大值位置

图2给出 $b = 0.5, \mu^* = 0.1, c$ 与 d 取各种值时L谱的结果。由于同样理由只给出了 $c = d = 0.05, 0.2, 0.4$ 三组结果,其余的结果与此类似。为了对比,图中还划出了 $\mu^* = 0.1, b = 0.5$ 的双 δ 谱结果。

这两个图说明, $\frac{T_c}{\langle \omega \rangle}$ 与 $\frac{T_c}{\omega_0}$ 随 λ 的增加而单调上升。对于不同的谱,曲线形状相似,只是曲率不同。另一方面, $\frac{T_c}{A} - \lambda$ 曲线上存在一个很宽的峰。与这个峰的位置相对应

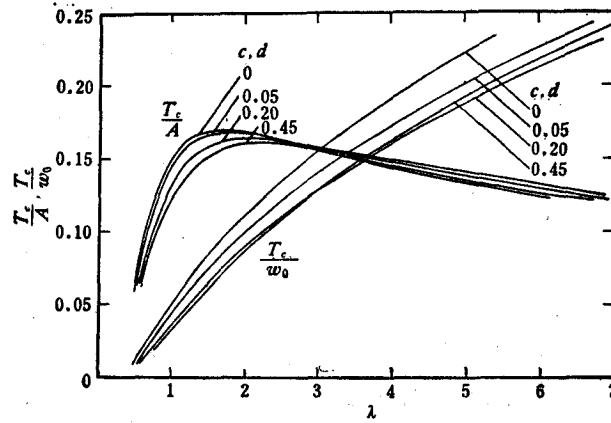


图2 L谱的 $\frac{T_c}{A}-\lambda$ 与 $\frac{T_c}{w_0}-\lambda$ 曲线

$\mu^* = 0.1, b = 0.5, a = 1$

的 λ 记为 λ_m , 峰的高度记为 $\left(\frac{T_c}{A}\right)_{\max}$.

这些特点是普遍的,与具体的谱形无关.

$\frac{T_c}{A}-\lambda$ 曲线的物理意义是: 保持 $\alpha^2 F(\omega)$ 的相对形状不变 (a, b, c, d 固定), 谱面积 A 固定, 通过 w_0 的减小而使 λ 增加时, T_c 变化的情况. 我们把声子谱的这种变化叫作整体软化过程. 在整体软化过程中, T_c 通过一个极大值, 然后下降. 这说明, 声子软化有时使 T_c 升高, 有时使 T_c 降低.

对于 Einstein 谱, 在 $\mu^* = 0$ 时 $\lambda_m = 1.143$, $\left(\frac{T_c}{A}\right)_{\max} = 0.23086$ 与 Leavens 的结果一致.

我们发现, 对于双 δ 谱, $b = 0.05$ 与 0.1 , $\mu^* = 0$ 与 0.1 四种情况下, $\frac{T_c}{A}-\lambda$ 曲线上具

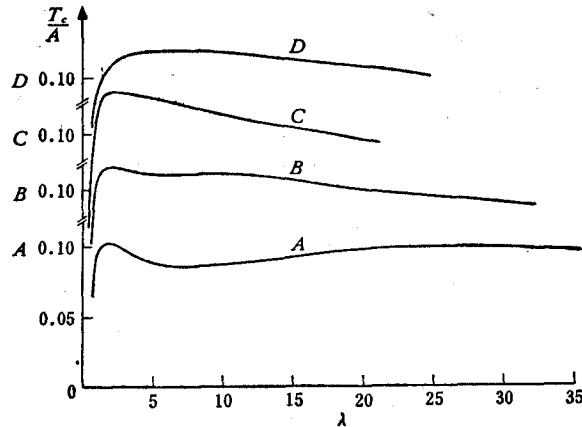


图3 几种不同的 $\frac{T_c}{A}-\lambda$ 曲线 为了清楚起见, B, C, D 三条线的纵坐标分别向上移动了一段距离.

A, B, C 为双 δ 谱, b 值分别为 $0.05, 0.10, 0.15$, D 为 L 谱 $b = 0.1, c = d = 0.05$. 全部 $\mu^* = 0.1$

有两个峰值(图3)。在其它情况下,没有这种现象。

$\frac{T_c}{A}-\lambda$ 曲线具有一个极大值与在少数情况下具有两个极大值的现象,可用函数微商 $D(\omega)$ 的特性来解释。由于 $D(\omega)$ 具有一个极大值,在 $\alpha^2 F(\omega)$ 具有两个峰,而这两个峰距离较大且较尖锐的情况下,可以预期 $\frac{T_c}{A}-\lambda$ 将具有两个极值,它们将分别(近似地)由 $\alpha^2 F(\omega)$ 的两个峰产生。由于 $D(\omega)$ 峰是很平缓的,因此 $\frac{T_c}{A}$ 的峰将是更平缓的。当 $\alpha^2 F(\omega)$ 上两个峰的距离较小 ($b > 0.15$) 或峰不够尖锐时, $\frac{T_c}{A}$ 的两个峰将重合在一起而成为一个峰。

同样地,由于 $D(\omega)$ 的峰很宽, $\alpha^2 F(\omega)$ 的两个峰对 T_c 的贡献不是孤立的,而是互相有影响的。一般地说来,不是 $\alpha^2 F(\omega)$ 的低频峰 ω_{TA} 恰好与 $D(\omega)$ 峰重合时, $\frac{T_c}{A}$ 达到极大。

2. $\frac{T_c}{A}-\lambda$ 极大值的特性

为了说明 $\left(\frac{T_c}{A}\right)_{\max}$ 与谱形参数的关系,图1中用“·”符号标出每条曲线的 $\left(\frac{T_c}{A}\right)_{\max}$ 位置。有些情况未画出整个曲线,只标出了极大值的位置。

图4给出了 $\mu^* = 0$ 与 0.1 时双 δ 谱的 $\left(\frac{T_c}{A}\right)_{\max}$ 与谱形参数 b 的关系 ($a \equiv 1$)。图5给出了对应的 λ_m-b 曲线。图4表明, $\left(\frac{T_c}{A}\right)_{\max}$ 随 b 减小而减小。在 $b > 0.5$ 时,变化较小,而在 $b < 0.4$ 时,变化较快。 λ_m-b 曲线也有类似的情况。但 λ_m 随 b 的下降而上升。当 b 接近 0.15 时, λ_m 变化很快,而在 $b < 0.15$ 时,又突然下降。 λ_m-b 曲线上的峰值与 $b < 0.15$ 时, $\frac{T_c}{A}-\lambda$ 有两个峰有关。

为了反映 $\left(\frac{T_c}{A}\right)-\lambda$ 的峰很宽这一特点,我们把 $\frac{T_c}{A} = 0.98 \left(\frac{T_c}{A}\right)_{\max}$ 所对应的两个 λ 值称为 $\lambda_{m1}, \lambda_{m2}$, 图5同时划出了它们随 b 变化的情况。此图说明, λ_{m1} 与 λ_{m2} 差别很大。这表明,尽管 λ 有一个最佳值 λ_m , 但当 λ 显著地偏离 λ_m 时, $\frac{T_c}{A}$ 下降并不多,仍很

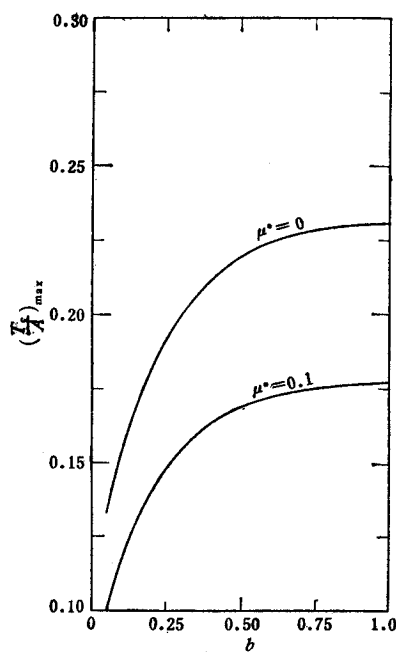


图4 $\left(\frac{T_c}{A}\right)_{\max}$ 与谱形参数 b 的关系

接近于 $\left(\frac{T_c}{A}\right)_{\max}$.

图 5 同时给出了某些 L 谱的 λ_m 值. 它说明, 在谱形差别相当大时, λ_m 值差别并不大, 因而可以大体上给出一个 λ 的最佳值范围:

$$1.2 < \lambda < 2, \quad (\mu^* = 0.1). \quad (3.1)$$

可以粗略地说, 对于大多数不十分特殊的谱形, 只要 λ 在 (1.2, 2) 区间内, $\frac{T_c}{A}$ 就与其最佳值接近. λ 过小与过大均是不利的.

对于一些特殊的谱形 (b 在 0.1—0.3 间) λ 的最佳范围要比 (3.1) 式给出的值高一些.

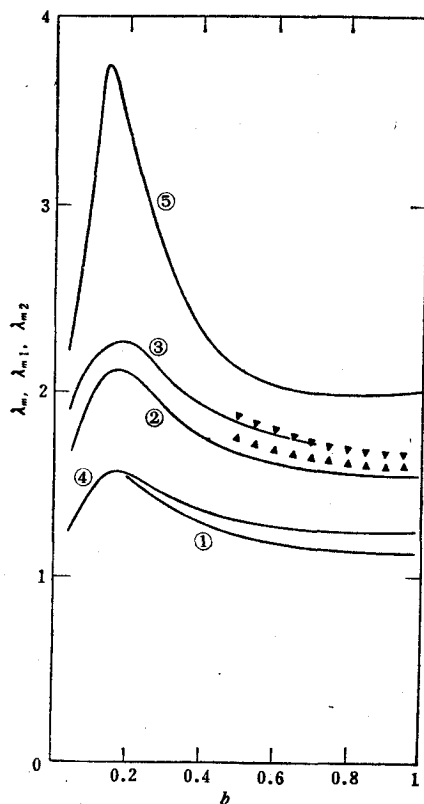


图 5 λ 的最佳值 λ_m 以及 λ_{m1} 和 λ_{m2} 与谱形参数 b 的关系
曲线 ①, ②, ③ 为双 δ 谱的 λ_m - b 曲线, μ^* 值分别为 0, 0.1 与 0.15; ④ 为双 δ 谱的 λ_{m1} - b 曲线; ⑤ 为双 δ 谱的 λ_{m2} - b 曲线, 二者的 μ^* 均为 0.1.

▼ 为 L 谱的 λ_m , $\mu^* = 0.1$, $c = d = 0.1$;
▲ 为 L 谱的 λ_m , $\mu^* = 0.1$, $c = d = 0.05$

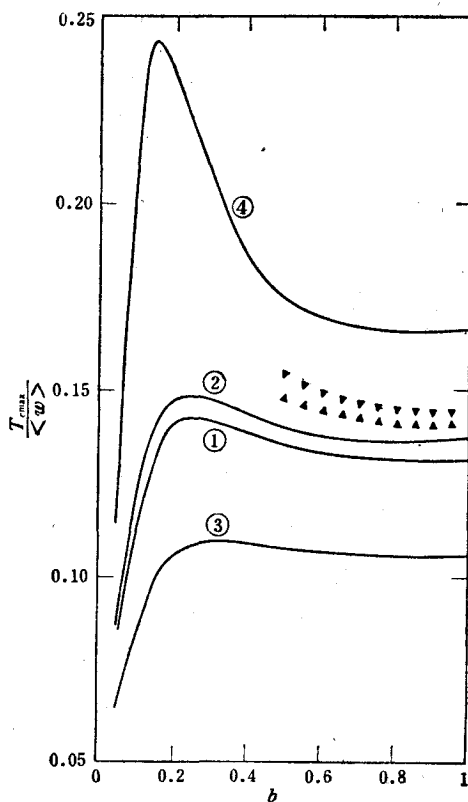


图 6 $T_{c,\max}/\langle\omega\rangle$ 与谱形参数 b 的关系
① 与 ② 为双 δ 谱, μ^* 分别为 0 与 0.1 的情况; ▲ 与 ▼ 为 L 谱, c 分别为 0.05 与 0.1 的情况; ③ 与 ④ 是与 ① 相对应, 但 λ 值分别取 λ_{m1} 与 λ_{m2} 时的 $T_c/\langle\omega\rangle$ 值与 b 的关系

图 6 给出了 $\frac{T_{c,\max}}{\langle\omega\rangle}$ 值随 b 变化的情况. 可以给出与 (3.1) 式相对应的用 $\frac{T_c}{\langle\omega\rangle}$ 表示的判据:

$$0.11 < \frac{T_c}{\langle \omega \rangle} < 0.17, \quad (\mu^* = 0.1). \quad (3.2)$$

用它也可以判断 T_c 是否接近最佳值了.

图 7 给出了某些谱形的 $\frac{T_{c \max}}{\omega_{TA}}$ 随 b 变化的情况. 图 7 说明, $\frac{T_{c \max}}{\omega_{TA}}$ 随 b 值而变, 且变化范围相当大. Bergmann 等人^[3]给出的 $\frac{T_{c \max}}{\omega_{TA}} \cong \frac{1}{2\pi}$, 且与谱形无关的结果看来是不成立的, 他们忽略了这个量随谱形变化的特点. 我们的结果说明, $\frac{T_{c \max}}{\langle \omega \rangle}$ 与 $\frac{T_{c \max}}{\omega_{TA}}$ 比起来, 有一个平坦的部分, 且变化较小, 作为 T_c 是否接近最佳值的判据更合适些.

3. 横声子峰软化的影响

在讨论声子软化对 T_c 的影响时, 还需要讨论高频峰不动, 横声子峰软化的情况. 这

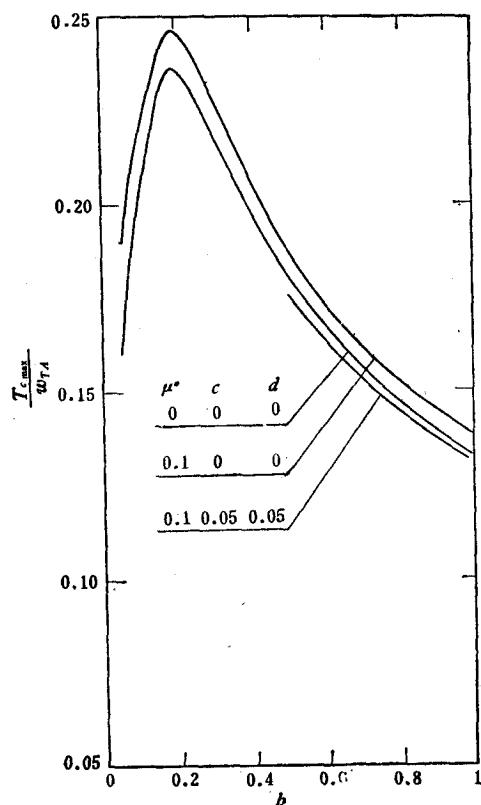


图 7 $T_{c \max}/\omega_{TA}$ 与谱形的关系
 $c = d = 0.05$ 为 L 谱的情况, 其余为双 δ 谱的情况

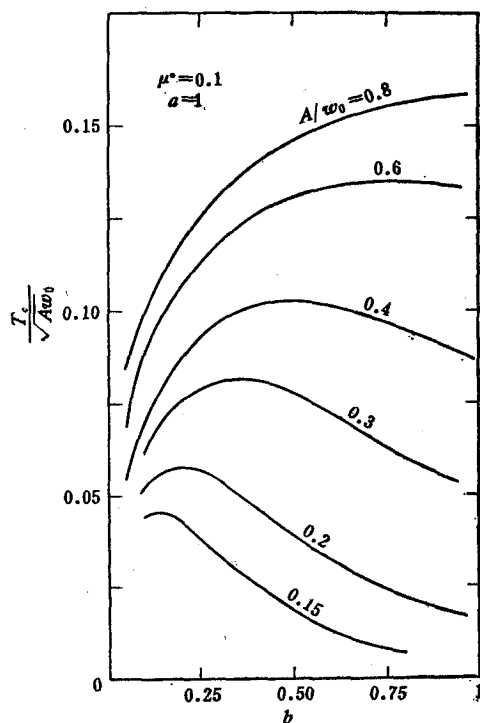


图 8 横声子峰软化对 T_c 的影响
 $\mu^* = 0.1, a = 1$

可由 $\frac{T_c}{A}$ 曲线簇出发经过简单的计算得出. 结果如图 8 所示. 此图说明, 在 $\frac{A}{\omega_0}$ 比值小时, TA 峰软化可显著地提高 T_c . 在 $\frac{A}{\omega_0}$ 较大时, 在 TA 峰软化过程中 (b 减小), T_c 达到

一个极大值后下降,即声子软化有时会使 T_c 下降. 当 $\frac{A}{\omega_0}$ 超过 0.4 时, 声子软化就不能使 T_c 提高了.

4. μ^* 的影响

前面的结果,是在 $\mu^* = 0$ 与 0.1 情况下得出的. 为了讨论 μ^* 的影响,对于双 δ 谱, μ^* 在 0—0.20 范围内,以 0.05 为间隔进行较仔细的计算. 典型结果如图 9 所示. μ^* 不同时, $\frac{T_c}{\omega_0} \lambda$ (或 $\frac{T_c}{A} \lambda$) 曲线形状相似; μ^* 越大时, 曲线降低, $\frac{T_c}{A} \lambda$ 的峰变平缓.

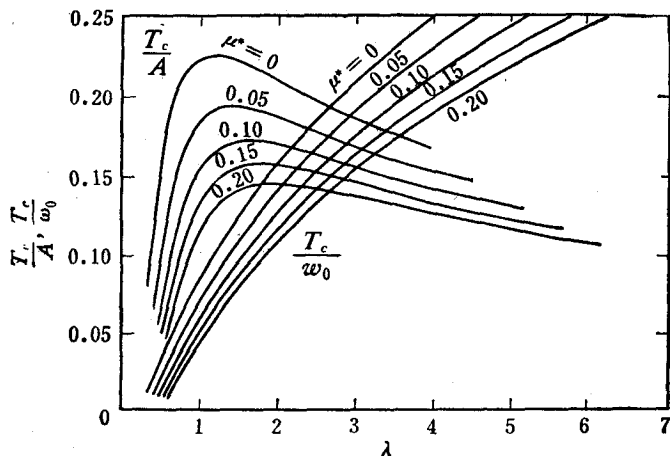


图9 μ^* 值对 $\frac{T_c}{A} \lambda$ 与 $\frac{T_c}{\omega_0} \lambda$ 曲线的影响
双 δ 谱, $a = 1$, $b = 0.6$

图 10 给出了 λ 值固定时, $\frac{T_c(\mu^*)}{T_c(0)}$ 随 μ^* 的变化. 不论 λ 大小如何, μ^* 增加时 T_c 降

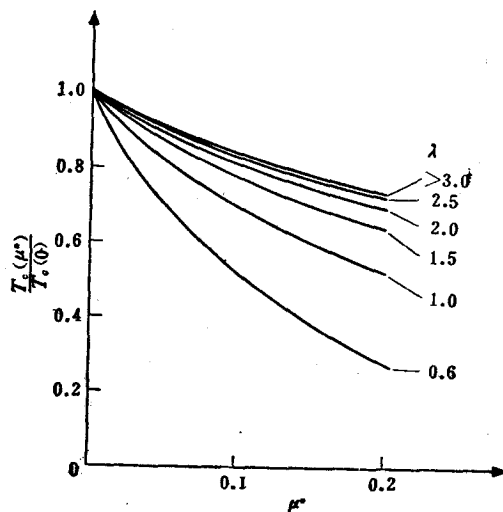


图 10 λ 恒定时, 双 δ 谱的 T_c 与 μ^* 的关系
 $b = 0.6$, $a = 1$

低。在 λ 较小时, 曲线斜率大, μ^* 对 T_c 的影响大。而在 λ 较大时, μ^* 对 T_c 的影响减小, 这是强耦合超导体的一个特点。

5. 谱峰宽度的影响与双 δ 谱近似

图 11 给出了不同的 $\frac{A}{\omega_0}$ 值下, T_c 随谱峰宽度参量 c 之间的关系。纵坐标为 $\frac{T_{cl}}{T_{c\delta}}$, T_{cl} 为 L 谱的临界温度, $T_{c\delta}$ 为双 δ 谱的临界温度, 二者的 b 值相同。此图说明, 当峰宽变化许多倍时, T_c 的变化却不大。在 $\frac{A}{\omega_0}$ 大时, $\frac{T_{cl}}{T_{c\delta}}$ 只改变百分之几。在 $\frac{A}{\omega_0}$ 较小时, 变化较大些, 但也只有百分之十几。

这个特点使我们想到, 如果用简单的双 δ 谱代替复杂的 L 谱或实际的声子谱, 将不会带来很大的误差。双 δ 谱的参量有两个 a 与 b , 我们选择 a, b 值, 使 $\langle \omega \rangle$ 以及 $\langle \omega^2 \rangle$ 与 L 谱的对应值相等, 把这个双 δ 谱作为 L 谱的近似。我们对 b 由 0.1—0.9, c, d 由 0.05—0.45, $\frac{T_c}{\omega_0}$ 由 0.01—0.25 的 45 种 L 谱, 共 1125 个 T_c 值, 计算了两种谱相应的 λ 值 (分别记为 λ_L 与 λ_δ), 再计算二者的相对差值 $\sigma = \frac{(\lambda_\delta - \lambda_L)}{\lambda_L}$ 。抽其中的 90 个点 ($\frac{T_c}{\omega_0}$ 分别取为 0.02, 0.05, 0.10, 0.15,

0.25) 求 σ 的方均根值, 得出 $\overline{\sigma^2} = 3.20\%$ 。

我们把这种方法称为双 δ 谱近似。用此方法计算了 29 种超导体^[4]的 T_c 值。文献[4]给出了 $\langle \omega \rangle$, $\langle \omega^2 \rangle$, ω_{ph} , λ , μ_{ph}^* 以及 T_c 的实验值。在计算中要用到 ω_0 值, 它由 $\alpha^2 F(\omega)$ 曲线上高频峰的位置定出。对于没有给出 $\alpha^2 F(\omega)$ 曲线的超导体, 取 $\omega_0 \cong 0.8\omega_{ph}$ 。这种取法是粗略的, 会带来一定的误差。

计算出的 T_c 值 (记为 T_{cl}) 与实验值 T_{ce} 的相对偏差为: $\sigma = \frac{(T_{cl} - T_{ce})}{T_{ce}}$ 。对于 29 种超导体 σ 的方均根值为 5.3%。考虑到 $\langle \omega \rangle$, $\langle \omega^2 \rangle$, λ , μ^* 值的误差以及 ω_0 取值的偏差, 应该说, 双 δ 谱近似与实验符合的程度是令人满意的。

谱形的计算说明, L 谱与对应的双 δ 谱的谱峰的位置相同, 而且它们的面积是对应相等的。因此, 上面的结果说明, 超导体的 T_c 主要取决于声子谱中峰的位置及其面积, 而与峰宽关系不大。

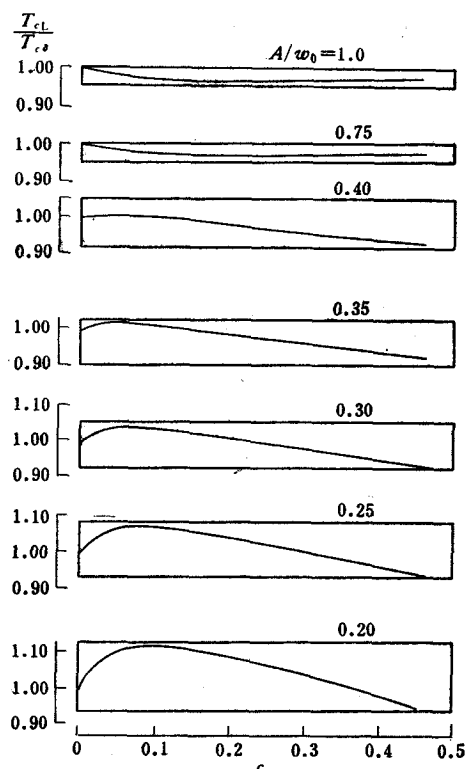


图 11 谱峰宽度对 T_c 的影响
 $\mu^* = 0.1$, $b = 0.5$, $c = 0$
为双 δ 谱; $c > 0$ 为 L 谱

四、讨 论

1. 关于“ $\lambda = 2$ 极限”的争论

根据第三节中大量的数值结果,我们有可能澄清关于“ $\lambda = 2$ 极限”的争论.

第一节中提到 McMillan 在 $\lambda\langle\omega^2\rangle = \text{const}$ 的条件下,由 (1.1) 式得出,在 $\lambda = 2$ 时, T_c 达到极大值. Bergmann 等人与 Leavens 在谱面积 A 不变的条件下得出了 T_c 有极大值. Allen 与 Dynes 把他们的结果按 $\frac{T_c}{\sqrt{\lambda\langle\omega^2\rangle}} - \lambda$ 作图,曲线不具有极值,从而得出结论认为“ $\lambda = 2$ 极限”是不成立的. 他们由此而否定了在任何其它条件下 T_c 存在极值的可能性.

我们的大量数值结果说明,不管谱形如何, $\frac{T_c}{\langle\omega\rangle} - \lambda$ 是单调的,但 $\frac{T_c}{A} - \lambda$ 却至少具有一个极大值. 这个结果是与 Bergmann 和 Leavens 的结果一致. 为了进一步说明问题,我们把 $\frac{T_c}{A}$ 与 $\frac{T_c}{\sqrt{\lambda\langle\omega^2\rangle}}$ 同时对 λ 作图,图 12 是其中的一例. 这些图说明, $\left(\frac{T_c}{\sqrt{\lambda\langle\omega^2\rangle}}\right) - \lambda$ 曲线确实不具有峰值,但 $\left(\frac{T_c}{A}\right) - \lambda$ 曲线则具有峰值. 我们认为不能用前者没有峰值而否定后者的

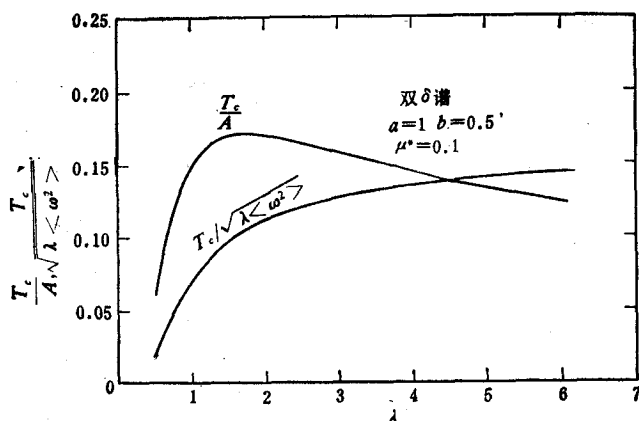


图 12 双 δ 谱的 $\frac{T_c}{A} - \lambda$ 曲线与 $\left(\frac{T_c}{\sqrt{\lambda\langle\omega^2\rangle}}\right) - \lambda$ 曲线的对比

峰值. 这就是“ $\lambda = 2$ 极限”争论的起因. 我们看到,尽管 McMillan 的公式 (1.1) 在高 λ 下的极限行为不正确,但他关于 T_c 有极值的结论并不完全错. 顺便指出,在 $A = \text{const}$ 的条件下, (1.1) 式在 $\lambda = 1$ 时, T_c 达到极大值 $T_{c, \text{max}} = 0.226A$. 这与准确的结果 ($\lambda = 1.143$, $T_{c, \text{max}} = 0.2309A$) 相差并不多.

为了进一步阐明这个问题,我们讨论在谱形不变的条件下, T_c 作为 λ, A 二元函数的性质. 在 T_c, λ, A 组成的三维空间中, $T_c(\lambda, A)$ 构成一个空间曲面. $A = \text{const}$ 的平面与它的交线是具有极大值的曲线 (与图 1 至 3 内的 $\frac{T_c}{A} - \lambda$ 曲线相对应). 而 $\lambda = \text{const}$ 的平

面与它的交线则是一条直线,它表明在其它条件不变时, T_c 与 A 成正比. 在此曲面上沿不同的方向变化时, T_c 变化的情况是不同的. 沿 $\lambda = \text{const}$ 线变化时, T_c 直线上升, 而沿 $\lambda \langle \omega^2 \rangle = \text{const}$ 线变化时, T_c 渐近于一个常数, 沿 $A = \text{const}$ 线变化时, T_c 具有极大值. 由此可见, T_c 具有条件极值, 条件是 $A = \text{const}$. 绝不能因为某种条件下不存在极值而否定其它条件下的极值.

为了说明注意到 T_c 具有条件极值的重要性, 以及 λ 不能过大的重要性, 我们来看一下 $\alpha\text{-Pb}_{0.45}\text{Bi}_{0.55}$ 的情况^[4]. 它的 $\lambda = 2.55$, $A = 49.2\text{K}$, $T_c = 7.0\text{K}$, 而 Pb 的 $\lambda = 1.55$, $A = 46.5\text{K}$, $T_c = 7.2\text{K}$, $\alpha\text{-Pb}_{0.45}\text{Bi}_{0.55}$ 的 λ 值远远高于 Pb 的 λ 值, 但 T_c 却低于 Pb 的值. 这个例子充分说明, 当 λ 值过高时 T_c 是要下降的, T_c 并不是 λ 的单调上升函数. 它也证明了 (2.1) 式给出的 λ 最佳值范围是与实验符合的.

2. 提高 T_c 的主要方向

由上面结果及其分析可知, 在谱形不变的条件下, T_c 与 A 成正比^[6]. 因此要显著地提高 T_c 必须努力提高谱面积 A , 也就是提高电声子相互作用的强度. 本文没有涉及谱面积 A 与物质结构的联系, 这将成为一个很活跃的研究课题.

另一方面, 在谱面积 A 不变, 或基本不变的情况下, 适当地调整 λ 值, 使它接近于 λ_m , 可以在一定程度上提高 T_c . 在 T_c 较低, λ 与 λ_m 相差较大时, 这种方法可收到较显著的结果. 值得注意的是, 不能一味地追求提高 λ 值. λ 值过高时, T_c 反而会下降, $\alpha\text{-Pb}_{0.45}\text{Bi}_{0.55}$ 就是一例.

五、结 语

通过对 64 种谱, 近 3500 个 T_c 数值解的分析, 得到的主要结论如下:

1. $\frac{T_c}{\langle \omega \rangle}$ (或 $\frac{T_c}{\omega_0}$) 随 λ 增加而单调上升, 但在 $\frac{T_c}{A}$ - λ 曲线上至少存在一个极大值 (图 1 至 3). 对于每一个特定的谱形, 存在一个最佳的 λ 值 λ_m , 使 $\frac{T_c}{A}$ 达到极大值 $\left(\frac{T_c}{A}\right)_{\max}$ (图 4 至 5).

2. 与 $\frac{T_c}{A} = 0.98 \left(\frac{T_c}{A}\right)_{\max}$ 相对应的两个 λ 值 λ_{m1} 与 λ_{m2} 差别相当大. 当 $\lambda_{m1} < \lambda < \lambda_{m2}$ 满足时, $\frac{T_c}{A}$ 接近于它的极大值.

3. λ_{m1} 和 λ_{m2} 与谱形及 μ^* 有关. 在 $\mu^* = 0.1$, $b > 0.3$ 时二者与谱形的关系较小, 且有

$$\lambda_{m1} \cong 1.2, \quad \lambda_{m2} \cong 2.$$

4. 在 $\lambda < \lambda_{m1}$ 时, 声子软化可显著地提高 T_c , 而当 $\lambda > \lambda_{m2}$ 时, 软化将使 T_c 降低.

5. T_c 主要取决于声子谱上峰的位置及其面积, 与峰的宽度关系不大. 用双 δ 谱来近似地代替比较接近实际的声子谱时, 均方根误差为 3.2%.

6. μ^* 总是使 T_c 降低的. λ 越大, μ^* 对 T_c 的影响越小.

作者在工作过程中得到郝柏林、于淦同志以及计算机组许多同志的帮助,在此一并致谢.

参 考 文 献

- [1] Г. М. Элиашберг, *ЖЭТФ*, **38** (1960), 966; **39** (1960), 1437.
- [2] W. L. McMillan, *Phys. Rev.*, **167** (1968), 331.
- [3] G. Bergmann, D. Rainer, *Z. Physik*, **263** (1973), 59.
- [4] P. B. Allen, R. C. Dynes, *Phys. Rev.*, **B12** (1975), 905.
- [5] R. C. Dynes, P. B. Allen, *Superconductivity in d- and f- Band metals*, edited by D. H. Douglass (Plenum, New York, 1976), 15.
- [6] C. R. Leavens, *Solid State Commun.*, **17** (1975), 1499.
- [7] C. R. Leavens, *Solid State Commun.*, **19** (1976), 395.
- [8] 吴杭生、蔡建华、龚昌德、吉光达、蔡俊道, *物理学报*, **26** (1977), 509.

INFLUENCE OF EFFECTIVE PHONON SPECTRUM $\alpha^2F(\omega)$ ON T_c OF SUPERCONDUCTORS

LI HUNG-CHENG

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

Results of some 3500 numerical solutions of T_c for 64 different effective phonon spectrum $\alpha^2F(\omega)$ are presented. It can be seen from these results that the T_c has the conditional maximum $(T_c/A)_{\max}$, if the area of spectrum is unchanged. T_c depends chiefly on the position and area of the peak of spectrum. Its dependence on the peak width is comparatively unimportant. If the double L spectrum is replaced by the double δ spectrum with same $\langle\omega\rangle$ and $\langle\omega^2\rangle$, the rms error is 3.2%. In this paper I analysis and settle the dispute regarding the " $\lambda = 2$ limit" in the literature.