

超 导 临 界 温 度 理 论 (III)*

蔡俊道 吉光达

(中国科学院物理研究所)

吴 杭 生

(中国科学技术大学)

蔡建华 龚昌德

(南 京 大 学)

提 要

本文定出超导临界温度 T_c 级数公式(1)的前几项系数。对于形式为

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda\omega}{2} [a_1 \delta(\omega - \omega_1) + (1 - a_1) \delta(\omega - \omega_2)]$$

的双 δ 型有效声子谱及若干具体材料的谱, 将级数公式计算的 T_c 与 Allen-Dynes 公式(以下简称 A-D 公式)及 Eliashberg 方程的数值解作了比较。计算表明, 当级数(1)收敛时, 级数公式计算的结果较 A-D 公式更接近于数值解。

此外, 本文还给出了一个近似的 T_c 级数公式, 得到了估计该 T_c 级数收敛半径的方法, 并计算了若干材料的收敛半径值。因此, 可估计级数公式(1)的适用范围。

一、引 言

作者在前文中由 Eliashberg 方程导出了超导临界温度 T_c 的一个级数解^[1], 并且讨论了它的收敛性^[2]。级数解的形式是

$$\begin{aligned} T_c &= A_0 \left\{ 1 + \frac{A_1}{\lambda} + \frac{A_2}{\lambda^2} + \dots \right\} \\ &= \alpha_0 \sqrt{\lambda \langle \omega^2 \rangle} \left\{ 1 + \alpha_1 \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} \frac{1}{\lambda} + \left(\alpha_{21} \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} + \alpha_{22} \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \right) \frac{1}{\lambda^2} \right. \\ &\quad \left. + \left(\alpha_{31} \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} + \alpha_{32} \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + \alpha_{33} \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \right) \frac{1}{\lambda^3} + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (1)$$

我们在前文中^[1]给出的是在一级及二级近似下这些系数的值。为了应用(1)式来计算实际材料的 T_c , 并研究有效声子谱 $\alpha^2 F(\omega)$ 的结构对 T_c 的影响, 需要确定这些系数的严格值。这一工作是通过数值计算完成的, 具体内容在第二、三节中说明。

然而, 通过数值计算只能确定有限项的系数。为了讨论收敛性质, 我们利用文献[1]的一级近似结果, 在第四节中再给出一个近似的 T_c 级数, 它的所有系数都有解析表达式。

* 1978年5月19日收到。

在文献[2]中已经说明了未经解析延拓的原始 T_c 级数(1)的收敛性。在这一节中,我们给出估计上述级数收敛半径的方法,并给出部分材料的计算结果。

二、系数的确定

文献[1]的(45)–(60)式已经给出在任意级近似下各个系数的一般表达式,它们的规律性是很明显的,我们期望能根据这些表达式得出一般性的结果。但是欲在足够高级近似下确定 T_c 级数(1)式前几个系数的较准确数值是十分困难的。原因是随着阶数的增加,需要计算的行列式的数目急增至天文数字。

为了解决这个问题,我们把(1)式和 $T = T_c$ 时 Matsubara 表象中 Eliashberg 方程的数值解曲线加以比较,从而确定若干项的系数。这样作要求数值解达到比较高的精度,因为系数 $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_{21}, \alpha_{22}, \dots$ 与 $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ 无关^[1]。因此,我们在计算中选择了理想的双 δ 谱:

$$\alpha^2(\omega)F(\omega) = \frac{\lambda\omega}{2} [a_1\delta(\omega - \omega_1) + a_2\delta(\omega - \omega_2)], \quad a_1 + a_2 = 1, \quad \omega_1/\omega_2 = r. \quad (2)$$

关于求数值解的方法,可以参见文献[3]。

定系数的方法如下:

- i. 首先考虑 $\mu^* = 0$ 的情形。对某一确定的双 δ 谱,求解 $T = T_c$ 时的 Eliashberg 方程,取方程的阶数 $N = 64$, 得到一条 $T_c/\sqrt{\lambda\langle\omega^2\rangle} - \lambda$ 曲线。
- ii. 用 Lagrange 插值公式^[4]可以定出(1)式中的系数 A_i 。
- iii. $\alpha^2 F(\omega)$ 给定后, $\langle\omega^n\rangle$ 可以计算出来。因此,选择几个不同参数的双 δ 谱,并重复上述计算,可以得到几组 $\{\langle\omega^2\rangle, \langle\omega^4\rangle, \langle\omega^6\rangle, \dots, A_0, A_1, A_2, A_3, \dots\}$ 值。
- iv. 考虑到 A_i 是 μ^* , 各次矩 $\langle\omega^n\rangle$ ($n = 2, 4, 6, \dots$) 及 $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots$ 的函数,用解联立方程的方法可以定出系数 $\alpha_0(\mu^*), \alpha_1(\mu^*), \alpha_2(\mu^*), \dots$ 的值(此时 $\mu^* = 0$)。
- v. 当 $\mu^* \neq 0$ 时,由于库仑赝势 μ^* 是一个小量 ($\mu^* = 0.05 - 0.2$), 因此,可以将这些系数在 $\mu^* = 0$ 处作 Taylor 展开:

$$\begin{aligned} \alpha_0(\mu^*) &= \alpha_0^{(0)} + \alpha_0^{(1)}\mu^* + \dots \\ \alpha_1(\mu^*) &= \alpha_1^{(0)} + \alpha_1^{(1)}\mu^* + \dots \\ &\dots \end{aligned} \quad (3)$$

选不同参数 μ^* , 并重复上述计算 i 至 iv, 可以得到几组 $\{\mu^*, \alpha_0(\mu^*), \alpha_1(\mu^*), \alpha_{21}(\mu^*), \dots\}$ 。再次使用 Lagrange 插值公式, 可以最终定出系数 $\alpha_0^{(0)}, \alpha_0^{(1)}, \dots, \alpha_1^{(0)}, \alpha_1^{(1)}, \dots$ 等。表 1 给出 $\mu^* = 0$ 时的结果。为了便于比较, 同时列出 $N = 36$ 及 $N = 64$ 时定出的系数值。

表 1 由 Eliashberg 方程数值解定出的 $\mu^* = 0$ 时(1)式的系数值

阶数 N	α_0	α_1	α_{21}	α_{22}	α_{31}	α_{32}	α_{33}
36	0.18273	-0.34336	0.2547	-0.2915	-0.195	0.613	-0.419
64	0.18273	-0.34336	0.2547	-0.2915	-0.196	0.615	-0.420

为了考查这种方法确定系数的可靠程度, 我们对二级近似方程 ($N = 2$) 用相同方法

确定系数值, 并与由系数公式(文献 [1] 中的 (25) 式)得到的严格值加以比较. 结果见表 2. 由表 2 可见, 这种方法确定系数是相当可靠的. 关于二级近似下级数 (1) 式诸系数严格值的导出方法, 可见文献 [1].

表 2 二级近似下 ($N=2, \mu^*=0$) 由数值解确定的系数值及文献 [1] 给出的严格值的比较

系 数	α_0	α_1	α_{21}	α_{22}	α_{31}	α_{32}	α_{33}
由数值解定出	0.17962	-0.36917	0.2854	-0.3398	-0.223	0.734	-0.524
由系数公式算出	0.17962	-0.36917	0.2854	-0.3398	-0.2232	0.7357	-0.5252

我们选择了 20 个不同的双 δ 谱 ($a_1=0.2, 0.4, 0.6, 0.8; r=0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$), 对 $\mu^*=0$ 情形作出数值解曲线, 同时又用计入 λ^{-3} 项的 (1) 式及表 1 的数据, 对一些 λ 值计算出 $T_c(\lambda\langle\omega^2\rangle)^{-1/2}$ 值, 并将两者作了比较. 结果表明, 在收敛区之内时, 除了少数 λ 较小的点以外, 级数 (1) 式收敛很快. 将级数截断到 λ^{-2} 项及 λ^{-3} 项时得到的 $T_c(\lambda\langle\omega^2\rangle)^{-1/2}$ 值彼此仅在第四位有效数字上有差异. 图 1 给出对两个任意选定的双 δ 谱, 数值解与级数解的比较. 由图 1 可见, 按 (1) 式计入 λ^{-3} 项计算得到的点基本上都在数值解曲线上. λ 值较小时的偏差是由于靠近收敛区边缘, 级数收敛不够快, 因而截断误差较大所致. 必须指出, 对这 20 个双 δ 谱, 数值解与级数解的符合均相当好 (参见图 2); 但是 20 个谱中, 只有个别的谱是用来确定级数 (1) 式系数的. 这表明表 1 给出的系数适用于一切谱型. 这和文献 [1] 理论上的预言一致.

Allen 和 Dynes^[3] 给出一个 T_c 的经验公式:

$$T_c = \frac{\hbar f_2 \omega_{\log}}{1.20} \exp[-1.04(1 + \lambda)/(\lambda - \mu^* - 0.62\lambda\mu^*)]. \quad (4)$$

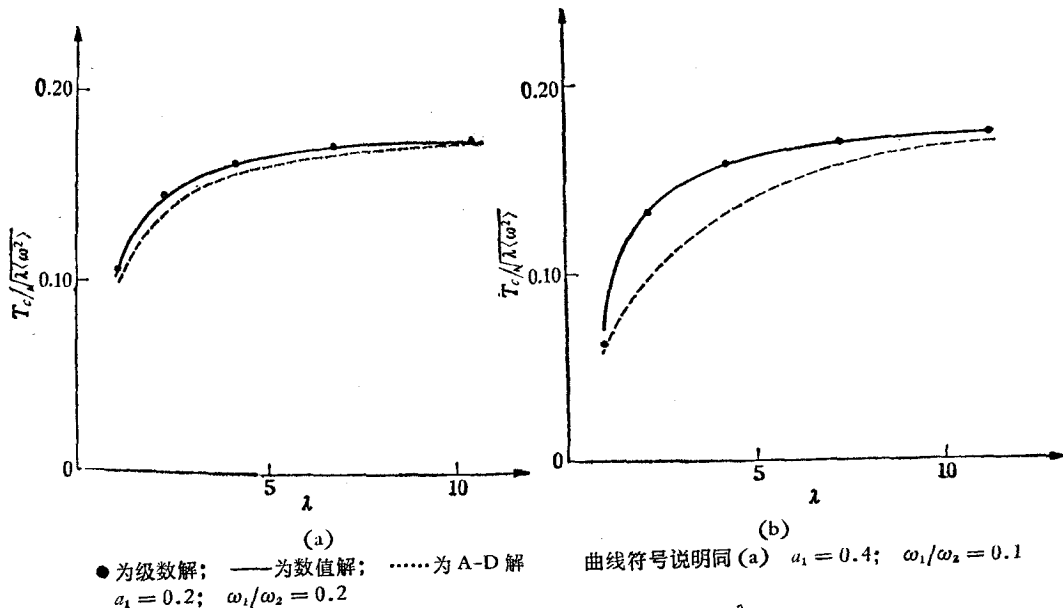


图 1 数值解、级数解、A-D 解的比较 ($\mu^*=0$) $\alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda\omega}{2} [a_1\delta(\omega - \omega_1) + (1 - a_1)\delta(\omega - \omega_2)]$ 数值解取 $N=36$

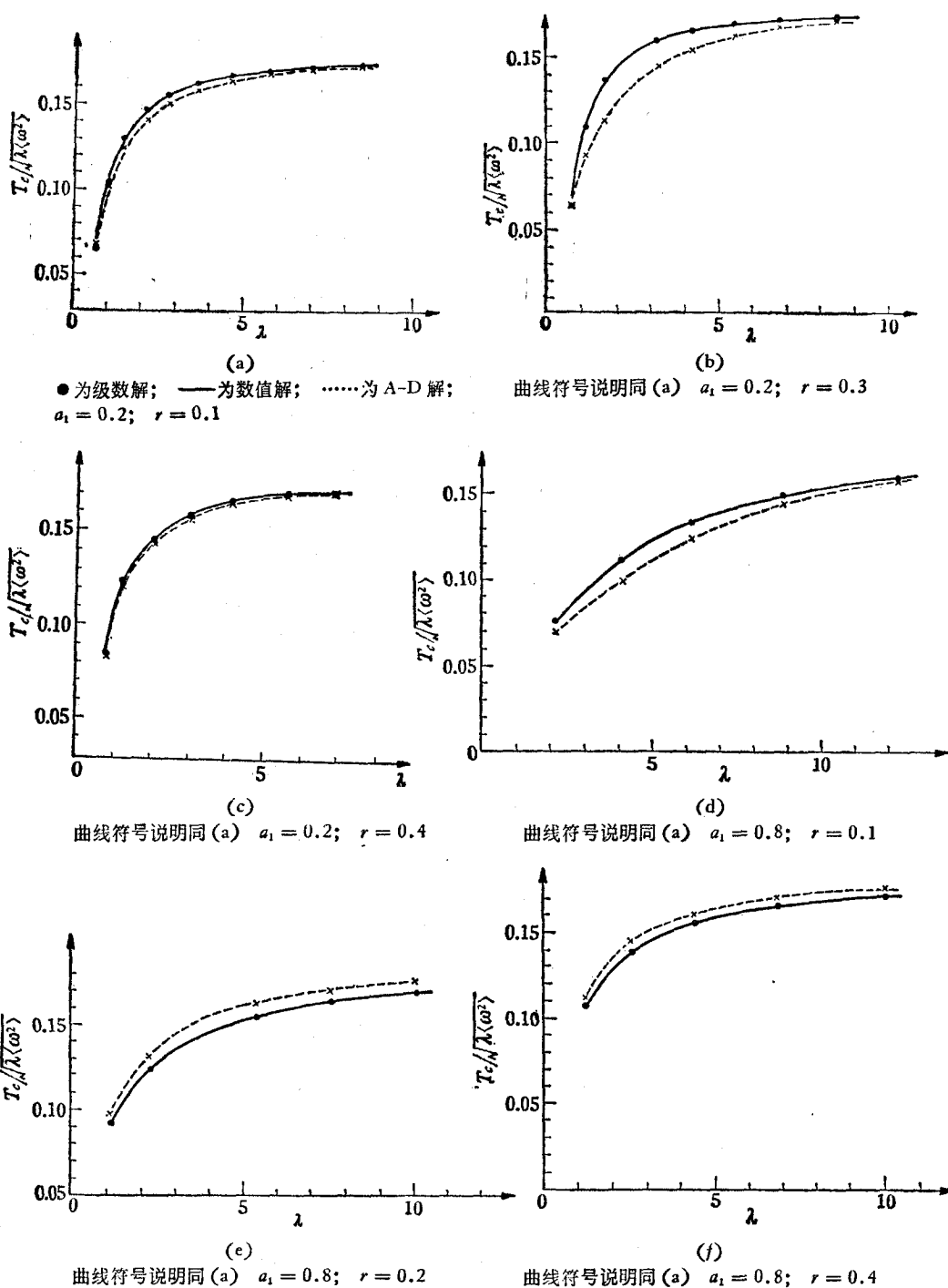


图 2 A-D 解逼近数值解的程度 ($\mu^* = 0$) $\alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda \omega}{2} [a_1 \delta(\omega - \omega_1) + (1 - a_1) \delta(\omega - \omega_2)]$ 数值解取 $N = 36$

(这里采用的符号, 其意义见文献 [3] 中 (35) 至 (38) 式.) 图 1 中也给出用 (4) 式计算的结果以资比较. 由图 1 可见, 即使对于收敛不够快的情形, 计入 λ^{-3} 项的级数解与数值

解的符合仍较 (4) 式好。为了进一步考查 A-D 公式的可靠性, 我们采取参数为 $a_1 = 0.2, 0.8, r = 0.1, 0.3, 0.4$ 的双 δ 谱, 分别用 A-D 公式, 数值解及级数解公式计算了 T_c , 如图 2 所示。由图 2 可见, 当 a_1 固定时, A-D 公式与数值解的偏离随 r 的增加而逐渐减小。计算表明, 当 $a_1 = 0.2, 0.4, 0.6, r \geq 0.3$ 时, A-D 公式与数值解符合较好, 但是当 $a_1 = 0.8$ 时, 甚至 r 高达 0.4 两者的差别仍是显著的。因为 $r = \omega_1/\omega_2, r$ 较小相当于 $\alpha^2 F(\omega)$ 谱软化。也相当于横波声子峰 a_1 高度的增加。因此可以得到结论: 当声子谱强烈软化时, A-D 公式的可靠性降低。A-D 公式的这种局限性是容易理解的。A-D 公式是由三种谱, 即 pb 谱, Hg 谱及 Einstein 谱的 Eliashberg 方程数值解归纳得到的经验公式。当 $\alpha^2 F(\omega)$ 与这三个谱偏离较大时, A-D 公式的精度将减小。反之, 方程 (1) 是严格导出的, 只要处于级数的收敛区之内, 它应该适用于任意形状的声子谱。

顺便指出, A-D 公式的近似性也可由它的渐近形式看出。对 Einstein 谱, 当 $\mu^* = 0$ 及 $\lambda \rightarrow \infty$ 时, $A_1 = 2.46, A_2 = 1.82, \bar{\omega}_2 = \omega_{\log} = \omega_E, f_1 \rightarrow (\lambda/A_1)^{1/2}, f_2 = 1$ 。则

$$T_c(\lambda\langle\omega^2\rangle)^{-1/2} \rightarrow \frac{e^{-1.04}}{1.20\sqrt{A_1}} \approx 0.188.$$

与数值解比较, $T_c(\lambda\langle\omega^2\rangle)^{-1/2} \rightarrow 0.1827 (\lambda \rightarrow \infty)$, 可以看到有明显的误差。

三、讨 论 ($\mu^* \neq 0$)

当 $\mu^* = 0$ 时, Matsubara 表象内 Eliashberg 方程的数值解随方程阶数 N 的增加, 收敛很快。然而当 $\mu^* \neq 0$ 时, 随 N 收敛很慢。Allen 和 Dynes 采用如下方法处理这个问题: 在 $N \times N$ 行列式 $\det|K_{mn}|$ 中 (文献 [1] 中的 (1) 式), 对左上角 $n \times n$ 阶 ($N \geq n$) 小行列式, 令 $\mu^*(N) = \mu^*(n)$, 对行列式其它元素, 令 $\mu^*(N) = 0$ 。当 n 固定而 N 增加时, 数值解随 N 增加很快收敛, 但是此时解将是 n 的函数。我们发现, 只有当 n 增加超过一定值时, 解将随 n 增加而收敛, 并接近真正的解。图 3 给出对 Einstein 谱, $N = 20, \mu^* = 0.1$ 时, 相应于各种 T_c/ω_E 值得到的 $T_c(\lambda\langle\omega^2\rangle)^{-1/2}$ 随 n 的变化情况。每条曲线随 n 增加均收敛较好。可以看到, T_c/ω_E 较小时, 要求 $n \geq 16$, 解才收敛; 而 T_c/ω_E 较大时, 仅要求 $n \geq 11$ 。因此, 为了得到一个与 n 无关的精确数值解, 需取 n 值足够大, 相应地, N 要超过 n 值一定程度, 才能保证在一定精度下, 解与 N, n 均无关。我们为确定 $\mu^* \neq 0$ 时 (1) 式的系数而求数值解时, 取 $n \geq 15, N \geq 36$ 。

当 $\mu^* \neq 0$ 时, 应该注意到线性化的 Eliashberg 方程所对应的本征值问题中 [文献 [1] 中的方程 (1)], 每个元素所含的 μ^* 实际上与 n 有关, 即 $\mu^* = \mu^*(n)$, 它和隧道实验测出的库仑赝势 μ_c^* 由重整化条件相联系:

$$\frac{1}{\mu^*(n)} = \frac{1}{\mu_c^*} + \ln \frac{\omega_{cn}}{(2n+1)\pi T_c}. \quad (5)$$

因为级数 (1) 式的系数 $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_{21}, \dots$ 是 μ^* 的函数, 因此, 它们也依赖于 n 。换言之, 只要两个材料的 $\mu^*(n)$ 相同, 系数 $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_{21}, \dots$ 等也分别相同。因此, 我们应该用 $\mu^*(n)$ 相同的若干组数值解来确定各个系数。采用第二节的方法, 可以定出 $\mu^* \neq 0$ 时的诸系数。

考查文献 [1] 中 (25) 式给出的二级系数, 可见在等号右边括号内的表达式当准确到

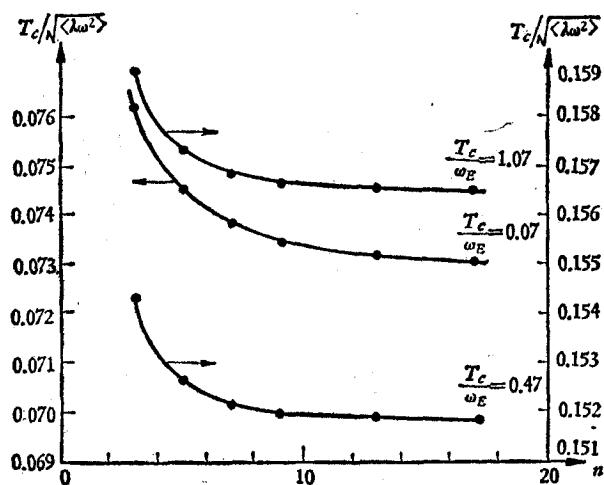


图3 当 N 一定时,数值解随 n 不同的收敛情况 ($\mu^* = 0.1$)

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda \omega}{2} \delta(\omega - \omega_E) \quad N = 20$$

1% 以内时(即在 Eliashberg 方程本身的精度以内),可以写成 $(1 + 2.60\mu^*)$ 的幂次形式。即

$$\begin{aligned} \alpha_0(\mu^*) &\approx \frac{0.17962}{(1 + 2.60\mu^*)^{1/2}}, & \alpha_1(\mu^*) &\approx -0.36917(1 + 2.60\mu^*), \\ \alpha_{21}(\mu^*) &\approx 0.2854(1 + 2.60\mu^*)^2, & \alpha_{22}(\mu^*) &\approx -0.3398(1 + 2.60\mu^*)^2, \\ \alpha_{31}(\mu^*) &\approx -0.5252(1 + 2.60\mu^*)^3, & \alpha_{32}(\mu^*) &\approx 0.7357(1 + 2.60\mu^*)^3, \\ \alpha_{33}(\mu^*) &\approx -0.2232(1 + 2.60\mu^*)^3. \end{aligned} \quad (6)$$

而在一级近似情形时^[1],这更是一个完全准确的结果。在高阶近似下,我们假定各系数仍能写成 $(1 + a\mu^*)^n$ 的形式。为了减少此种近似带来的误差,假定各项的系数 a 各不相同。此时(1)式可写成如下形式:

$$\begin{aligned} T_c = & \frac{\alpha_0^{(0)}}{(1 + a_0\mu^*)^{1/2}} \sqrt{\lambda \langle \omega^2 \rangle} \left\{ 1 + \alpha_1^{(0)} \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} \frac{(1 + a_1\mu^*)}{\lambda} \right. \\ & + \left[\alpha_{21}^{(0)}(1 + a_{21}\mu^*)^2 \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} + \alpha_{22}^{(0)}(1 + a_{22}\mu^*)^2 \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \right] \frac{1}{\lambda^2} \\ & + \left[\alpha_{31}^{(0)}(1 + a_{31}\mu^*)^3 \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} + \alpha_{32}^{(0)}(1 + a_{32}\mu^*)^3 \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} \right. \\ & \left. \left. + \alpha_{33}^{(0)}(1 + a_{33}\mu^*)^3 \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \right] \frac{1}{\lambda^3} + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

因此,确定 $\mu^* \neq 0$ 时的系数简化为确定 $a_0, a_1, a_{21}, a_{22}, \dots$ 及 $\alpha_0^{(0)}, \alpha_1^{(0)}, \alpha_{21}^{(0)}, \alpha_n^{(0)}, \dots$, 后者是表1中给出的 $\mu^* = 0$ 时的系数值。

用这种方法确定的系数 $a_0, a_1, a_{21}, a_{22}, \dots$ 列于表3中。为便于比较,同时给出 $N=36, n=15$ 及 $N=64, n=50$ 时定出的系数值。

文献中报道的 μ_c^* 有时是不清楚的。原因在于当发表由隧道实验得到的 $\alpha^2 F(\omega)$ 及 μ_c^* 值时,通常不发表相应的截断频率 ω_c 值。通常认为,文献发表的 μ_c^* 值对应于 $\omega_c =$

表 3 $\mu^*(n) \approx 0$ 时, 由数值解 ($N = 36, n = 15$ 及 $N = 64, n = 50$) 定出的 (7) 式中
系数 $a_0, a_1, a_{21}, a_{22}, a_{31}, a_{32}, a_{33}$ 的值

阶 数	a_0	a_1	a_{21}	a_{22}	a_{31}	a_{32}	a_{33}
$N = 36,$ $n = 15$	2.6983	3.150	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0
$N = 64,$ $n = 50$	2.4500	2.797	2.6	2.8	2.7	2.7	2.7

$10\omega_{ph}$. 但是 Leavens^[5] 指出, Eliashberg 方程中 ω_{c0} 只有用 ω_{cA} 而不是 ω_{cB} (均在文献 [5] 中给出) 代入时, 才能解出与实验相符的 T_c 值. 由表 4 可见, $\omega_{cA} \approx 10\bar{\omega}_2$, 而不是 $\omega_{cA} \approx 10\omega_{ph}$. 因此, 当 ω_{cA} 没有明确给出时, 相应于文献中报道的 μ_c^* 值, 我们取 $\omega_{c0} = 10\bar{\omega}_2$.

表 4 几种材料求数值解时, 所用的截断频率值 ω_{cA}, ω_{cB} 及相应的 $\bar{\omega}_2, \omega_{ph}$ 值

材 料	Pb	Hg	Sn	In	Ta	Tl
ω_{cA} [5]	60meV(696K)	44(meV) (511K)	120meV (1393K)	120meV (1393K)	120meV (1393K)	55meV (638K)
ω_{cB} [5]	110meV (1277K)	144meV (1671K)	185meV (2147K)	159meV (1845K)	209meV (2426K)	110meV (1277K)
$\bar{\omega}_2$ [3]	65K	49K	121K	89K	148K	64K
ω_{ph} [3]	110K	162K	209K	179K	228K	127K

如上所述, 级数 (7) 式中的 μ^* 应该理解为 $\mu^*(n)$, 就是说, 对每种实际材料应该在 $\omega_{c0} = (2n + 1)\pi T_c$ 处采用 McMillan 程序反演. 这样得到的 μ^* 值就是 (7) 式中采用的值. 不同材料的 μ^* 及 $\mu^*(n = 50)$ 均列于表 5 中.

表 5 部分材料 T_c 的计算结果

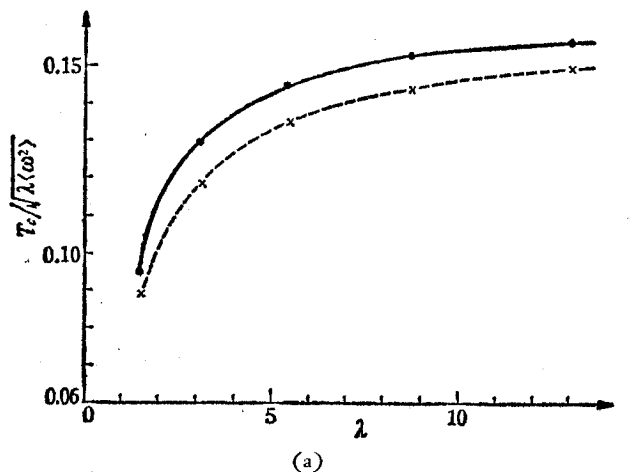
材 料	$\lambda_{文献}$	$\lambda_{计算}$	$\mu^*_{文献}$	μ^*_{ph}	$\mu^*_{(50)}$	$\bar{\omega}_2$ (K)	$\frac{\langle \omega^* \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2}$	$\frac{\langle \omega^* \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3}$	$\frac{\langle \omega^* \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4}$	$T_{c实验}$ (K)	$T_{c数值解}$ (K)	$T_c(K)$ [(7)式]	$T_c(K)$ [(4)式]	文献
Pb (晶体)	1.33	1.33	0.10	0.085	0.11	65.2	1.46	2.67	5.41	7.2	6.76	6.96	6.77	[9]
Pb (非晶体)	2.11	2.14	0.17	0.139	0.22	54.7	2.27	7.19	26.9	7.16	6.93	7.28	6.32	[10]
α -Pb _{0.45} Bi _{0.55} (非晶体)	2.59	2.58	0.137	0.116	0.173	47.3	2.95	12.0	55.8	7.0	6.84	6.67	6.15	[3]
Bi (非晶体)	2.46	2.46	0.105	0.094	0.13	47.2	4.04	22.9	150	6.11	5.76	5.30	4.44	[8]
Pb (晶体)	1.66	1.66*	0.12	0.10	0.142	62.0	1.64	3.37	7.74	7.2	7.46	7.43	7.15	[11]
Pb (微晶体)	1.91	1.91*	0.08	0.072	0.09	53.9	2.33	7.39	27.0	7.2	7.12	7.13	6.18	[11]
Pb-10%Cu (非晶体)	2.01	2.01*	0.04	0.038	0.042	47.0	3.20	13.9	69.2	6.5	6.27	6.58	5.13	[11]
Sn-10%Cu (非晶体)	1.82	1.82*	0.04	0.038	0.042	73.6	3.18	13.6	66.4	6.8	8.78	9.41	7.54	[11]

* λ 值的数值计算结果与文献值相差较大, 表明文献发表的曲线坐标刻度不正确, 因此, 将 $\alpha^2 F(\omega)$ 数据放大后, 使 $\lambda_{计算} = \lambda_{文献}$, 这对 $\bar{\omega}_2, \frac{\langle \omega^* \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2}, \dots$ 等均无影响.

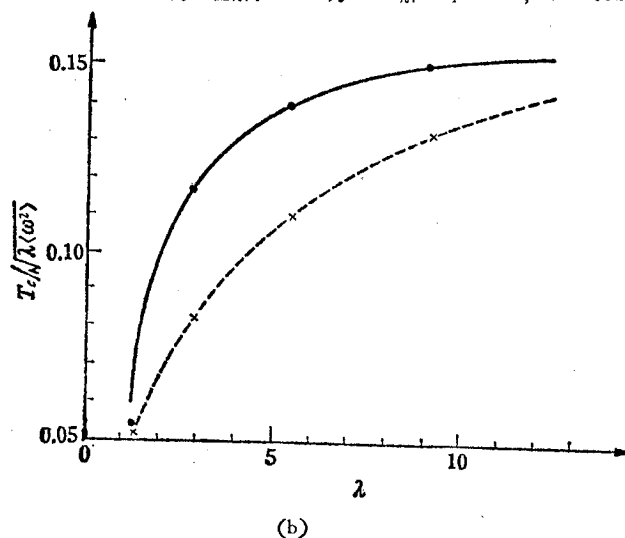
为了考查(7)式的正确性,我们作了两组计算. 首先,对 $\mu^*(n) = 0.1$ 的双 δ 谱,分别求出数值解及级数解. 双 δ 谱参数仍取与图 1 参数相同,即 $a_1 = 0.2$, $r = 0.2$ 及 $a_1 = 0.4$, $r = 0.1$. 对数值解取 $N = 36$, $n = 15$. 级数解采用(7)式的形式(计入 λ^{-3} 项),其系数取自表 1 及表 3,结果见图 4. 由图可见,与 $\mu^* = 0$ 情形一样,级数解(7)式与数值解符合很好,只有 λ 较小的点,因为级数收敛较慢,级数解与数值解有些偏离. λ 较大时,两者差别在小数点后第四位,图上已不可分辨. 在图 4 中,也给出 A-D 解. (4) 式中的 μ^* 应为 μ_{ph}^* ^[3], 它与 $\mu^*(n)$ 的关系服从下式:

$$\frac{1}{\mu_{ph}^*} = \frac{1}{\mu^*(n)} + \ln \frac{(2n+1)\pi T_c}{\omega_2}. \quad (8)$$

我们再一次看到 A-D 解不如级数解(7)式精确.



● 为级数解; — 为数值解; 为 A-D 解 $a_1 = 0.2$; $r = 0.2$



曲线符号说明同(a) $a_1 = 0.4$; $r = 0.1$

图 4 数值解、级数解、A-D 解比较

$$(\mu^*(n) = 0.1) \quad \alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda \omega}{2} [a_1 \delta(\omega - \omega_1) + (1 - a_1) \delta(\omega - \omega_1)],$$

数值解取 $N = 36$, $n = 15$,

其次,我们对部分材料用(7)式计算 T_c , 并与数值解, A-D 解, 实验值作了比较, 结果见表 5. 由表 5 可见, 满足(7)式的大部分材料, T_c 的级数解与数值解符合较好. 个别材料符合较差是因为级数(7)式中略去高阶项所致. 至于数值解与实验值有一定偏离, 这是因为没有 $\alpha^2 F(\omega)$ 的具体数据可供利用. 数值计算中, 我们用的各种材料的 $\alpha^2 F(\omega)$ 是由文献发表的曲线放大读出的, 有一定误差. 此外, μ^* 的不确定性也较大. 因此, 考查(7)式准确性的合理途径应该是将(7)式的结果与采用同样的 $\alpha^2 F(\omega)$ 及 μ^* 值, 对 Eliashberg 方程进行数值解所得的结果加以比较. 表 5 表明, 对表中所列的多数材料, 级数解(7)式与数值解的偏差小于 5%, 而 A-D 解与数值解的相符则较差. 这一现象的原因已在第二节中讨论了.

四、近似 T_c 级数及收敛半径的估计

为了便于讨论收敛半径, 利用文献 [1] 的一级近似, 我们给出下列近似级数:

$$T_c = 0.1473 \sqrt{\bar{\lambda} \langle \omega^2 \rangle} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} \frac{1}{\bar{\lambda}} + \left(\frac{1}{2} \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} - \frac{5}{8} \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \right) \frac{1}{\bar{\lambda}^2} - \left(\frac{1}{2} \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} - \frac{7}{4} \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + \frac{21}{16} \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \right) \frac{1}{\bar{\lambda}^3} + \dots \right\} \quad (9)$$

或

$$(2\pi T_c)^{-2} = 1.167 (\bar{\lambda} \langle \omega^2 \rangle)^{-1} \left\{ 1 + \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} \frac{1}{\bar{\lambda}} + \left(2 \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} - \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} \right) \frac{1}{\bar{\lambda}^2} + \left(5 \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} - 5 \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} \right) \frac{1}{\bar{\lambda}^3} + \dots \right\} \quad (10)$$

以上,

$$\bar{\lambda} = \frac{\lambda}{0.65(1 + 3.0\mu^*)}.$$

0.65 及 3.0 这两个数字是对于 Einstein 谱用最小二乘法定出的. 表 6 及图 5 表明 (10) 式的准确程度.

表 6 用近似公式(9)计算若干材料的 T_c 与数值解及级数解(7)式的比较(所用数据与表 5 相同)

材 料	$T_{c\text{计算}}(\text{K})[(9)\text{式}]$	$T_{c\text{计算}}(\text{K})[(7)\text{式}]$	$T_{c\text{数值解}}(\text{K})$	$T_{c\text{实验}}(\text{K})$	文 献
Pb(晶体)	6.57	6.96	6.76	7.2	[9]
Pb(非晶体)	6.43	7.28	6.93	7.16	[10]
$\alpha\text{-Pb}_{0.45}\text{Bi}_{0.55}$ (非晶体)	6.64	6.67	6.84	7.0	[3]
Bi(非晶体)	5.18	5.30	5.76	6.11	[8]
Pb(晶体)	7.04	7.43	7.46	7.2	[11]
Pb(微晶体)	6.87	7.13	7.12	7.2	[11]
Pb-10%Cu (非晶体)	5.94	6.58	6.27	6.5	[11]
Sn-10%Cu (非晶体)	8.06	9.41	8.78	6.8	[11]

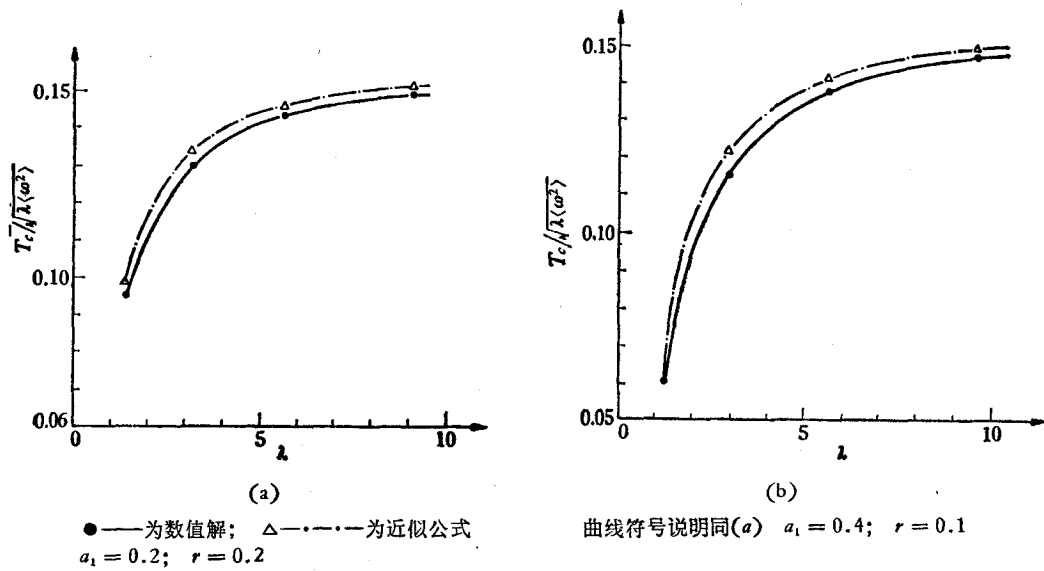


图5 近似式(9)与数值解的比较 ($\mu^* = 0.1$) $\alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda\omega}{2} [a_1 \delta(\omega - \omega_1) + (1 - a_1) \delta(\omega - \omega_2)]$. 数值解取 $N = 36, n = 15$

由表6及图5可见,在实用上,(9)式的精度已足够好.此外,用(9)式有一个很大的便利,那就是它的任意项系数都是容易算出的^[1].

现在,我们讨论对于任意的 $\alpha^2 F(\omega)$ 谱,如何确定(9)式的收敛半径 Λ . 注意到(9)式与 $\mu^* = 0$ 的一级近似解(即文献[1]中的(15)式)的区别,除了差一个倍数因子外,仅仅是 $\lambda \rightarrow \bar{\lambda}$. 因此,(9)式的收敛半径可以由文献[1]中(15)式的收敛半径,将 λ 代之以 $\bar{\lambda}$ 而得到,从而可得到级数(1)式收敛半径的近似值.

一级近似解是下述方程的根:

$$\lambda(1) = \lambda \int_0^{\omega_{ph}} d\omega \frac{\omega^2 g(\omega)}{\omega^2 + (2\pi T_c)^2} = 1, \quad (11)$$

其中, $g(\omega)$ 是规一化的有效声子谱. 令 $y \equiv (2\pi T_c)^{-2}$, $z \equiv 1/\lambda$, (11)式可写为

$$z \equiv \int_0^{\omega_{ph}} d\omega \frac{g(\omega)\omega^2 y}{1 + \omega^2 y} \equiv f(y). \quad (12)$$

它的解为

$$y = \sum_n b_n z^n. \quad (13)$$

级数(13)式的收敛半径取决于 z 平面内距原点最近的分支点位置^[2]. 这个分支点对应于 y 平面内 $f'(y)$ 的零点,即满足 $f'(y_0) = 0$ ^[6]. 将(12)式代入有

$$\int_0^{\omega_{ph}} d\omega \frac{g(\omega)\omega^2}{(1 + \omega^2 y_0)^2} = 0. \quad (14)$$

设 $y_0 = u + W$, $R^2 = u^2 + W^2$, 由(14)式可知, R, u 满足如下方程:

$$R^2 \int_0^{\omega_{ph}} d\omega \frac{g(\omega)\omega^6}{(\omega^4 R^2 + 2\omega^2 u + 1)^2} = \int_0^{\omega_{ph}} d\omega \frac{g(\omega)\omega^2}{(\omega^4 R^2 + 2\omega^2 u + 1)^2}, \quad (15-1)$$

$$u \int_0^{\omega_{ph}} d\omega \frac{g(\omega)\omega^6}{(\omega^4 R^2 + 2\omega^2 u + 1)^2} = - \int_0^{\omega_{ph}} d\omega \frac{g(\omega)\omega^4}{(\omega^4 R^2 + 2\omega^2 u + 1)^2}. \quad (15-2)$$

令 $z_0 = X_0 + iY_0$ 为 z 平面内的分支点, 代入 (14) 式可得 z 平面内分支点坐标为

$$X_0 = 1 - \int_0^{\omega_{ph}} d\omega \frac{g(\omega)(\omega^2 u + 1)}{(\omega^2 u + 1)^2 + \omega^4 v^2}, \quad (16-1)$$

$$Y_0 = v \int_0^{\omega_{ph}} d\omega \frac{g(\omega)\omega^2}{(\omega^2 u + 1)^2 + \omega^4 v^2}, \quad (16-2)$$

其中, u, v 由 (15) 式决定. 因此, (13) 式的收敛半径为

$$Q = (X_0^2 + Y_0^2)^{1/2} \quad (17)$$

级数 (9) 式的收敛半径为

$$\Lambda = 0.65(1 + 3.0\mu^*)(X_0^2 + Y_0^2)^{-1/2} \quad (18)$$

应该指出; 根据文献 [2], z 平面内的级数 (13) 式至少有一个极性支点 $z_0 = (1 + 2\mu^*)^{-1}$. 因为级数 (13) 式对应于 $\mu^* = 0$ 的情形, 因此它的收敛半径 $Q \leq 1$, 故我们应取

$$Q = \text{Min}[1, (X_0^2 + Y_0^2)^{1/2}],$$

相应地

$$\Lambda = \text{Max}[0.65(1 + 3.0\mu^*), 0.65(1 + 3.0\mu^*)(X_0^2 + Y_0^2)^{-1/2}]. \quad (19)$$

当 $\lambda > \Lambda$ 时, 级数 (9) 或 (10) 式收敛; 否则, 需要进行解析延拓. 用上述方法对部分材料进行计算, 其 Q 值与 Λ 值列于表 7 中. 凡是材料的 λ 值大于表 7 中计算出的 Λ 值的, 可以用 (9) 式估计其 T_c 值; 反之, 则不然, 除非将级数进行解析延拓. 考虑到 (9) 式是 (7) 式的一个较好的近似, 因此, 这个 Λ 值可作为 (7) 式收敛半径的估计值.

表 7 部分材料根据 (15)–(19) 式计算的 Q 值及 Λ 值

材 料	Q	Λ	$\lambda_{\text{文献}}$	文 献
Sn (晶体)	0.956	0.902	0.77	[12]
Pb (晶体)	0.839	1.01	1.33	[9]
α -Pb _{0.45} Bi _{0.55} (非晶体)	0.450	2.04	2.59	[3]
In (晶体)	≤ 0.67	≥ 1.33	0.805	[13]
Nb ₃ Sn (晶体)	1.0	0.94	1.69	[14]
Tl (晶体)	≤ 1	≥ 0.91	0.795	[15]
Ga (非晶体)	0.29	3.32	2.59	[8]

对于近似 T_c 级数 (10) 式, 根据文献 [1], 可以写成

$$(2\pi T_c)^{-2} = 1.167 \Sigma b_n (\bar{\lambda})^{-n}, \quad (20)$$

其中

$$b_n = \frac{1}{n!} \left[\frac{d^{n-1}}{dy^{n-1}} \frac{1}{\varphi^n} \right]_{y=0}, \quad (21)$$

$$\varphi(y) = \sum_{l=0}^{\infty} (-)^l \langle \omega^{2(l+1)} \rangle y^l = \left\langle \frac{\omega^2}{1 + \omega^2 y} \right\rangle. \quad (22)$$

将 (21) 式代入 (20) 式, 则 (20) 式可写成迴路积分

$$\begin{aligned}
 (2\pi T_c)^{-2} &= \frac{1.167}{2\pi i} \oint dz \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n \bar{\lambda}^n z^n \varphi^n} \\
 &= \frac{1.167}{2\pi i} \oint dz \ln \frac{\bar{\lambda} \left\langle \frac{\omega^2 z}{1 + \omega^2 z} \right\rangle}{\bar{\lambda} \left\langle \frac{\omega^2 z}{1 + \omega^2 z} \right\rangle - 1}.
 \end{aligned} \quad (23)$$

将上式两边变分, 不难验证

$$\frac{\delta T_c}{\delta \alpha^2 F} \sim \begin{cases} \omega & \text{当 } \omega \rightarrow 0 \text{ 时,} \\ \omega^{-1} & \text{当 } \omega \rightarrow \infty \text{ 时.} \end{cases}$$

这就是 Bergmann 和 Raiher 所证明的一般性质^[7].

本文计算工作承物理研究所于淦同志和计算机组全体同志, 南京化学工业公司计算机站冯世烽同志大力协助, 林磊同志对本文提出了许多宝贵意见, 特此致谢.

参 考 文 献

- [1] 吴杭生、蔡建华、龚昌德、吉光达、蔡俊道, 物理学报, **26** (1977), 509.
- [2] 龚昌德、吴杭生、蔡建华、蔡俊道、吉光达, 物理学报, **27** (1978), 85.
- [3] P. B. Allen and R. C. Dynes, *Phys. Rev.*, **B12** (1975), 905.
- [4] R. W. Hamming, *Numerical Methods for Scientists and Engineerings* Second Edition, p. 235.
- [5] C. R. Leavens, *Solid State Commun.*, **15** (1974), 1529.
- [6] 斯米尔诺夫, 高等数学教程, 第三卷, 第二分册, 中译本 (1956 年), 71—72 页.
- [7] G. Bergmann and D. Rainer, *Z. f. Physik*, **263** (1973), 59.
- [8] T. T. Chen, J. T. Chen, J. D. Leslie, H. J. T. Smith, *Phys. Rev. Letters*, **22** (1969), 526.
- [9] W. L. McMillan and J. M. Rowell, *Phys. Rev. Letters*, **14** (1965), 109.
- [10] J. D. Leslie, T. T. Chen, J. T. Chen, *Can. J. Phys.*, **48** (1970), 2783.
- [11] K. Knorr and N. Barth, *J. Low Temp. Phys.*, **4** (1971), 472.
- [12] J. M. Rowell, W. L. McMillan, W. L. Feldmann, *Phys. Rev.*, **B3** (1971), 4065.
- [13] S. Ewert, A. Comberg, W. Sander, *Proc. of Conf. on Low Temp. Phys.* **14**, Vol. 2. ed. by M. Krusius and M. Vuorio, North Holland, Amsterdam (1975), p. 409.
- [14] L. Y. L. Shen, *Phys. Rev. Letters*, **29** (1972), 1085.
- [15] R. C. Dynes and J. M. Rowell, *Phys. Rev.*, **B11** (1975), 1889.

THEORY OF THE SUPERCONDUCTING CRITICAL TEMPERATURE (III)

CAI JUN-DAO JI GUANG-DA

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

WU HANG-SHENG

(*University of Science and Technology of China*)

CAI JIAN-HUA GONG CHANG-DE

(*Nanjing University*)

ABSTRACT

We have determined the first several coefficients of the series formula (1) for superconducting T_c . For the double- δ spectrum as $\alpha^2 F(\omega) = \lambda\omega/2 (a_1\delta(\omega - \omega_1) + (1 - a_1)\delta(\omega - \omega_2))$ and that of several real materials, we have compared the T_c calculated from the series formula, the Allen-Dynes formula and the numerical solution of the Eliashberg Equation, respectively. The results suggest that when the series is convergent, the calculated results by using the series formula is a better approximation of the numerical solution than that from the A-D formula.

We have also given an approximate T_c series formula, obtained a method to estimate the convergent radius of the T_c series and calculated the convergent radius for several materials. Therefore we may estimate the region in which the series formula (1) is valid.