

## 研究简报

# 关于强耦合超导体临界温度公式的讨论\*

吉光达 蔡俊道  
(中国科学院物理研究所)

提高超导临界温度  $T_c$  这一课题, 近年来越来越被重视. 有许多研究者致力于从理论上得到  $T_c$  的表达式, 并讨论提高  $T_c$  的途径. McMillan 指出<sup>[1]</sup>,  $T_c$  应该用下述公式描述:

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

进一步的研究表明<sup>[2]</sup>, McMillan 公式应作如下修正:

$$T_c = \frac{\omega_{\log}}{1.20} \exp \left[ -\frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^* - 0.62 \lambda \mu^*} \right]. \quad (2)$$

$T_c$  公式写成 (2) 式的形式还有一个好处, 就是减少了公式中参数对谱型的依赖关系<sup>[3]</sup>. Allen 和 Dynes 对 Matsubara 表象内的 Eliashberg 方程重新求解, 得到一个对大范围内变化的  $\lambda$  值均适用的公式<sup>[3]</sup>:

$$T_c = \frac{f_1 f_2 \omega_{\log}}{1.20} \exp \left[ -\frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^* - 0.62 \lambda \mu^*} \right]. \quad (3)$$

$f_1, f_2$  的定义可见文献 [3]. 最近将 Eliashberg 方程严格求解, 得到下述关于  $T_c$  的级数表达式<sup>[4-6]</sup>:

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

以上各式中  $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_{21}, \alpha_{22}, \dots$  与谱型无关, 仅是  $\mu^*$  的函数, 且

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

$$\omega_{\log} = \exp \left[ \int_0^{\omega_{ph}} \ln \omega g(\omega) d\omega \right], \quad g(\omega) = \frac{2}{\lambda \omega} \alpha^2 F(\omega).$$

此外, 还有许多作者也讨论了这个问题<sup>[7-11]</sup>. 这里不拟一一讨论.

因此, 有必要研究 (1) 至 (4) 式的相互关系及各自的适用范围, 以便正确地使用它们来指导探索高温超导体的研究. 吴杭生等将强耦合超导体分成两类: A 类和 B 类. 它们

\* 1978 年 6 月 23 日收到.

以级数(4)式的收敛半径  $\Lambda$  为分界点<sup>[12]</sup>。当电-声子耦合常数  $\lambda < \Lambda$  时,属于 A 类;  $\lambda > \Lambda$  时,属于 B 类。他们认为 A 类超导体的  $T_c$  表达式可能和 McMillan 公式具有相同的函数形式(但系数可能不同)。因此,  $T_c$  主要由  $\lambda$  决定。而 B 类超导体应该用(4)式描述,  $T_c$  主要由  $\lambda\langle\omega^2\rangle$  决定。这样,(2)和(4)式构成一组完整的描述  $T_c$  的公式,可以描述各种强度耦合的超导体。

可以设想, A 类超导体应该用 McMillan 公式描述(即 McMillan 公式适用于  $\lambda < \Lambda$  的超导体)。当然这一点仅仅是一个猜测。本文仔细研究了这个问题。我们发现 A 类超导体,除个别情况外,一般可以用(1)式描述。考虑到(1)式和(2)式的形式基本相同,因此 A 类超导体的  $T_c$  主要由  $\lambda$  决定,文献[12]的结论不变。

此外,我们还发现,当(2)式去掉因子 1.20 后,即

$$T_c = \omega_{\log} \exp \left[ - \frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^* - 0.62\lambda\mu^*} \right]. \quad (5)$$

可以在更大范围内与数值解符合。因此,我们建议用(5)式描述 A 类超导体的行为。

## 二

一般认为, McMillan 公式(1)适用于  $\lambda < 1$  的超导体。Allen 和 Dynes<sup>[3]</sup> 更进一步认为: 当  $\lambda \leq 1.5$  时,修正后的 McMillan 公式(2)是“高度精确的”。此外,他们还认为(3)式适用于  $\lambda$  的更大范围。为了考查(1)至(4)式的可靠程度,我们将(1)至(4)式与 Matsubara 表象内的 Eliashberg 方程数值解加以比较。由于数值解与实验值可以在百分之几的精度内符合,因此这样作相当可靠。数值解的作法可见文献[6]。为了消除有效声子谱  $\omega^2 F(\omega)$  的实验误差对结果的影响,我们采用双  $\delta$  函数理想谱:

$$\omega^2 F(\omega) = \frac{\lambda\omega}{2} [a_1 \delta(\omega - \omega_1) + a_2 \delta(\omega - \omega_2)] \quad (6)$$

$$a_1 + a_2 = 1 \quad \omega_1 = r\omega_2.$$

采用(6)式而不用具体材料声子谱的另一个原因是:(6)式的参数  $a_1, a_2, \omega_1, \omega_2$  可以在较大范围内调整。因此可以得到较为一般的结论。

(6)式中的参数共选了 28 组,即  $r = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.7, 0.9$ .  $a_1 = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ . 对于  $\lambda \leq 3, \mu^* = 0$  情形得到数值解曲线  $T_c/(\lambda\langle\omega^2\rangle)^{1/2} - \lambda$ . 同时用(1)至(4)式作了相应计算,典型结果见图 1. 图 1 中给出  $a_1 = 0.4, r = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$  五组曲线,表明参数不同时,公式(1)至(4)式与数值解的符合程度。

为了进一步说明(1)至(4)式的近似程度,取  $\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3$  分别代表(1),(2),(3)式与数值解偏离超过 5—10% 时所对应的  $\lambda$  值<sup>1)</sup>,并记  $\Lambda$  为级数式(4)的收敛半径<sup>[5]</sup>:

$$\Lambda = \frac{0.65(1 + 3.0\mu^*)(1 - r^2)}{a_1 r^2 + a_2}. \quad (7)$$

因此,可以近似地认为,  $\lambda < \Lambda_i (i = 1, 2, 3)$  分别是(1)至(3)式的适用区,而  $\lambda > \Lambda$

1) 一般取偏离超过 5% 时对应的  $\lambda$  值为  $\Lambda_i$ , 要求当  $\lambda > \Lambda_i$  时,偏差单调增加。个别参数下,在  $\lambda < \Lambda_i$  的部份区间允许偏差大到 10%。

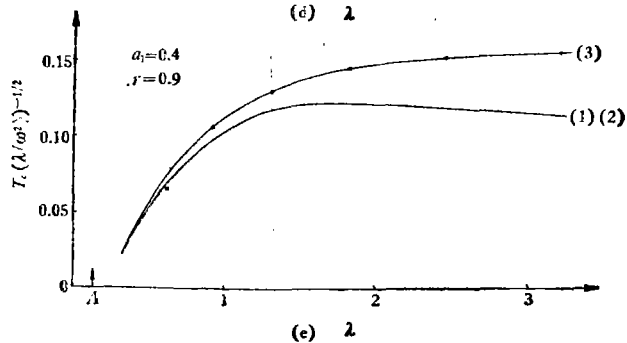
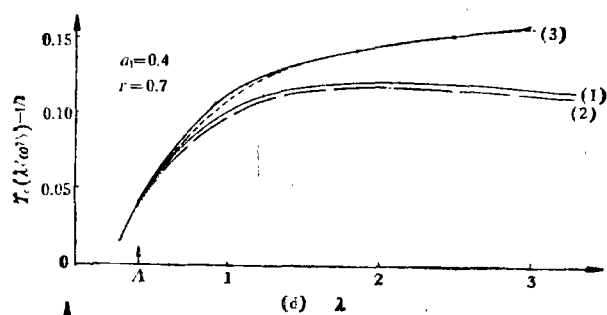
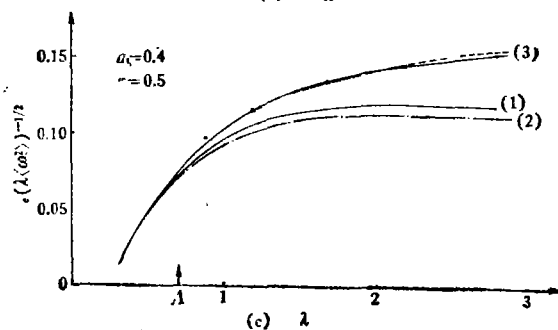
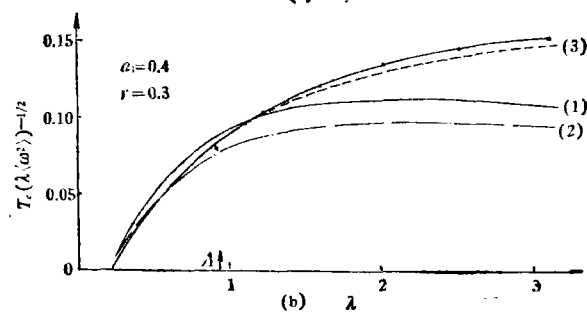
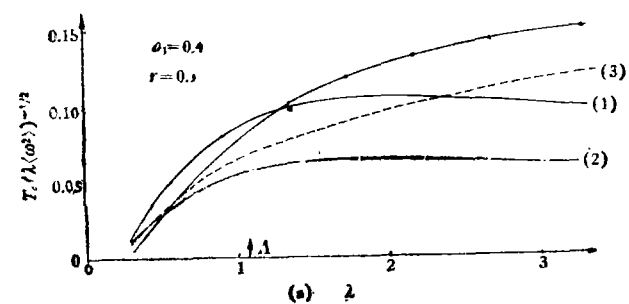


图1  $a_1 = 0.4$ ,  $r = 0.1-0.9$ ,  $\mu^* = 0$  时数值解与(1)至(4)式比较  
 实线为数值解 ( $N = 16$ ); 曲线旁标以(1), (2), (3)表示(1)至(3)式结果;  
 ●为(4)式结果; 级数(4)收敛半径值  $\lambda$  亦在图中注明

是(4)式的适用区。 $\Lambda_i$ 及 $\Lambda$ 随谱参数变化的情形可见图2和3。图2给出当 $a_1$ 不变时, $\Lambda_i$ 及 $\Lambda$ 随 $r$ 的变化情形。图3给出 $r$ 不变时, $\Lambda_i$ 及 $\Lambda$ 随 $a_1$ 的变化情形。综合图1至图3,可以得到以下结论:

1. (1)式与级数式(4)的适用范围大致以 $\Lambda$ 为界。 $\lambda < \Lambda$ 时(1)式适用, $\lambda > \Lambda$ 时(4)式适用。因为 $\Lambda$ 值只是估计值,有一定误差,加之在收敛区边界附近,仅计入级数式(4)的前几项,并不能很好地描述 $T_e$ 行为,因此,尽管(1)式与(4)式的适用范围有些交

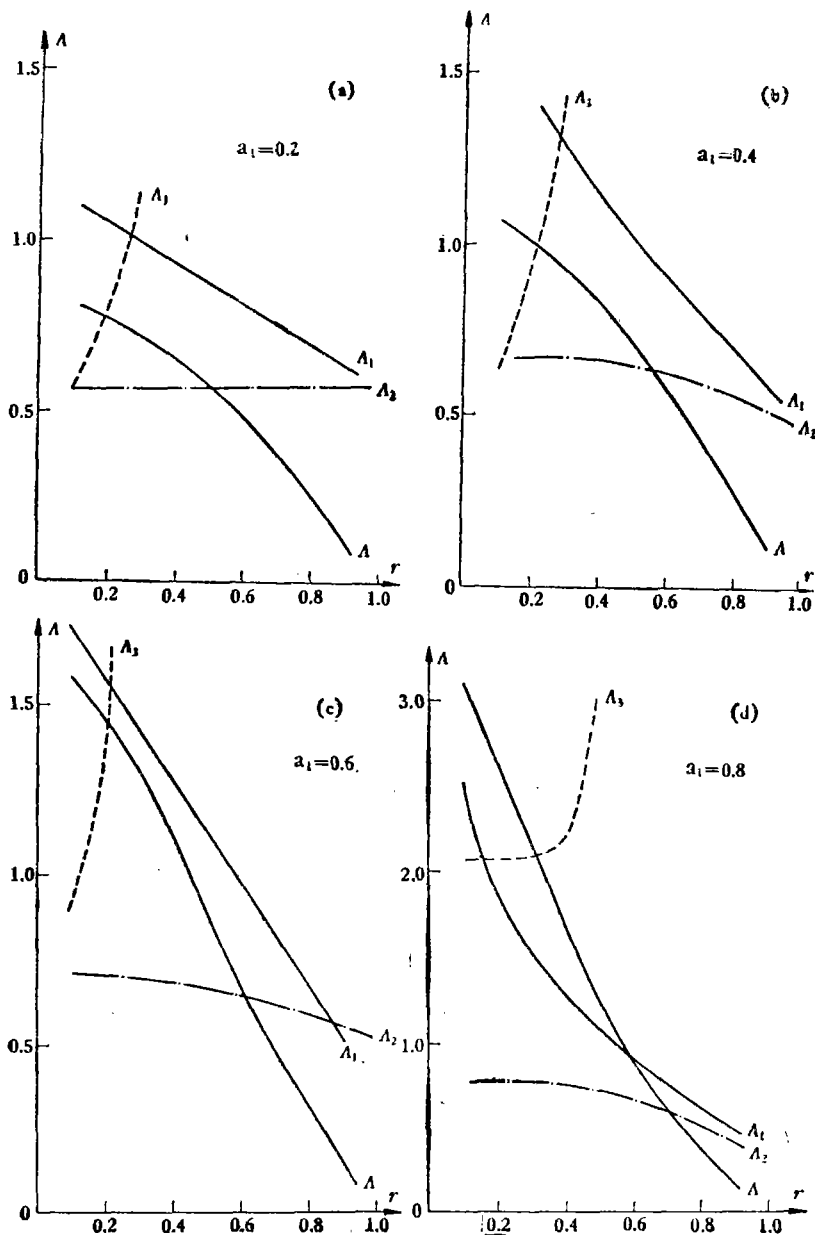
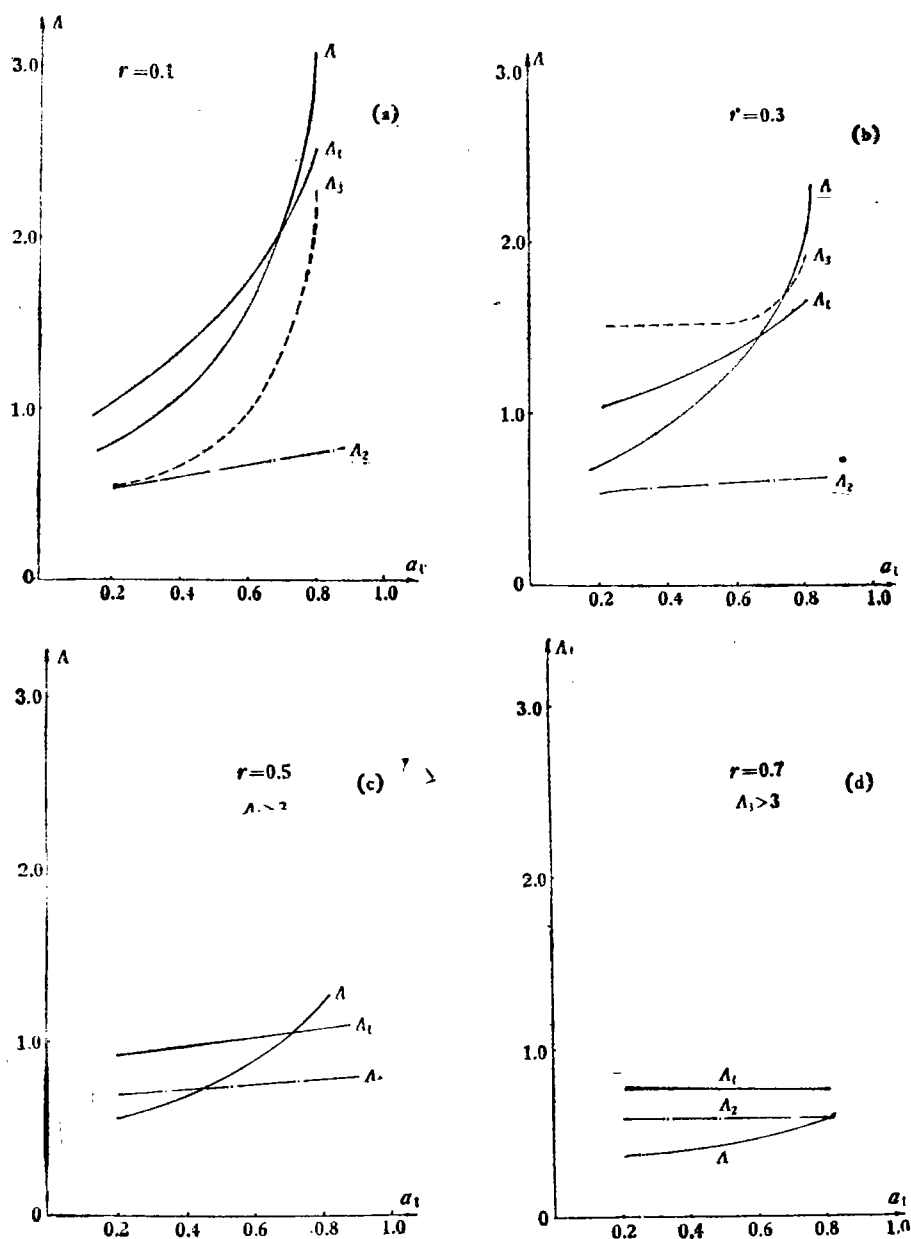


图2  $a_1$ 不变时, $\Lambda$ ,  $\Lambda_1$ ,  $\Lambda_2$ ,  $\Lambda_3$ 随 $r$ 的变化情况  
( $\Lambda_i$ 及 $\Lambda$ 的含义见正文)

图3  $r$  不变时,  $\Lambda$ ,  $\Lambda_1$ ,  $\Lambda_2$ ,  $\Lambda_3$  随  $a_1$  的变化情况(  $\Lambda_i$  的含义见正文 )

选 ( $\Lambda_1 \geq \Lambda$ ), 我们仍可认为 A 类超导体应该用 (1) 式描述。由于 (1) 式与 (2) 式有相同的含  $\lambda$  的指数因子, 因此文献 [12] 认为 “A 类超导体的  $T_c$  主要由  $\lambda$  决定”, 这一结论仍成立<sup>1)</sup>。

2. (1) 式的适用范围并不是  $\lambda < 1$ 。当  $a_1$  不变时,  $\Lambda_1$  随  $r$  的增加将减小到 1 以下; 此外,  $r < 0.2$  时, (1) 式与数值解的偏差也较大 (见图 1 中 (a))。这表明, (1) 式的适用

1) 吴杭生等对此问题作了进一步研究, 得到了一个新的 A 类超导体  $T_c$  公式, 结果将另行发表。

范围是  $\lambda \leq 0.5-1.5$ , 因谱参数而异; 此外, 声子谱强烈软化时, (1) 式不再适用。

3. 修正后的 McMillan 公式 (2) 并不象 Allen 和 Dynes 所说的那样, 在  $\lambda < 1.5$  时高度精确, 它的适用范围仅为  $\lambda \leq 0.7$  左右。

4.  $r \geq 0.3-0.5$  时, A-D 公式 (3) 相当可靠, 而当  $r$  较小时, (3) 式适用范围大约是  $\lambda \leq 1-2$ , 因  $a_1$  而异。此外  $A_3$  值随  $r$  减小而减小, 表明声子谱强烈软化时, (3) 式精度降低。

5. 当  $r > 0.5$  时, (1) 式与 (2) 式的区别已很小。

6. 当  $\lambda > 1$  时, 级数式 (4) 是数值解的很好近似。

应该强调指出, 级数式 (4) 的收敛半径  $\Lambda$  因材料而异。除非按文献 [6] 给出的方法进行计算, 否则, 我们不能说  $\lambda$  值较大的就是 B 类材料,  $\lambda$  值较小的为 A 类材料。例如, 晶态的 Pb 虽然  $\lambda = 1.33^{[16]}$ , 仍属 B 类; 相反, 非晶态的 Ga<sup>[13]</sup> 虽然  $\lambda$  高达 2.25, 却是 A 类超导体。

### 三

文献 [3] 的图 10 表明, 对于 Pb 谱及 Hg 谱, 当  $\lambda < 1.3$  时, (2) 式与数值解偏离已很小。但是上文中, 我们指出, (2) 式仅适用于  $\lambda \leq 0.7$ 。当  $\lambda > 0.7$  时, (2) 式并不可靠。这是一个明显的矛盾。为此, 我们对 Pb 谱及 Hg 谱取  $\mu^* = 0.1$ , 分别作了数值计算, 并画出  $T_c/\omega_{\log} - \lambda$  曲线。其中截断频率  $\omega_{co}$  分别取为  $\omega_{co} = \bar{\omega}_2$  及  $\omega_{co} = 10\bar{\omega}_2$ 。结果见图 4

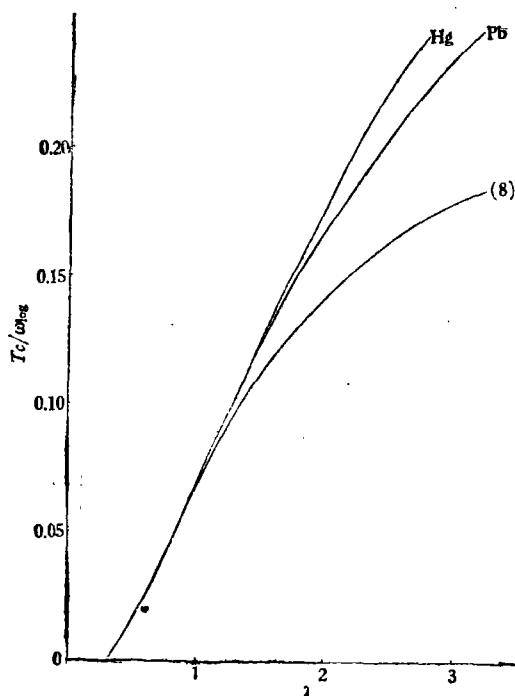


图 4  $\omega_{co} = \bar{\omega}_2$  时, Pb 谱, Hg 谱的数值解与 (8) 式比较,  $\mu^* = 0.1$ , 数值解取  $N = 32$ ,  $n = 15$

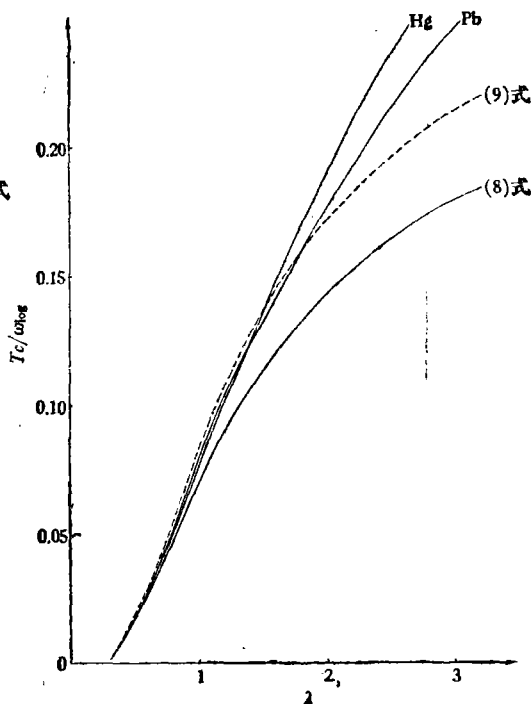


图 5  $\omega_{co} = 10\bar{\omega}_2$  时, Pb 谱, Hg 谱的数值解与 (8) 式及 (9) 式的比较  $\mu^* = 0.1$ , 数值解取  $N = 32$ ,  $n = 15$

及图 5. 图中还画出用 (2) 式得到的结果, 即

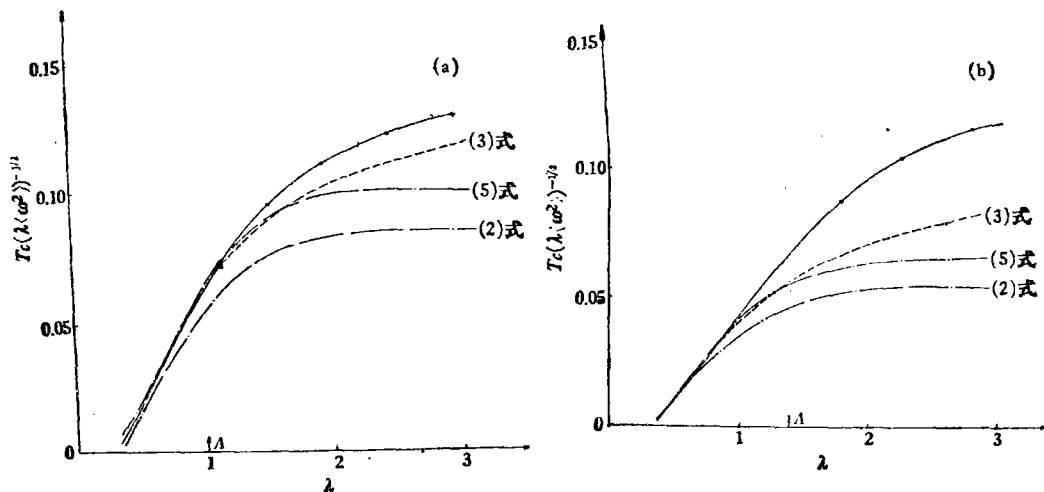
$$\frac{T_c}{\omega_{\log}} = \frac{1}{1.20} \exp \left[ -\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^* - 0.62\lambda\mu^*} \right]. \quad (8)$$

图 4 是  $\omega_{co} = \bar{\omega}_2$  的结果. 可见, 当采用  $T_c/\omega_{\log}$  作纵坐标画图时, 对  $\lambda < 1.6$ , 不同谱的结果已相当靠近, 并且与 (8) 式的结果在  $\lambda < 1.3$  时很好地符合. 这和文献 [3] 的结论一致. 但是如取  $\omega_{co} = 10\bar{\omega}_2$ , 如图 5 给出的那样, (8) 式的适用区将减小. 因此, 我们的结论和文献 [3] 不同的原因是因为  $\omega_{co}$  不同造成的. 图 5 中还给出 (8) 式去掉因子 1.20 的结果. 即

$$\frac{T_c}{\omega_{\log}} = \exp \left[ -\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^* - 0.62\lambda\mu^*} \right]. \quad (9)$$

显然大有改善. 数值解与 (9) 式大约可在  $\lambda < 1.6$  时很好符合. 根据文献 [6] 的讨论, 取  $\omega_{co} = 10\bar{\omega}_2$  较  $\omega_{co} = \bar{\omega}_2$  更接近实际情况. 因此, 我们认为 McMillan 公式应修正如 (5) 式.

从图 6 中可以看出, (5) 式与数值解的符合较 (2) 式好. 也可以看出 (5) 式与 (4) 式确实适用于数值解的不同区间.



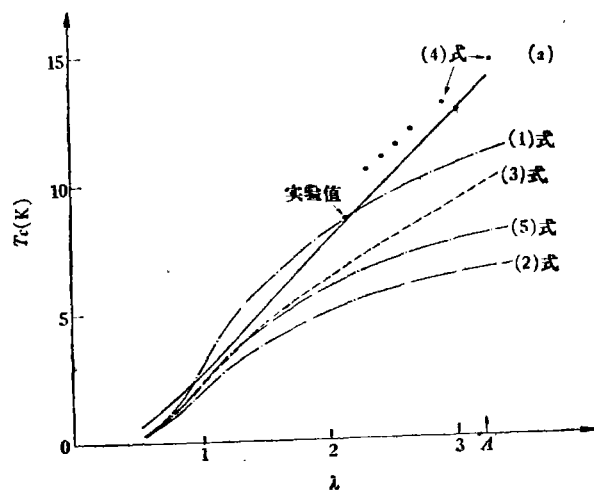
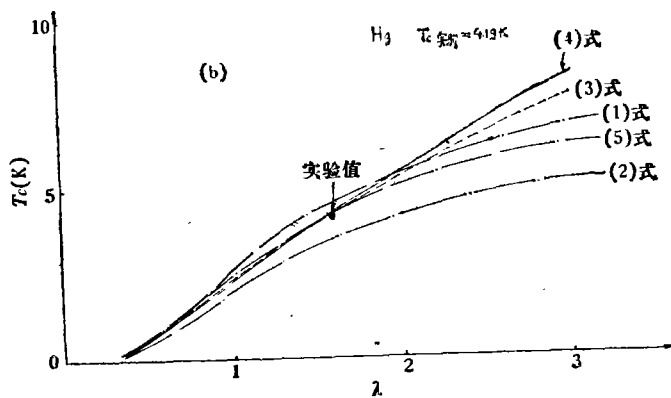
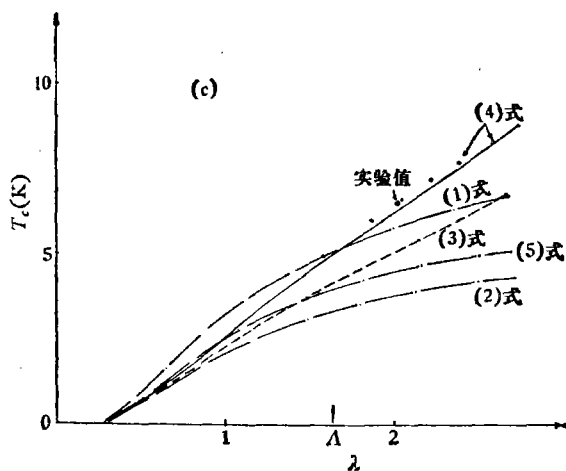
(a) 双  $\delta$  谱  $a_1 = 0.2$ ;  $r = 0.2$

(b) 双  $\delta$  谱  $a_1 = 0.4$ ;  $r = 0.1$

图 6 数值解 ( $\omega_{co} = 10\bar{\omega}_2$ ,  $N = 36$ ,  $n = 15$ ,  $\mu^*(n) = 0.1$ ) 与 (2) 至 (5) 式比较

● 为 (4) 式结果, — 为数值解

图 7 给出类似的计算.  $\alpha^2F(\omega)$  分别采用 Ga 谱<sup>[13]</sup> Pb-10%Cu 谱<sup>[14]</sup> 和 Hg 谱<sup>[15]</sup>. 有关参数取自表 1. 图中同时标出 (1) 式的结果及三种材料的实验值. 可见, 当数值解取  $\omega_{co} = 10\bar{\omega}_2$  时, 可以与实验值很好地符合. 因此, 用 (5) 式而不是用 (2) 式来代替 (1) 式, 不但可以与数值解更好地符合, 而且可以与实验值更好地符合, 因而更合理. 此外, 由图 7(a) 可见, 非晶态 Ga, 由于  $\lambda = 2.25 < \Lambda = 3.32$ , 故在收敛圆之外, 不能用 (4) 式计算  $T_c$ ; 又由于声子谱强烈软化, 因此虽然仍应该用形式如 (5) 式的指数形式公式来计算  $T_c$ , 但参数应适当调整. 这就是 (3) 式与 (5) 式计算 Ga 的  $T_c$  均与数值解偏差很大的原因.

(a) 非晶态 Ga 谱  $T_{c\text{实验}} = 8.56\text{K}$ (b) Hg 谱  $T_{c\text{实验}} = 4.19\text{K}$ (c) 非晶态 Pb-10%Cu 谱  $T_{c\text{实验}} = 6.5\text{K}$ 图 7 数值解 ( $\omega_{co} = 10\bar{\omega}_2$ ,  $N = 32$ ,  $n = 15$ ) 与(1)至(5)式比较

● 为(4)式结果; — 为数值解

表1 一些材料用(2)至(5)式计算的 $T_c$ 值与数值解及实验值的比较  
(C表示晶体, M表示微晶, A表示非晶体)

材 料	$\lambda_{\text{文献}}$	$\lambda_{\text{计算}}$	$\mu^*$	A	$\omega_{\log}(\text{K})$	$T_c(\text{K})$ 实验	$T_c(\text{K})$ 数值解	$T_c(3)(\text{K})$	$T_c(4)(\text{K})$	$T_c(5)(\text{K})$	$T_c(2)(\text{K})$	分类	文献
Ga(A)	2.25	2.15	0.17	3.32	40.10	8.56	8.41	6.73	—	6.19	5.16	A	[13]
Sn(C)	0.77	0.72	0.109	0.90	97.50	3.72	4.04	3.97	—	3.98	3.32	A	[15]
In(C)	0.805	0.75	0.125	$\geq 1.33$	67.97	3.41	3.28	3.46	—	3.25	2.71	A	[17]
Tl(C)	0.795	0.75	0.135	$\geq 0.91$	54.88	2.36	2.24	2.12	—	2.03	1.69	A	[18]
NbC(C)	0.51	0.51*	0.04	$\geq 0.73$	230.66	7.6	6.76	6.56	—	7.44	6.20	A	[20]
Sn(C)	0.70	0.70*	0.116	$\geq 0.88$	94.54	3.6	3.58	3.52	—	3.44	2.87	A	[14]
Sn(M)	0.84	0.84*	0.07	0.96	68.67	4.5	4.76	4.69	—	5.06	4.21	A	[14]
Pb(C)	1.33	1.33	0.10	1.01	58.12	7.2	6.76	6.77	6.96	—	—	B	[16]
$\alpha\text{Pb}_{0.45}\text{Bi}_{0.55}$ (A)	2.59	2.58	0.137	2.04	28.55	7.0	6.84	6.15	6.67	—	—	B	[31]
Pb(A)	2.11	2.14	0.17	1.73	38.02	7.16	6.93	6.32	7.28	—	—	B	[21]
Bi(A)	2.46	2.46	0.11	2.41	19.81	6.11	5.76	4.44	5.3	—	—	B	[21]
Pb(C)	1.66	1.66*	0.12	1.30	50.02	7.2	7.46	7.15	7.43	—	—	B	[14]
Pb(M)	1.91	1.91*	0.08	1.47	33.20	7.2	7.12	6.18	7.13	—	—	B	[14]
Pb-10%Cu (A)	2.01	2.01*	0.04	1.63	22.95	6.5	6.27	5.13	6.58	—	—	B	[14]
Sn-10%Cu (A)	1.82	1.82*	0.04	1.58	37.29	6.8	8.78	7.54	9.41	—	—	B	[14]

\*文献发表的 $\alpha^2F(\omega)$ 曲线坐标刻度不正确。计算时,将 $\alpha^2F(\omega)$ 乘一个适当的因子,使 $\lambda_{\text{计算}} = \lambda_{\text{文献}}$ 。

表1给出若干材料的 $\lambda_{\text{文献}}$ 、 $\lambda_{\text{计算}}$ 、A、 $T_{c\text{实验}}$ 、 $T_{c\text{数值解}}$ ,并用 $T_c(2)$ 、 $T_c(3)$ 、 $T_c(4)$ 、 $T_c(5)$ 分别表示由(2)至(5)式计算的 $T_c$ 值。求 $T_c(3)$ 、 $T_c(4)$ 的方法可见文献[6]。 $\lambda_{\text{计算}}$ 是由文献发表的有效声子谱 $\alpha^2F(\omega)$ 计算而得<sup>[6]</sup>。由于我们没有各种材料 $\alpha^2F(\omega)$ 的实验数据,计算时采用的 $\alpha^2F(\omega)$ 系由文献上的曲线放大读出,有一定误差。因此,考查(2)至(5)式的可靠性时,应该将相应的 $T_c$ 值与数值解比较,而不应和实验值比较。

由表1可见,对B类材料,(4)式是数值解的很好近似,一般优于A-D公式(3)。而对A类材料,A-D公式(3)及修正的McMillan公式(5)均相当精确,而(2)式则很差。对个别B类材料,(4)式不可靠是因为靠近收敛圆边界,(4)式仅计入 $\lambda^{-3}$ 项时截断误差过大所致。对有些B类材料A-D公式(3)不可靠是因为声子谱强烈软化所引起,此种情况多发生于非晶态材料中。

吴杭生、蔡建华、龚昌德等同志提出了许多宝贵的建议,特致谢意。

## 参 考 文 献

- [1] W. L. McMillan, *Phys. Rev.*, **167** (1968), 331.
- [2] A. E. Каракозов, Е. Г. Максимов и С. А. Машков, *ЖЭТФ*, **68** (1975), 1937; Л. Б. Дубовский и А. Н. Козлов, *ЖЭТФ*, **68** (1975), 2224.
- [3] P. B. Allen, R. C. Dynes, *Phys. Rev.*, **B12** (1975), 905.
- [4] 吴杭生等, *物理学报*, **26**(1977), 509.
- [5] 龚昌德等, *物理学报*, **27**(1978), 85.

- [6] 蔡俊道等, 物理学报, **28**(1979), 393
- [7] C. R. Leavens, *Solid State Commun.*, **19** (1976), 395; **17** (1975), 1499.
- [8] Steven G. Louie, Marvin L. Cohen, *Solid State Commun.*, **22** (1977), 1.
- [9] J. W. Garland, K. H. Bennemann, F. M. Mueller, *Phys. Rev. Letters*, **21** (1968), 1315.
- [10] C. R. Leavens, *J. Phys. F. Metal Phys.*, **7** (1977), 1911.
- [11] 李宏成, 物理学报, **28** (1979), 104.
- [12] 吴杭生等, 物理学报, **27**(1978), 746.
- [13] T. T. Chen, J. T. Chen, J. D. Leslie, H. J. T. Smith, *Phys. Rev. Letters*, **22** (1969), 526.
- [14] K. Knorr, N. Barth, *J. Low Temp. Phys.*, **4** (1971), 472.
- [15] J. M. Rowell, W. L. McMillan, W. L. Feldmann, *Phys. Rev.*, **B3** (1971), 4071.
- [16] W. L. McMillan, J. M. Rowell, *Phys. Rev. Letters*, **14** (1965), 109.
- [17] S. Ewert, A. Comberg, W. Sander, Proc. of 14th Inter. Conf. on Low Temp. Phys. (1975). Otaniemi, Finland, eds. by M. Krusius and M. Vuorio, Vol. 2, p. 409.
- [18] R. C. Dynes, J. M. Rowell, *Phys. Rev.*, **B11** (1975), 1889.
- [19] W. N. Hubin, D. M. Ginzberg, *Phys. Rev.*, **188** (1969), 716.
- [20] J. Geerk *et al.*, Proc. of 14th Inter. Conf. on Low Temp. Phys. (1975), Vol. 2, p. 413.
- [21] J. D. Leslie, T. T. Chen, J. T. Chen, *Can. J. Phys.*, **48** (1970), 2783.

## A DISCUSSION ON THE FORMULA OF CRITICAL TEMPERATURE FOR THE STRONG COUPLE SUPERCONDUCTORS

JI GUANG-DA      CAI JUN-DAO  
(Institute of Physics, Academia Sinica)