

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^[1], 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^[2], 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^[3]。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 λ 值均适用的公式^[3]:

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

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^[4-6]:

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

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

$$\lambda = 2 \int_0^{\omega_{ph}} \frac{\omega^2 F(\omega)}{\omega} d\omega, \quad \langle \omega^n \rangle = \frac{2}{\lambda} \int_0^{\omega_{ph}} \omega^{n-1} \omega^2 F(\omega) d\omega, \\ \omega_{\log} = \exp \left[\int_0^{\omega_{ph}} \ln \omega g(\omega) d\omega \right], \quad g(\omega) = \frac{2}{\lambda \omega} \omega^2 F(\omega).$$

此外,还有许多作者也讨论了这个问题^[7-11]。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 Λ 为分界点^[12]。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 λ 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 λ 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^[3]更进一步认为: 当 $\lambda \lesssim 1.5$ 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 λ 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 $a^2 F(\omega)$ 的实验误差对结果的影响, 我们采用双 δ 函数理想谱:

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

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

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 , ω_1 , ω_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 $\lambda \lesssim 3$, $\mu^* = 0$ 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 Λ_1 , Λ_2 , Λ_3 分别代表(1), (2), (3)式与数值解偏离超过 5—10% 时所对应的 λ 值¹⁾, 并记 Λ 为级数式(4)的收敛半径^[5]:

$$\Lambda = \frac{0.65(1+3.0\mu^*)(1-r^2)}{a_1r^2 + a_2}. \quad (7)$$

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 λ 值为 Λ_i , 要求当 $\lambda > \Lambda_i$ 时, 偏差单调增加。个别参数下, 在 $\lambda < \Lambda_i$ 的部分区间允许偏差大到 10%。

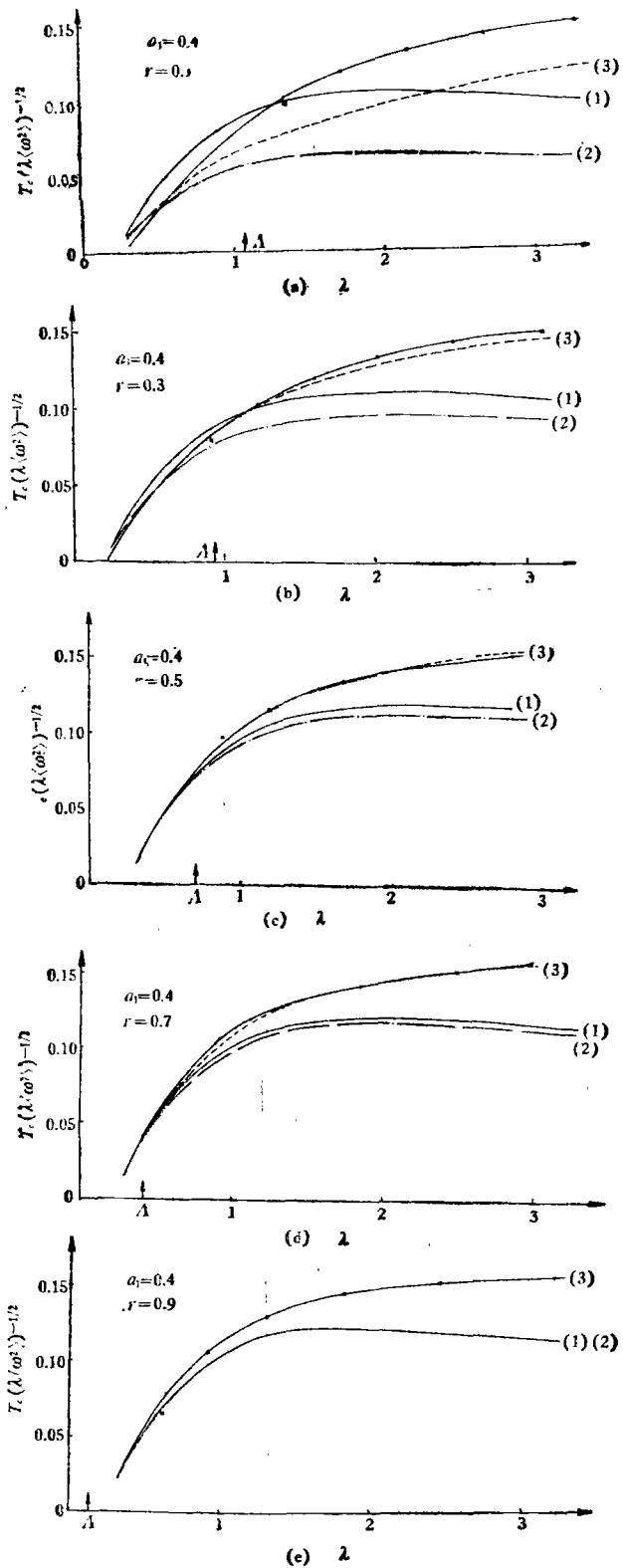


图 1 $a_1 = 0.4, r = 0.1 - 0.9, \mu^* = 0$ 时数值解与(1)至(4)式比较
实线为数值解($N = 16$); 曲线旁标以(1), (2), (3)表示(1)至(3)式结果;
●为(4)式结果; 级数(4)收敛半径值 A 亦在图中注明

是(4)式的适用区。 Λ_i 及 Λ 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， Λ_i 及 Λ 随 r 的变化情形。图 3 给出 r 不变时， Λ_i 及 Λ 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 Λ 为界。 $\lambda < \Lambda$ 时(1)式适用， $\lambda > \Lambda$ 时(4)式适用。因为 Λ 值只是估计值，有一定误差，加之在收敛区边界附近，仅计人级数式(4)的前几项，并不能很好地描述 T_c 行为，因此，尽管(1)式与(4)式的适用范围有些交

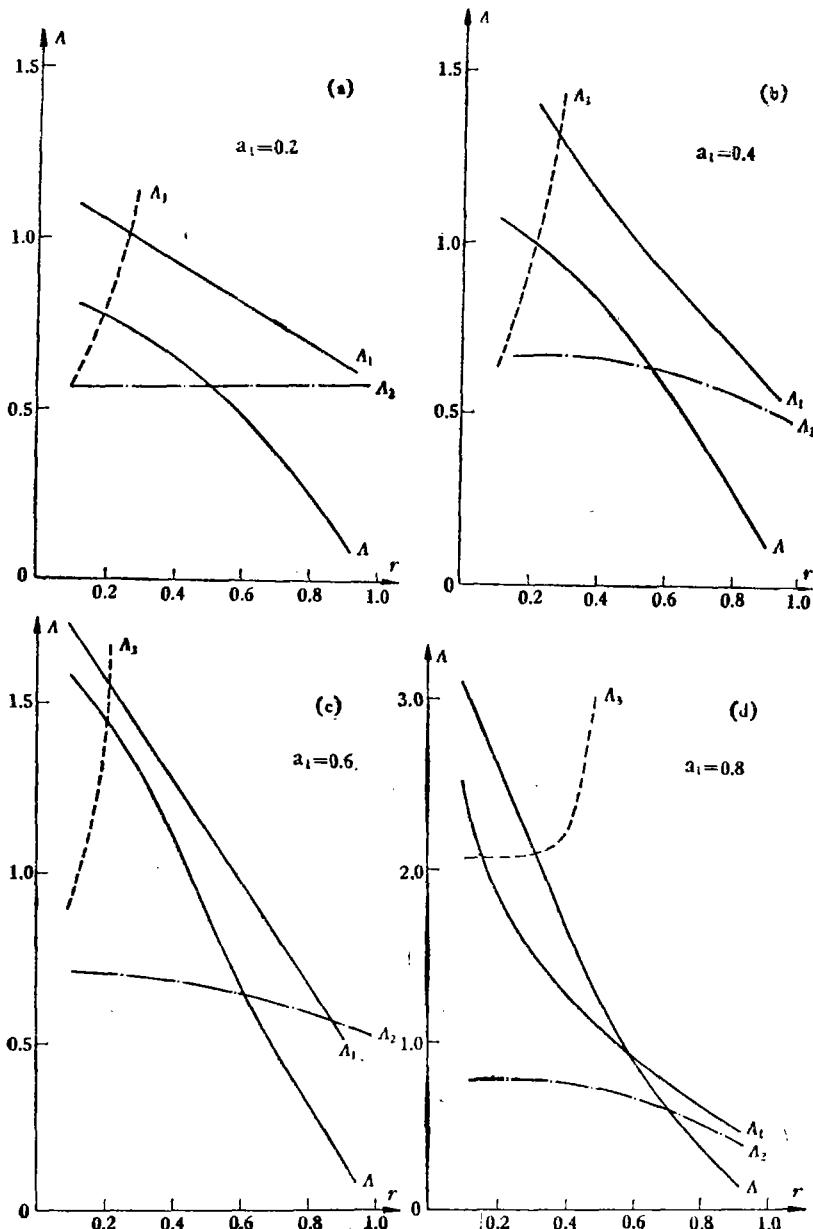


图 2 a_1 不变时， A , A_1 , A_2 , A_3 随 r 的变化情况
(A_i 及 A 的含义见正文)

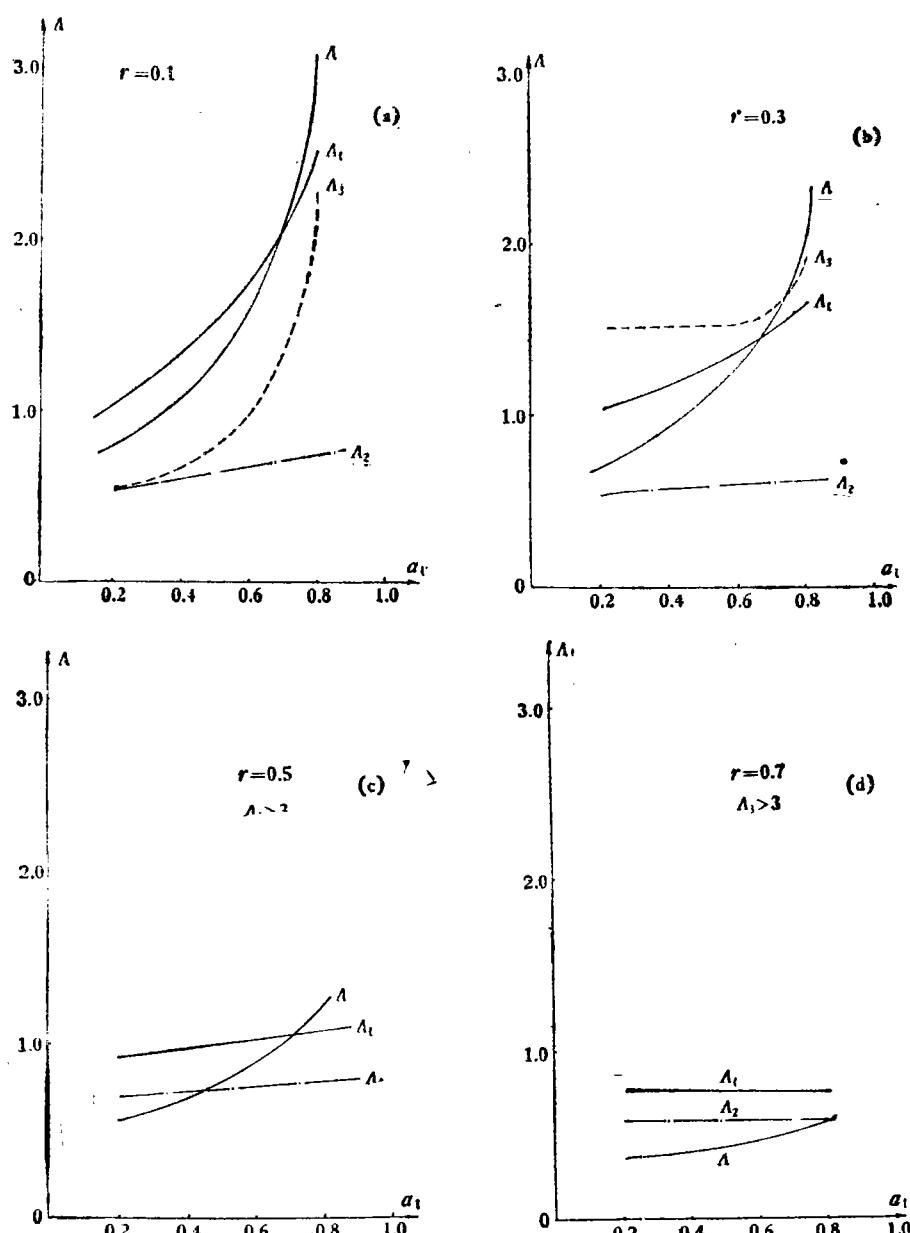


图3 r 不变时, A , A_1 , A_2 , A_3 随 α_t 的变化情况
 (A_i 的含义见正文)

迭 ($A_1 \geq A$), 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 λ 的指数因子, 因此文献[12]认为“A类超导体的 T_c 主要由 λ 决定”, 这一结论仍成立¹⁾.

2. (1)式的适用范围并不是 $\lambda < 1$. 当 α_t 不变时, A_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 $\lambda \lesssim 0.7$ 左右。

4. $r \gtrsim 0.3-0.5$ 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 $\lambda \lesssim 1-2$, 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 A 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 λ 值较大的就是 B 类材料, λ 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^[13] 虽然 λ 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 $\lambda \lesssim 0.7$ 。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 ω_{co} 分别取为 $\omega_{co} = \bar{\omega}_2$ 及 $\omega_{co} = 10\bar{\omega}_2$ 。结果见图 4

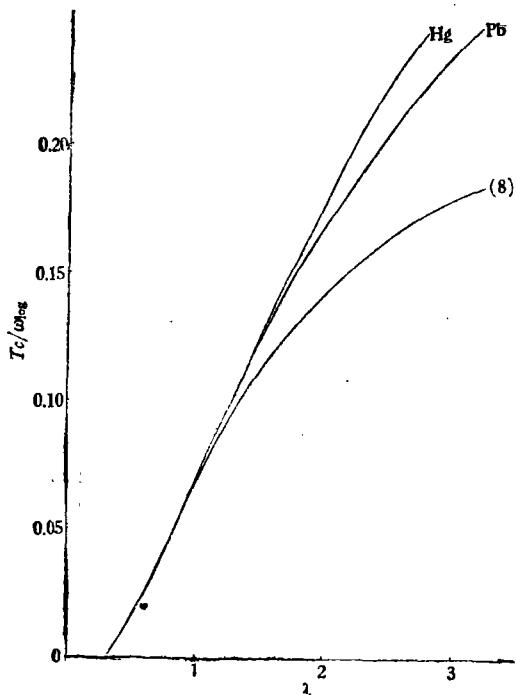


图 4 $\omega_{co} = \bar{\omega}_2$ 时, Pb 谱, Hg 谱的数值解与 (8) 式比较, $\mu^* = 0.1$, 数值解取 $N = 32, n = 15$

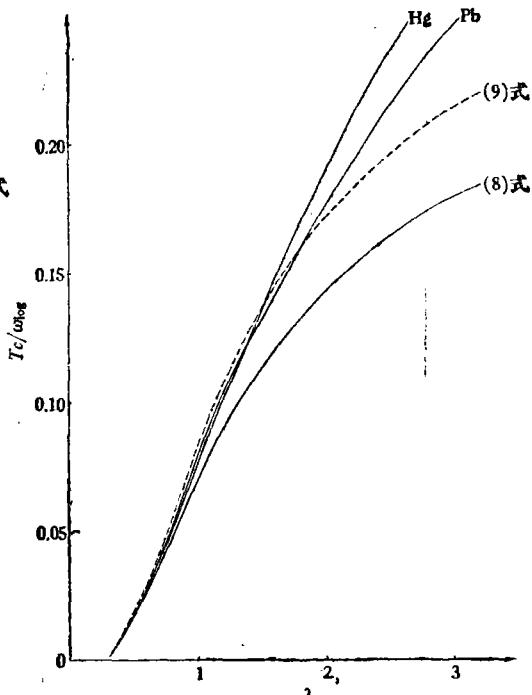


图 5 $\omega_{co} = 10\bar{\omega}_2$ 时, Pb 谱, Hg 谱的数值解与 (8) 式及 (9) 式的比较 $\mu^* = 0.1$, 数值解取 $N = 32, n = 15$

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/ω_{\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]不同的原因是由于 ω_{co} 不同造成的。图5中还给出(8)式去掉因子1.20的结果。

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

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。

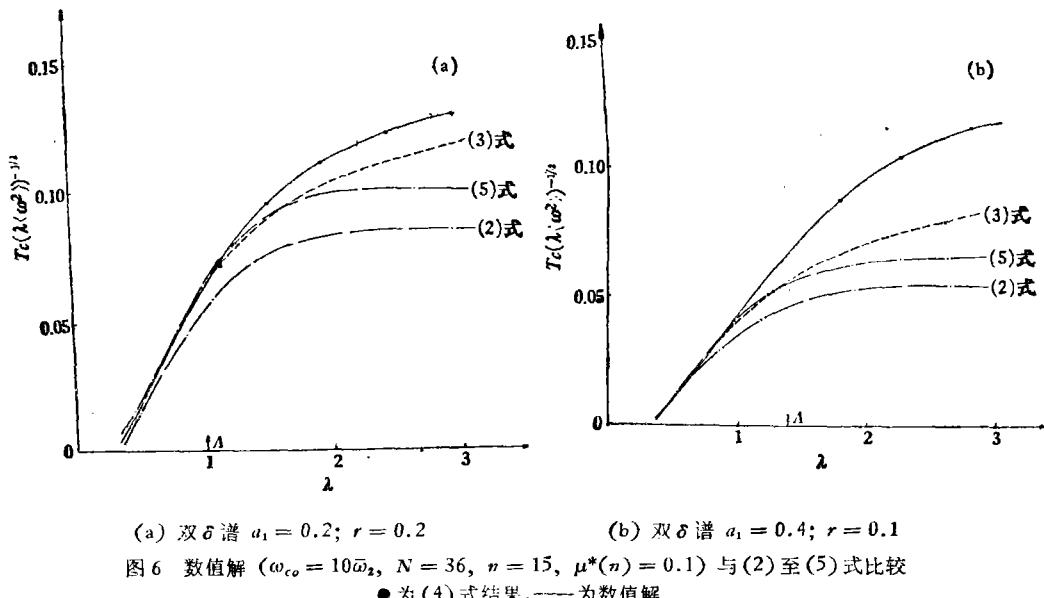


图7给出类似的计算。 $\alpha^2 F(\omega)$ 分别采用 Ga 谱^[13] Pb-10%Cu 谱^[14] 和 Hg 谱^[19]。有关参数取自表1。图中同时标出(1)式的结果及三种材料的实验值。可见，当数值解取 $\omega_{co} = 10\bar{\omega}_2$ 时，可以与实验值很好地符合。因此，用(5)式而不是用(2)式来代替(1)式，不但可以与数值解更好地符合，而且可以与实验值更好地符合，因而更合理。此外，由图7(a)可见，非晶态 Ga，由于 $\lambda = 2.25 < \Lambda = 3.32$ ，故在收敛圆之外，不能用(4)式计算 T_c ；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。

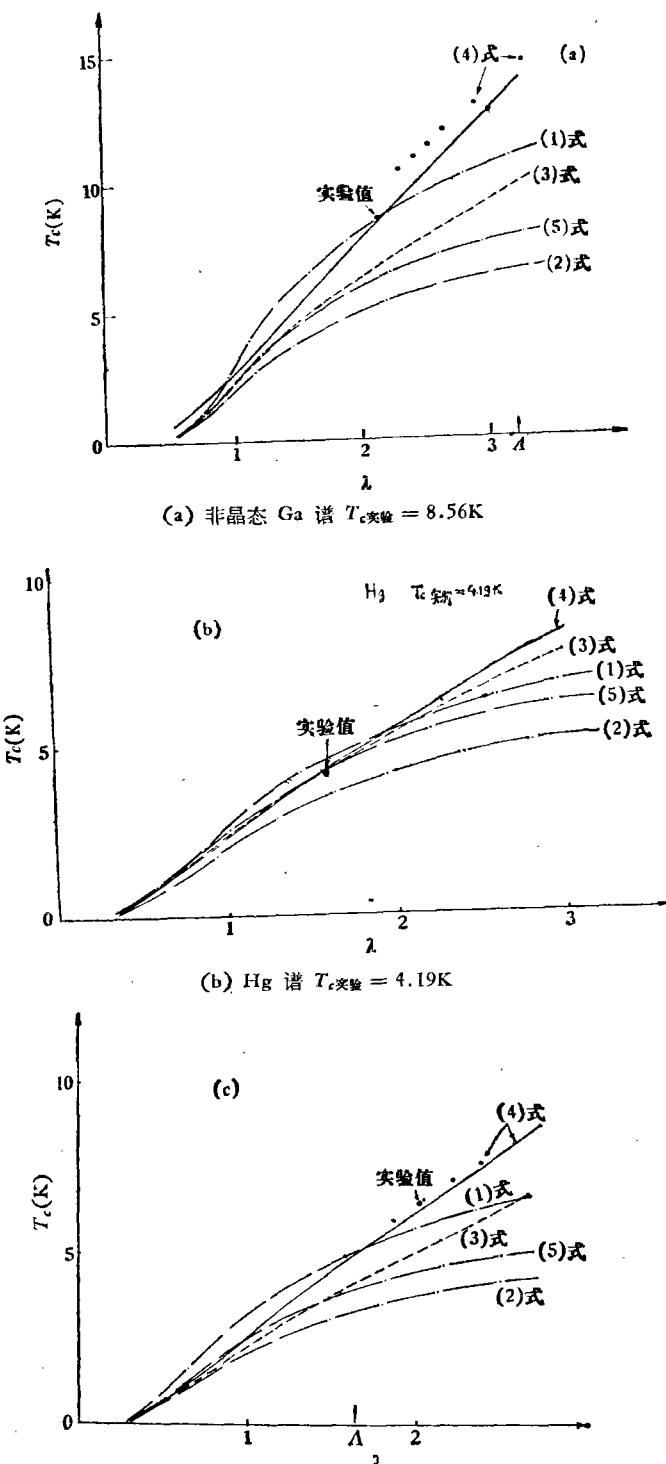


图 7 数值解 ($\omega_{co} = 10\bar{\omega}_2$, $N = 32$, $n = 15$) 与(1)至(5)式比较
●为(4)式结果;——为数值解

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	$\lambda_{\text{文献}}$	$\lambda_{\text{计算}}$	μ^*	A	$\omega_{\text{log}}(\text{K})$	$T_c(\text{K})$ 实验	$T_c(\text{K})$ 数值解	$T_c(\text{K})$ (3)	$T_c(\text{K})$ (4)	$T_c(\text{K})$ (5)	$T_c(\text{K})$ (2)	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	≥ 1.33	67.97	3.41	3.28	3.46	—	3.25	2.71	A	[17]
Tl(C)	0.795	0.75	0.135	≥ 0.91	54.88	2.36	2.24	2.12	—	2.03	1.69	A	[18]
NbC(C)	0.51	0.51*	0.04	≥ 0.73	230.66	7.6	6.76	6.56	—	7.44	6.20	A	[20]
Sn(C)	0.70	0.70*	0.116	≥ 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]
$\alpha\text{Pb}_{0.4}\text{Bi}_{0.55}$ (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 $\lambda_{\text{文献值}}$, $\lambda_{\text{计算值}}$, A, T_c 实验值, T_c 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]。 $\lambda_{\text{计算值}}$ 是由文献发表的有效声子谱 $\alpha^2F(\omega)$ 计算而得^[6]。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 λ^{-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. Манков, *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, Finlan, 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. Georck *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)