

超导临界温度级数公式的应用*

吉光达 蔡俊道

(中国科学院物理研究所)

提 要

从超导临界温度级数公式(1)出发,得到了B类超导体同位素效应的表达式.在 $\mu^* = 0$ 及 $\mu^* \neq 0$ 时,我们得到了 T_c 上限的级数表达式,其结果与数值解符合甚好.最后,在 $\mu^* = 0$ 时,讨论了 T_c 与各种谱参数的关系.由级数表达式可以清楚地看出,当固定不同参数时, T_c 的行为完全不同,从而统一解释了不同作者关于声子谱对 T_c 影响的不同结论.我们着重指出,在大多数情况下,级数公式(1)仅取前两项,可作为数值解的很好近似,从而大大简化了级数公式.预计可以由此简化公式出发研究其它问题.

一、引 言

在文献[1—3]中,作者及其合作者得到了超导临界温度 T_c 的一个级数表达式:

$$T_c = \frac{\alpha_0 \sqrt{\lambda \langle \omega^2 \rangle}}{(1 + b_0 \mu^*)^{1/2}} \left\{ 1 + \alpha_1 \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} \frac{(1 + b_1 \mu^*)}{\lambda} + \left[\alpha_{21} (1 + b_{21} \mu^*)^2 \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} + \alpha_{22} (1 + b_{22} \mu^*)^2 \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \right] \frac{1}{\lambda^2} + \left[\alpha_{31} (1 + b_{31} \mu^*)^3 \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} + \alpha_{32} (1 + b_{32} \mu^*)^3 \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + \alpha_{33} (1 + b_{33} \mu^*)^3 \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \right] \frac{1}{\lambda^3} + \dots \right\}, \quad (1)$$

其中, $\lambda = 2 \int \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega$; $\langle \omega^n \rangle = \frac{2}{\lambda} \int \alpha^2 F(\omega) \omega^{n-1} d\omega$.

讨论了级数(1)式的收敛性,定出了(1)式中前几个系数,确定了部份材料的收敛半径 Λ .在文献[4]中吴杭生等人将超导体分为A类和B类.其中,A类超导体的 T_c 与著名的McMillan公式^[5]

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

有相似的函数形式.而B类超导体的 T_c 由(1)式描述.两类超导体以 Λ 分界.其中 $\lambda < \Lambda$ 为A类, $\lambda > \Lambda$ 为B类.这样(1)式和(2)式构成了一组描述超导体临界温度 T_c 的完整表达式.

值得指出的是:(1)式和McMillan公式(2)或Allen-Dynes公式^[6]不同,它是从Matsubara表象内的Eliashberg方程严格解出的.它的形式和所用的有效声子谱 $\alpha^2 F(\omega)$

* 1978年9月2日收到.

形状无关,因此具有普遍意义. 我们指望由(1)式引出一些有用的结论. 这些结论当然也可以由数值解得出(这恰反映了(1)式概括了数值解的各种特性),但是,由(1)式可以得到具体的表达式,使得结论更为明确而直观. 本文将讨论如何由(1)式引出一些重要的结论.

二、同位素效应

如果仅考虑由于交换虚声子而引起的电子之间相互作用,则超导元素的转变温度 $T_c \propto M^{-1/2[7]}$, 其中 M 是同位素质量. 实际材料较理想同位素效应有一小的偏离,通常写为

$$T_c \propto M^{-\beta} = M^{-(1-\zeta)/2}, \quad (3)$$

$$\beta = \frac{1}{2}(1 - \zeta).$$

此种偏离是因为库仑屏蔽 μ_c^* 与 M 有关. 理论指出:

$$\frac{1}{\mu_c^*} = \frac{1}{\mu} + \ln \frac{\omega_R}{\omega_{c_0}}, \quad (4)$$

μ 是费密面上单自旋电子态密度与费密面上屏蔽库仑作用平均值之积, 与 M 无关; ω_R 是电子能带宽度, 也与 M 无关; 而 ω_{c_0} 是声子截断频率, 通常取 $\omega_{c_0} \sim 10\bar{\omega}_2^{[3]} \sim 10\omega_D \sim M^{-1/2}$ (ω_D 是德拜频率, $\bar{\omega}_2 = [\langle \omega^2 \rangle]^{1/2}$) 因此, ω_{c_0} 与 M 有关.

若 M_0 是某一元素的平均同位素质量, 它的有效声子谱记为 $\alpha^2 F_{M_0}(\omega)$. 现在考虑同一元素, 但具有同位素质量 $M = \gamma M_0$. 已知^[8]

$$\alpha^2 F_M(\omega) = \alpha^2 F_{M_0}(\gamma^{1/2}\omega), \quad (5)$$

$$\omega_{c_0}(M) = \gamma^{-1/2}\omega_{c_0}(M_0), \quad (6)$$

$$d\mu_M^*/dM = -\mu_M^{*2}/2M. \quad (7-1)$$

由(5)至(7)式容易证出

$$\begin{aligned} [\lambda \langle \omega^2 \rangle]_M &= \frac{1}{\gamma} [\lambda \langle \omega^2 \rangle]_{M_0}, \\ [\lambda \langle \omega^4 \rangle]_M &= \frac{1}{\gamma^2} [\lambda \langle \omega^4 \rangle]_{M_0}, \\ [\lambda \langle \omega^6 \rangle]_M &= \frac{1}{\gamma^3} [\lambda \langle \omega^6 \rangle]_{M_0}, \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \quad (8)$$

(1)式中已定出^[3] $b_0 = 2.45$, $b_1 = 2.8$, $b_{21} = 2.6$, $b_{22} = 2.8$, $b_{31} = b_{32} = b_{33} = 2.7$. 为了讨论方便,可近似令 $b_1 = b_{21} = b_{22} = b_{31} = b_{32} = b_{33} = 2.7$. 则(1)式可改写为

$$\begin{aligned} T_c &= \frac{\alpha_0 \sqrt{\lambda \langle \omega^2 \rangle}}{(1 + 2.45\mu^*)^{1/2}} \left\{ 1 + \frac{\alpha_1(1 + 2.7\mu^*)\lambda \langle \omega^4 \rangle}{(\lambda \langle \omega^2 \rangle)^2} + (1 + 2.7\mu^*)^2 \right. \\ &\quad \cdot \left[\alpha_{21} \frac{\lambda \langle \omega^6 \rangle}{(\lambda \langle \omega^2 \rangle)^3} + \alpha_{22} \frac{(\lambda \langle \omega^4 \rangle)^2}{(\lambda \langle \omega^2 \rangle)^4} \right] + (1 + 2.7\mu^*)^3 \left[\alpha_{31} \frac{\lambda \langle \omega^8 \rangle}{(\lambda \langle \omega^2 \rangle)^4} \right. \\ &\quad \left. \left. + \alpha_{32} \frac{\lambda^2 \langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{(\lambda \langle \omega^2 \rangle)^5} + \alpha_{33} \frac{(\lambda \langle \omega^4 \rangle)^3}{(\lambda \langle \omega^2 \rangle)^6} \right] + \dots \right\}. \quad (9) \end{aligned}$$

由(8)式可知(9)式中 $\frac{\lambda\langle\omega^4\rangle}{(\lambda\langle\omega^2\rangle)^2}$, $\frac{\lambda\langle\omega^6\rangle}{(\lambda\langle\omega^2\rangle)^3}$, $\dots$ 均与 M 无关.

如果不考虑 μ^* 与 M 有关, 则(9)式中仅有 $[\lambda\langle\omega^2\rangle]_M^{1/2} = \sqrt{\frac{1}{\gamma}[\lambda\langle\omega^2\rangle]_{M_0}} = \sqrt{\frac{M_0}{M}}[\lambda\langle\omega^2\rangle]_{M_0}^{1/2}$

与 M 有关, 则

$$\begin{aligned}\frac{\partial T_c}{\partial M} &= -\frac{1}{2M} \sqrt{\frac{M_0}{M}} [\lambda\langle\omega^2\rangle]_{M_0}^{1/2} \frac{\alpha_0}{(1+2.45\mu^*)^{1/2}} \\ &\quad \cdot \left\{ 1 + \alpha_1(1+2.7\mu^*) \frac{\lambda\langle\omega^4\rangle}{(\lambda\langle\omega^2\rangle)^2} + \dots \right\} \\ &= -\frac{T_c}{2M}.\end{aligned}\quad (10)$$

考虑到

$$\frac{\partial T_c}{\partial M} = -\frac{T_c}{2M} (1 - \zeta) = -\frac{\beta T_c}{M}, \quad (11)$$

因此, $\beta = \frac{1}{2}$, $\zeta = 0$, 这就是理想同位素效应.

但是实际上 μ^* 与 M 有关, 在文献[3]中已指出(1)式中的 μ^* 实际上是 $\mu^*(N)$, 它与 μ 有如下关系:

$$\frac{1}{\mu^*(N)} = \frac{1}{\mu} + \ln \frac{\omega_B}{(2N+1)\pi T_c}. \quad (12)$$

为了使数值解收敛, N 通常取得足够大, 使得 $\omega_N = (2N+1)\pi T_c \sim 10\bar{\omega}_2 \sim 10\omega_D$. 因此, 和(7-1)式类似, 亦有

$$\frac{d\mu^*(N)}{dM} = -\frac{[\mu^*(N)]^2}{2M}. \quad (7-2)$$

重新对(9)式求微商, 可得

$$\begin{aligned}\frac{\partial T_c}{\partial M} &= -\frac{T_c}{2M} \left\{ 1 - \frac{2.45\mu^{*2}}{2(1+2.45\mu^*)} + \frac{2.7\mu^{*2}}{(1+2.45\mu^*)^{1/2}} \frac{\alpha_0 \sqrt{\lambda\langle\omega^2\rangle}}{T_c} \right. \\ &\quad \cdot \left[\frac{\alpha_1\langle\omega^4\rangle}{\lambda\langle\omega^2\rangle^2} + 2 \cdot \frac{(1+2.7\mu^*)}{\lambda^2} \left(\alpha_{21} \frac{\langle\omega^6\rangle}{\langle\omega^2\rangle^3} + \alpha_{22} \frac{\langle\omega^4\rangle^2}{\langle\omega^2\rangle^4} \right) \right. \\ &\quad + \frac{3(1+2.7\mu^*)^2}{\lambda^3} \left(\alpha_{31} \frac{\langle\omega^8\rangle}{\langle\omega^2\rangle^4} + \alpha_{32} \frac{\langle\omega^4\rangle\langle\omega^6\rangle}{\langle\omega^2\rangle^5} \right. \\ &\quad \left. \left. + \alpha_{33} \frac{\langle\omega^4\rangle^3}{\langle\omega^2\rangle^6} \right) + \dots \right] \left. \right\}. \quad (13)\end{aligned}$$

代入 $\alpha_0 = 0.1827$, $\alpha_1 = -0.3434$, $\alpha_{21} = 0.2547$, $\alpha_{22} = -0.2915$, $\alpha_{23} = -0.196$, $\alpha_{32} = 0.615$, $\alpha_{33} = -0.420^{[3]}$, 则

$$\zeta = \frac{2.45\mu^{*2}}{2(1+2.45\mu^*)} - \frac{0.4934\mu^{*2}\sqrt{\lambda\langle\omega^2\rangle}}{(1+2.45\mu^*)^{1/2}T_c} \left[\frac{-0.3434}{\lambda} \frac{\langle\omega^4\rangle}{\langle\omega^2\rangle^2} \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2(1 + 2.7\mu_c^*)}{\lambda^2} \left(0.2547 \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} - 0.2915 \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \right) \\
& + \frac{3(1 + 2.7\mu_c^*)^2}{\lambda^3} \left(-0.196 \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} + 0.615 \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} \right. \\
& \left. - 0.420 \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \right) + \dots \Big]. \quad (14)
\end{aligned}$$

(14)式就是描述B类超导体同位素效应的公式.

对于A类超导体, McMillan 给出^[5]

$$\zeta = \frac{1.04(1 + \lambda)(1 + 0.62\lambda)\mu_c^{*2}}{(\lambda - \mu_c^* - 0.62\lambda\mu_c^*)^2}. \quad (15)$$

我们已指出^[9], McMillan 公式应修正为

$$T_c = \omega_{\log} \exp \left[-\frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu_c^* - 0.62\lambda\mu_c^*} \right], \quad (16)$$

则(15)式可写为

$$\zeta = \frac{(1 + 0.62\lambda)}{1.04(1 + \lambda)} \mu_c^{*2} \left[\ln \left(\frac{\omega_{\log}}{T_c} \right) \right]^2. \quad (17)$$

(15)式及(17)式就是描述A类超导体的同位素效应公式. (14), (15) 或(17)式构成了一组完整的表达式, 分别描述A类与B类材料的同位素效应.

表1中给出若干材料的 ζ 值. 有关参数取自文献[3, 9]. 其中 ζ 代表 Leavens 的数值解结果^[8]. 对于B类材料, 仅有Pb的数值解结果可供比较. 可以看到, (14)式较(15)或(17)式更接近于数值解. 表1中可见, B类材料 ζ_1 与 ζ_2, ζ_3 相差较大, 这是因为B类材料不能用(16)式描述所致. 还可看到, 对A类材料, (15)式及(17)式的结果相当接近. 这表明(16)式确实相当精确地反映了A类材料的 T_c 行为. 这已在文献[9]中讨论了. 由于目前没有足够精确的实验数值, 因此上述结果还不能和实验比较.

表1 用(14), (15), (17)式计算的各种材料的 ζ 值, 同时列出了部份数值解值以资比较

材 料	类别	μ_c^*	λ	$\omega_{\log}(\text{K})$	$T_c(\text{K})$	$\zeta_1[(14)\text{式}]$	$\zeta_2[(15)\text{式}]$	$\zeta_3[(17)\text{式}]$	ζ 数值解 ^[8]
Hg	A	0.11	1.59	29.69	4.19	—	0.034	0.034	0.032
Sn(C)	A	0.109	0.715	97.50	3.72	—	0.103	0.098	0.068
In(C)	A	0.125	0.805	67.97	3.41	—	0.112	0.115	0.068
Tl(C)	A	0.135	0.795	54.88	2.36	—	0.144	0.144	0.076
Sn(C)	A	0.12	0.70	94.54	3.6	—	0.125	0.131	—
Sn(M)	A	0.07	0.84	68.67	4.5	—	0.029	0.027	—
Pb(C)	B	0.129	1.55	58.12	7.2	0.044	0.054	0.051	0.038
Pb(A)	B	0.17	2.14	38.02	7.16	0.091	0.057	0.072	—
Bi(A)	B	0.11	2.46	19.81	6.11	0.023	0.012	0.023	—
$\alpha\text{-Pb}_{0.45}\text{Bi}_{0.55}(\text{A})$	B	0.137	2.58	28.55	7.0	0.043	0.026	0.037	—
Pb(C)	B	0.12	1.66	50.02	7.2	0.038	0.040	0.040	—
Pb(M)	B	0.08	1.91	33.20	7.2	0.017	0.011	0.014	—
Pb-10%Cu(A)	B	0.04	2.01	22.95	6.5	0.004	0.002	0.003	—

注: C表示晶态, M表示微晶态, A表示非晶态.

三、超导临界温度的上限

Leavens 指出^[10], 当 $\mu_c^* = 0$ 时, 超导临界温度满足下式:

$$T_c \leq 0.2309A, \quad (18-1)$$

其中 $A = \int \alpha^2 F(\omega) d\omega$ 是有效声子谱 $\alpha^2 F(\omega)$ 的面积. 当 $\alpha^2 F(\omega)$ 为 Einstein 谱时,

$$\alpha^2 F(\omega) = A \delta(\omega - \omega_E^*). \quad (19)$$

若 ω_E^* 与 $\delta T_c / \delta \alpha^2 F(\omega)$ 的极值点重合, 则(18-1)式取等号. 这要求:

$$\omega_E^* = 1.750A; \quad (18-2)$$

$$\lambda_M = 1.14. \quad (18-3)$$

当 $\mu^* \approx 0$ 时, 有

$$T_c \leq c(\mu_c^*)A; \quad (20-1)$$

$$\omega_E^* = d(\mu_c^*)A. \quad (20-2)$$

通过求 Eliashberg 方程数值解^[10,12], Leavens 作出了 $c(\mu_c^*)-\mu_c^*$ 及 $d(\mu_c^*)-\mu_c^*$ 曲线, 如图 1 所示.

以上结论很容易由级数式(1)得出. 吴杭生等指出^[4]: A类超导体的 T_c 随 λ 增加而单调上升. 当谱型不变而 $\lambda > \lambda$ 时, 材料由 A类进入 B类. 此时 T_c 将遵从(1)式, 而不再服从 McMillan 公式(16). 因此, 应该用(1)式而不是(16)式来讨论 T_c 的上限.

1. 我们首先证明, 当 $\mu_c^* = 0$ 时, $\lambda \langle \omega^2 \rangle$ 一定的双 δ 谱以 Einstein 谱的 T_c 最高. 设

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda \omega}{2} [a_1 \delta(\omega - \omega_1) + a_2 \delta(\omega - \omega_2)], \quad \text{其中 } a_1 + a_2 = 1. \quad (21)$$

设

$$\omega_1 = r \omega_2, \quad a_1 = \beta a_2,$$

则有 $\langle \omega^2 \rangle = a_2 \omega_2^2 (\beta r^2 + 1)$, $\langle \omega^4 \rangle = a_2 \omega_2^4 (\beta r^4 + 1) \cdots$ 等.

设 $\lambda \langle \omega^2 \rangle / \omega_2^2 = K_0 = K / \omega_2^2$, 并计入 $\mu^* = 0$, 则(1)式可改写为

$$T_c = \alpha_0 \omega_2 \sqrt{K_0} \left\{ 1 + \frac{\alpha_1 \beta r^4 + 1}{K_0 \beta r^2 + 1} + \frac{1}{K_0^2} \left[\alpha_{21} \frac{\beta r^6 + 1}{\beta r^2 + 1} + \alpha_{22} \frac{(\beta r^4 + 1)^2}{(\beta r^2 + 1)^2} \right] + \cdots \right\}. \quad (22)$$

以 ω_2 作参数固定不变, 当 $K = \lambda \langle \omega^2 \rangle$ 不变时, K_0 亦不变. 令

$$F = \left\{ 1 + \frac{\alpha_1 \beta r^4 + 1}{K_0 \beta r^2 + 1} + \frac{1}{K_0^2} \left[\alpha_{21} \frac{\beta r^6 + 1}{\beta r^2 + 1} + \alpha_{22} \frac{(\beta r^4 + 1)^2}{(\beta r^2 + 1)^2} \right] + \cdots \right\} + \xi [\lambda \langle \omega^2 \rangle - K]. \quad (23)$$

采用 Lagrange 不定乘子法以 $\beta, r^2, \xi, \lambda, a_2$ 作变量, 求条件极值. 易证极值条件为 $\xi = 0$, $\lambda \langle \omega^2 \rangle = K$, $r = 0$ 或 $r = 1$, $\beta = 0$. 考虑到 $r = \omega_1 / \omega_2$, $\beta = a_1 / a_2$, 由此可知, Einstein 谱的 T_c 最高, 即

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda \omega}{2} \delta(\omega - \omega_2) \equiv \frac{\lambda \omega}{2} \delta(\omega - \omega_E). \quad (24)$$

此时(22)式变为

$$T_{c\max} = \alpha_0 \sqrt{\frac{\eta}{M}} \left\{ 1 + \frac{\alpha_1}{\lambda} + \frac{\alpha_{21} + \alpha_{22}}{\lambda^2} + \frac{\alpha_{31} + \alpha_{32} + \alpha_{33}}{\lambda^3} + \dots \right\} \quad (25-1)$$

或

$$T_{c\max} = 2\alpha_0 A \left\{ \frac{1}{\lambda^{1/2}} + \frac{\alpha_1}{\lambda^{3/2}} + \frac{\alpha_{21} + \alpha_{22}}{\lambda^{5/2}} + \frac{\alpha_{31} + \alpha_{32} + \alpha_{33}}{\lambda^{7/2}} + \dots \right\}, \quad (25-2)$$

其中 $\eta = \lambda \langle \omega^2 \rangle$.

上述结论与文献[10]不同,对于双 δ 谱,当 $\eta = \lambda \langle \omega^2 \rangle$ 及 ω_2 不变时,以全部谱重量处于 ω_2 处的 Einstein 谱的 T_c 最高,但是并不要求 ω_2 与 $\delta T_c / \delta \alpha^2 F(\omega)$ 的极值点重合.

由(25)式可以得到如下结论:文献[12]中,超导体分成弱耦合、强耦合、极强耦合三类,大概是不妥的.正确的作法是分成两类,即A类及B类.对此,我们已在另文中作了讨论^[11].

2. 我们进一步证明,对于形式为(24)式的 $\alpha^2 F(\omega)$ 谱, T_c 还可进一步提高.对(25)式求 $\frac{\partial T_c}{\partial \lambda} \Big|_A = 0$,容易证明应满足如下条件:

$$1 + \frac{3\alpha_1}{\lambda} + 5 \frac{(\alpha_{21} + \alpha_{22})}{\lambda^2} + 7 \frac{(\alpha_{31} + \alpha_{32} + \alpha_{33})}{\lambda^3} + \dots = 0. \quad (26)$$

在文献[3]中已定出 $\alpha_1 = -0.3434$, $\alpha_{21} = 0.2547$, $\alpha_{22} = -0.2915$, $\alpha_{31} = -0.196$, $\alpha_{32} = 0.615$, $\alpha_{33} = -0.420$.代入(26)式并略去 λ^{-3} 以上的项,可解出 $\lambda_M = 1.189$, $\omega_{EM} = \frac{2A}{\lambda_M} = 1.682A$.将 λ_M 代入(25-2)式,有 $T_{c\max} = 0.2295A$.这就是 Einstein 谱当声子谱面积 A 一定时 T_c 的上限.它与(18)式十分相近.略有差异的原因是因为(26)式略去高次项所致.

由(1)式可求出 $\delta T_c / \delta \alpha^2 F = y(\omega)$,则由 $\frac{dy(\omega)}{d\omega} \Big|_{\omega=\omega_0} = 0$ 的条件可解出 $\delta T_c / \delta \alpha^2 F(\omega)$ 的峰位置 ω_0 ^[11].容易证明,当 $\omega_0 = \omega_E$ 且满足(26)式时, $T_c = T_{c\max}$.这就表明,只有当 Einstein 谱的位置 ω_E 与 $\delta T_c / \delta \alpha^2 F - \omega$ 曲线的极值点重合时,才能得到 $T_{c\max}$.

3. 当 $\mu_c^* \approx 0$ 时,可作类似的讨论.此时(25)式将变为

$$T_{c\max} = \frac{\alpha_0}{(1 + 2.45\mu^*)^{1/2}} \sqrt{\frac{\eta}{M}} \left\{ 1 + \frac{\alpha_1(1 + 2.7\mu^*)}{\lambda} + \frac{(\alpha_{21} + \alpha_{22})(1 + 2.7\mu^*)^2}{\lambda^2} + \frac{(\alpha_{31} + \alpha_{32} + \alpha_{33})(1 + 2.7\mu^*)^3}{\lambda^3} + \dots \right\} \quad (27-1)$$

或

$$T_{c\max} = \frac{2\alpha_0 A}{(1 + 2.45\mu^*)^{1/2}} \left\{ \frac{1}{\lambda^{1/2}} + \frac{\alpha_1(1 + 2.7\mu^*)}{\lambda^{3/2}} + \frac{(\alpha_{21} + \alpha_{22})(1 + 2.7\mu^*)^2}{\lambda^{5/2}} + \frac{(\alpha_{31} + \alpha_{32} + \alpha_{33})(1 + 2.7\mu^*)^3}{\lambda^{7/2}} + \dots \right\}. \quad (27-2)$$

(27)式给出此时 T_c 的上限值.(26)式中的 α_{ij} 均代之以 $\alpha_{ij}(1 + 2.7\mu^*)^i$,因此(26)式中的 λ 应满足下式:

$$\lambda = \lambda_M(\mu^*) = 1.189(1 + 2.7\mu^*). \quad (28)$$

考虑到 $\lambda_M(\mu^*) = \frac{2A}{\omega_E^*(\mu^*)}$, 则 $\omega_E^*(\mu^*) = \frac{2A}{1.189(1 + 2.7\mu^*)} = \frac{1.682}{(1 + 2.7\mu^*)} A$.

而

$$d(\mu^*) = \frac{1.682}{1 + 2.7\mu^*}. \quad (29)$$

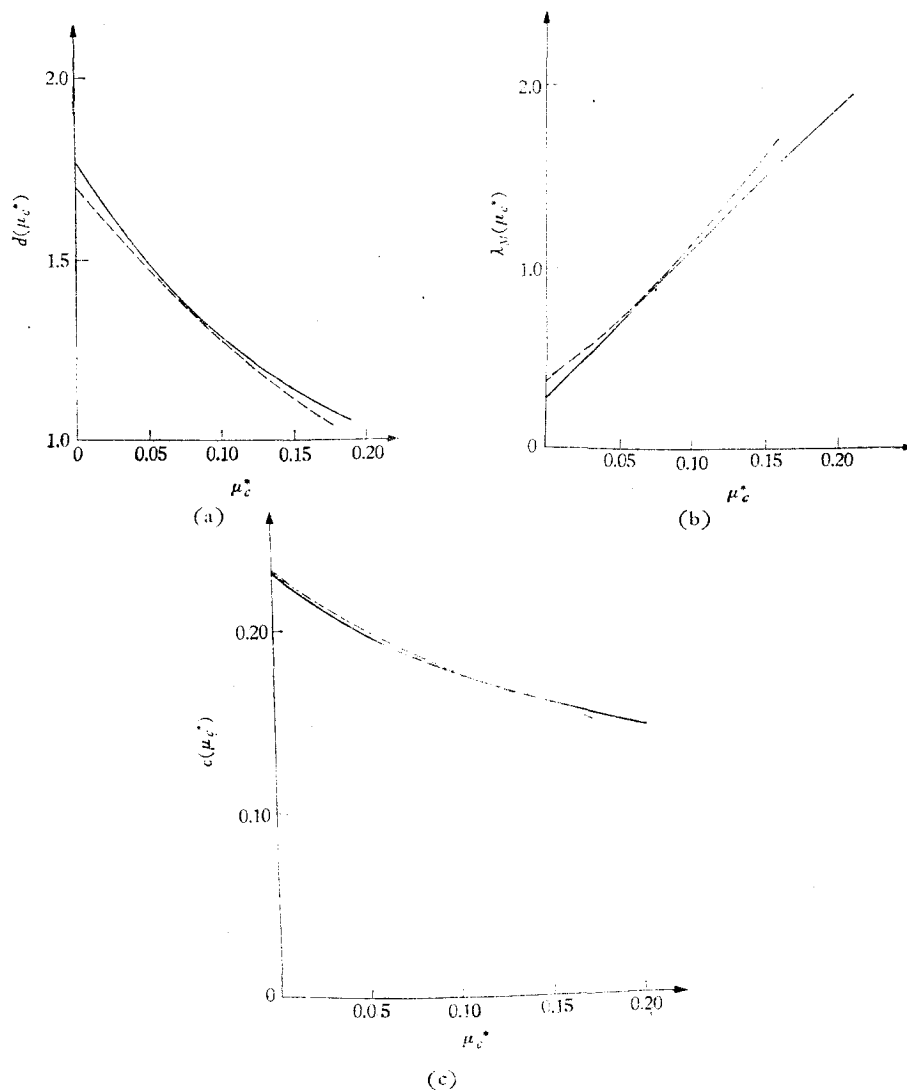


图1 $c(\mu_c^*)-\mu_c^*$, $d(\mu_c^*)-\mu_c^*$ 及 $\lambda_M(\mu_c^*)-\mu_c^*$ 曲线

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda \omega}{2} \delta(\omega - \omega_E^*), \text{ 其中 } \omega_E^*(\mu_c^*) = d(\mu_c^*)A, T_{c\max}(\mu_c^*) = c(\mu_c^*)A,$$

相应的 λ 值为 $\lambda_M(\mu_c^*)$,

实线为数值解结果^[10,12]; 虚线分别根据(28), (29), (34-2)式得出的结果

根据文献 [3] 可知

$$\mu^* \equiv \mu^*(N) = \frac{\mu_c^*}{1 + \mu_c^* \ln \frac{10\omega_E}{(2N+1)\pi T_c}}. \quad (30)$$

在文献 [3] 中已取 $N = 49$, $\frac{T_c}{\omega_E}$ 可由 (27) 式得到

$$\frac{T_c}{\omega_E} = \frac{\alpha_0 \sqrt{\lambda_M(\mu_c^*)}}{(1 + 2.45\mu_c^*)^{1/2}} \left\{ 1 + \frac{\alpha_1(1 + 2.7\mu_c^*)}{\lambda_M(\mu_c^*)} + \frac{(\alpha_{21} + \alpha_{22})(1 + 2.7\mu_c^*)^2}{\lambda_M(\mu_c^*)^2} + \dots \right\}, \quad (31)$$

将 (28) 式代入 (31) 式可得

$$\frac{T_c}{\omega_E} = 0.1364 \sqrt{\frac{1 + 2.7\mu^*}{1 + 2.45\mu^*}}. \quad (32)$$

将 (32) 式代入 (30) 式可得

$$\mu_c^* = \frac{\mu^*(N)}{1 + \mu^*(N) \ln \left[4.2436 \sqrt{\frac{1 + 2.7\mu^*(N)}{1 + 2.45\mu^*(N)}} \right]}. \quad (33)$$

将 (28) 式代入 (27-2) 式可得

$$T_{c\max} = \frac{0.2295}{\sqrt{(1 + 2.45\mu^*)(1 + 2.7\mu^*)}} A. \quad (34-1)$$

因此

$$c(\mu^*) = \frac{0.2295}{\sqrt{(1 + 2.45\mu^*)(1 + 2.7\mu^*)}}. \quad (34-2)$$

(28), (29), (34-2) 式就是我们求出的结果. 其中 $\mu^* \equiv \mu^*(N)$ 与 μ_c^* 的关系由 (33) 式给出. 图 1 给出 $\lambda(\mu_c^*) - \mu_c^*$, $c(\mu_c^*) - \mu_c^*$, $d(\mu_c^*) - \mu_c^*$ 曲线与数值解的比较^[10,12] 由于文献 [10] 的曲线坐标是 μ_c^* , 应该先用 (33) 式将 (28), (29), (34-2) 式中的 $\mu^*(N)$ 换算成 μ_c^* . 由图 1 可见, (28), (29), (34-2) 式与数值解符合甚好. 局部的偏离是由于 (27) 式的系数不够准确, 加之 (26) 式的截断误差所致.

四、 T_c 与谱参数的关系

关于 T_c 与有效声子谱的关系, 曾有某些含混之处. Leavens 等人认为, A 一定时, $T_c - \lambda$ 曲线在 $1.43 < \lambda < 1.65$ 处有一极大值^[10,13]. 而 Allen 和 Dynes 认为 $\eta/M = \lambda \langle \omega^2 \rangle$ 一定时, $T_c - \lambda$ 曲线并无极值出现. 对此, 李宏成已通过求 Eliashberg 方程的数值解作了澄清^[14]. 本节指出, 这些结论可由 (9) 式很容易得出. 我们将概括前节的结果, 通过讨论, 还可得到一些新结论. 为了便于讨论, 仍从双 δ 谱 (21) 式出发.

1. 当 $\eta/M = \lambda \langle \omega^2 \rangle$ 不变时, 如果 (21) 式中 ω_s 不变, 在第三节中已证明, 以 Einstein 谱 (24) 式的 T_c 最高. 此时全部谱重量要处于 ω_s 处.

当变成 Einstein 谱后, T_c 还可进一步提高. 如仍保持 η/M 不变, 则从 (25-1) 式可

知,随 λ 增加, T_c 单调上升. 当 $\lambda \rightarrow \infty$ 时, $T_c \rightarrow T_{c\max} = 0.1827\sqrt{\eta/M}$, 此时 T_c 没有极大值出现, 这正是 Allen 和 Dynes 的结论. 如果变成 Einstein 谱后, 不再保持 η/M 不变, 而改令 A 不变. 则由 (25-2) 式可知, 随 λ 的增加, 将出现极大值. 当 $\lambda = 1.189$ 时, $T_c = T_{c\max} = 0.2295A$. 相应的 $\omega_E = 1.682A$, 这正是 Leavens 的结论. 此时 $\delta T_c / \delta \alpha^2 F$ 的峰位置也为 $\omega_0 = 1.682A$, 与 ω_E 重合.

2. 如果不令 η/M 一定, 而令谱型一定. 由 (1), (21) 式可知

$$T_c = \alpha_0 \sqrt{\lambda} \omega_2 (a_1 r^2 + a_2)^{1/2} \left\{ 1 + \frac{\alpha_1 (a_1 r^4 + a_2)}{\lambda (a_1 r^2 + a_2)^2} + \left[\alpha_{21} \frac{(a_1 r^6 + a_2)}{(a_1 r^2 + a_2)^3} + \alpha_{22} \frac{(a_1 r^4 + a_2)^2}{(a_1 r^2 + a_2)^4} \right] \frac{1}{\lambda^2} + \dots \right\} \quad (35)$$

或

$$\frac{T_c}{\langle \omega \rangle} = \alpha_0 \sqrt{\lambda} \frac{(a_1 r^2 + a_2)^{1/2}}{(a_1 r + a_2)} \left\{ 1 + \frac{\alpha_1 (a_1 r^4 + a_2)}{\lambda (a_1 r^2 + a_2)^2} + \left[\alpha_{21} \frac{(a_1 r^6 + a_2)}{(a_1 r^2 + a_2)^3} + \alpha_{22} \frac{(a_1 r^4 + a_2)^2}{(a_1 r^2 + a_2)^4} \right] \frac{1}{\lambda^2} + \dots \right\}. \quad (36)$$

当谱型不变时, a_1, a_2, r 均不变. (36) 式中 λ^{-1} 项较高次项作用更大, 而 $\alpha_1 = -0.3434 < 0$. 因此, 随 λ 增加, $T_c / \langle \omega \rangle$ 单调上升, 不再出现极值.

3. 由 (1) 式显而易见, 对 B 类超导体, 当 λ 越大时, $\frac{T_c}{\sqrt{\lambda \langle \omega^2 \rangle}}$ 与谱型的关系越不明显.

当 $\lambda \rightarrow \infty$ 时, $\frac{T_c}{\sqrt{\lambda \langle \omega^2 \rangle}} \rightarrow \frac{0.1827}{(1 + 2.45\mu^*)^{1/2}}$. 而对 A 类超导体, 因为服从 McMillan 公式:

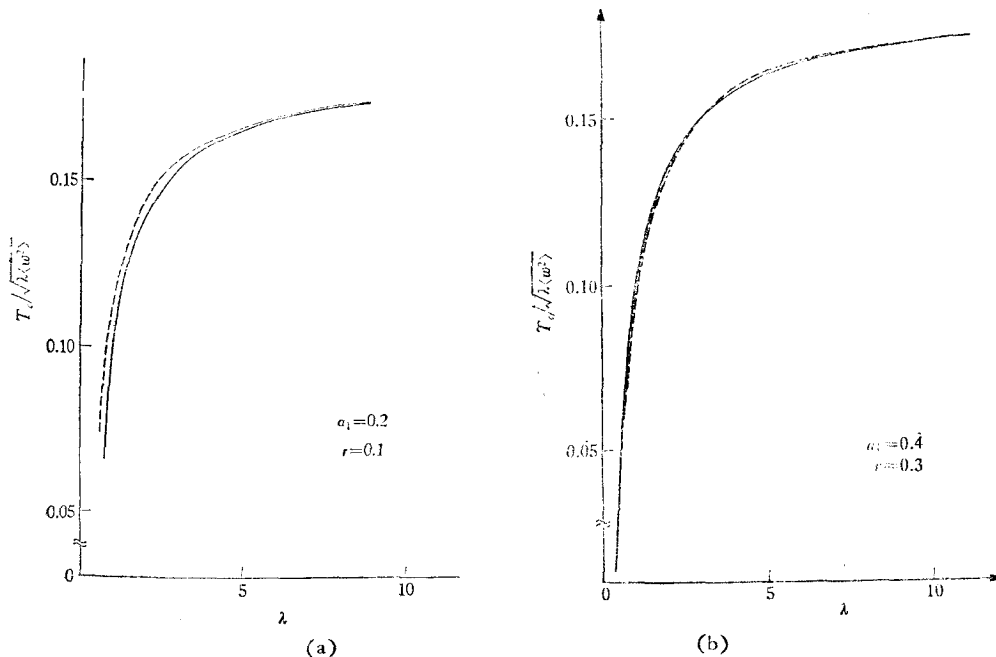


图 2 双 δ 谱 (21) 式 T_c 的数值解结果 ($N=8$) 与近似公式 (37) 的比较 $\mu^*=0$
实线为数值解; 虚线为 (37) 式结果

$T_c/\omega_{10g} \sim \exp \left[-\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^* - 0.62\lambda\mu^*} \right]$, 因此, T_c/ω_{10g} 与谱型无关,

4. 对于 η/M 一定, ω_2 一定的双 δ 谱, 如果附加一定条件, 还可作进一步讨论. 为便于讨论, 在 (9) 式中仅取两项, 并考虑 $\mu^* = 0$ 的情形. 此时

$$T_c = 0.1827 \sqrt{\frac{\eta}{M}} \left[1 - \frac{0.3434\omega_2^2 (\beta r^4 + 1)}{\sqrt{\eta/M} (\beta r^2 + 1)} \right]. \quad (37)$$

为了考察 (37) 式的近似程度, 我们选了 28 组参数 ($a_1 = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$) ($r = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.7, 0.9$), 将 (37) 式与数值解作了比较. 除了 $a_1 = 0.8, r \leq 0.4$ 时两者符合稍差外; 一般参数时, 两者符合相当好. 图 2 给出 $a_1 = 0.2, r = 0.1$ 及 $a_1 = 0.4, r = 0.3$ 的例子, 其中实线是数值解 ($N = 8$) 的结果, 虚线是 (37) 式结果.

由 (37) 式可知, 当 r 固定而 $\beta = a_1/a_2$ 增加时, T_c 随 β 的增加而单调上升. 由于 $\langle \omega^2 \rangle = a_1\omega_1^2 + a_2\omega_2^2 = \omega_2^2 \left[\frac{1-r^2}{1+\beta} + r^2 \right]$, β 的增加相当于 $\langle \omega^2 \rangle$ 减小, 故此时声子谱软化可提高 T_c . 而当 β 固定, 令 r 变化时, T_c 有极大值, 位置在:

$$r_0^2 = \frac{\sqrt{1+\beta}-1}{\beta}. \quad (38)$$

考虑到 $\langle \omega^2 \rangle = a_2\omega_2^2(\beta r^2 + 1) = \omega_2^2 \frac{\beta r^2 + 1}{\beta + 1}$, 因此, $r < r_0$ 时, 声子谱硬化可提高 T_c .

而 $r > r_0$ 时, 软化可提高 T_c . 相应的 λ 极值点位置为

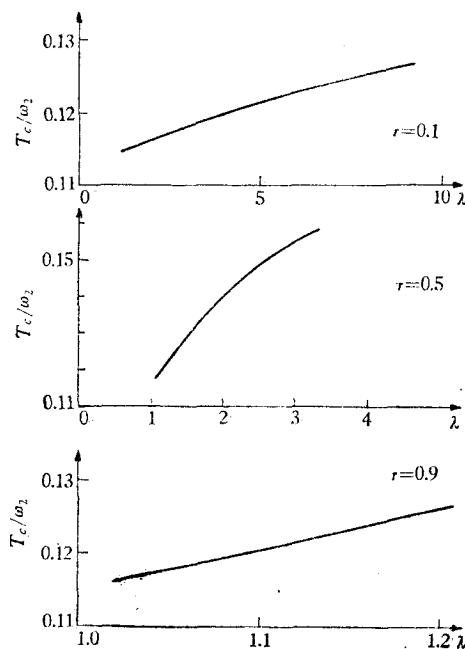


图 3 双 δ 谱 (21) 式, 当 $(\eta/M\omega_2) = 1$ 及 $r = \omega_1/\omega_2$ 不变时, $(T_c/\omega_2) - \lambda$ 关系 数值解取 $N = 8, \mu^* = 0$

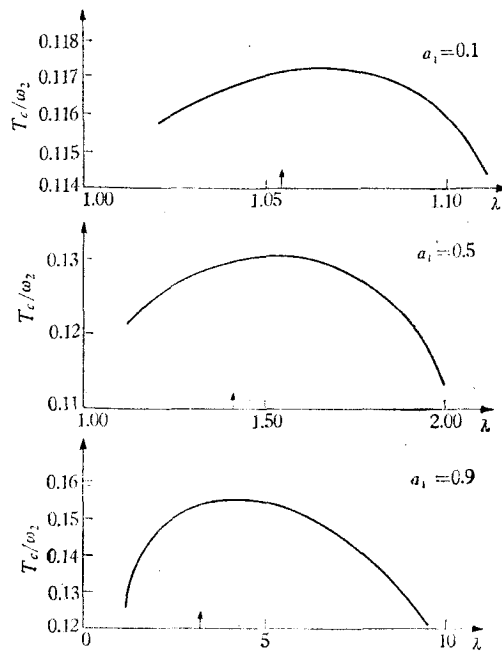


图 4 双 δ 谱 (21) 式, 当 $(\eta/M\omega_2) = 1$ 及 a_1 不变时 $(T_c/\omega_2) - \lambda$ 关系 箭头标出 (39) 式给出的极值点位置; 数值解取 $N = 8, \mu^* = 0$

$$\lambda_0 = \frac{\eta/M}{a_2\omega_2^2(\beta r_0^2 + 1)}. \quad (39)$$

为了证实上述结论,我们对 η/M 一定、 ω_2 一定的双 δ 谱,求数值解,并分别在 β 一定或 r 一定时作了 $\left(\frac{T_c}{\omega_2}\right)-\lambda$ 曲线,如图 3 和图 4 所示. 图 3 表明,当 r 一定时, $\left(\frac{T_c}{\omega_2}\right)-\lambda$ 曲线确实单调上升,没有极值点. 图 4 表明, β 一定时,有极值点出现. 图中用箭头标明 (39) 式求出的 λ_0 位置,与数值解符合甚好. 因此证明 (9) 式仅取前两项确实可以描述 T_c 与谱参数的关系,而且 (39) 式也可以相当好地给出 β 不变时, $\left(\frac{T_c}{\omega_2}\right)-\lambda$ 曲线的极大值位置.

五、结 论

从 T_c 级数公式 (9) 出发,我们得到了 B 类超导体同位素效应的表达式. 预计它应该较 McMillan 公式更好地描述 B 类超导体的同位素效应.

此外,还指出双 δ 谱如果 ω_2 不变,将以 Einstein 谱的 T_c 最高. 当 A 不变而 Einstein 谱峰与相应的 $(\delta T_c/\delta \alpha^2 F)-\omega$ 曲线峰值重合时, T_c 可进一步提高. 我们给出了此时 λ 应满足的级数表达式. 在 $\mu^* = 0$ 及 $\mu^* \approx 0$ 的情形下,还给出了 T_c 上限的级数表达式. 以上结果均与数值解结果很好符合.

最后,分析了 T_c 与 $\alpha^2 F(\omega)$ 谱参数的关系. 由 T_c 级数公式可以清楚地看出, T_c 与谱参数之间的不同关系完全是因为控制条件不同造成的. 这里着重指出: 对于绝大多数参数情况下, T_c 级数公式仅取前两项,可作为数值解的很好近似,这样可使公式大大简化. 我们希望,用此近似级数公式能引出其它实际中有用的结论.

本文承蔡建华、吴杭生、龚昌德同志提供了许多宝贵建议,特此致谢.

参 考 文 献

- [1] 吴杭生等, 物理学报, **26** (1977), 509.
- [2] 龚昌德等, 物理学报, **27** (1978), 85.
- [3] 蔡俊道等, 物理学报, **28** (1979), 393.
- [4] 吴杭生等, 物理学报, **27** (1978), 746.
- [5] W. L. McMillan, *Phys. Rev.*, **167** (1968), 331.
- [6] P. B. Allen and R. C. Dynes, *Phys. Rev.*, **B12** (1975), 905.
- [7] J. Bardeen, L. N. Cooper & J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.*, **106** (1957), 162.
- [8] C. R. Leavens, *Solid State Commun.*, **15** (1974), 1329.
- [9] 吉光达等, 物理学报, **28** (1979), 571.
- [10] C. R. Leavens, *Solid State Commun.*, **17** (1975), 1499.
- [11] 刘福绥等, 低温物理, 待发表.
- [12] C. R. Leavens, *J. Phys. F. (Metal Physics)*, **7** (1977), 1911.
- [13] C. R. Leavens and J. P. Carbotte, *J. Low. Temp. Phys.*, **14** (1974), 195.
- [14] 李宏成, 物理学报, **28** (1979), 104.
- [15] 吉光达等, 低温物理, **1** (1979), 75.

APPLICATIONS OF THE SERIES FORMULA OF SUPERCONDUCTING CRITICAL TEMPERATURE

JI GUANG-DA CAI JUN-DAO

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

Using the series formula of superconducting critical temperature (1), we have obtained an expression of isotope effect for B-type superconductors. In both cases of $\mu^* = 0$ and $\mu^* \neq 0$, we have obtained a series expression for the upper limit of T_c . The agreement between the results of series formula and numerical solution is quite good. Finally, with $\mu^* = 0$, we have discussed the relation between T_c and various spectrum parameters. It is apparent from the series expression that when fixing different parameters the behaviour of T_c is completely different, hence we have made a general interpretation for the different conclusions of other authors about the effect of phonon spectrum on T_c . We emphasize that, in most cases, the series formula (1), which we took up to first two terms only, can be used as a good approximation for numerical solution, so that the series formula is simplified greatly. It may be predicted that by using this simplified formula we can investigate many other problems.