

奇点 $\bar{z}_{ph}$ 与超导临界温度级数

雷 啸 霖

(中国科学院上海冶金研究所)

1981年3月3日收到

提 要

基于对复变函数 $F_\alpha(y) = \int_0^{\omega_{ph}-\alpha} \frac{\omega^2 y}{\omega^2 y + 1} g(\omega) d\omega$ 解析性质的分析, 本文认为: 在 $\bar{z}_{ph}$ 决定的收敛半径以外, 吴杭生等提出的 T_c 级数解的部分和作为近似 T_c 公式仍可用于 $1/\lambda$ 的适当范围. 但它可能达到的精度依赖于谱形, 一般来说是有限的.

一、引 言

在最近的一篇文章中^[1]作者证明: 对复变函数

$$z = F(y) = \int_0^{\omega_{ph}} \frac{\omega^2 y}{\omega^2 y + 1} g(\omega) d\omega \quad (1)$$

的反函数 $y = G(z)$, 除了 $z = 1$ 以及文献[2]考虑过的由条件 $F'(y) = 0$ 确定的正则分支点 $\bar{z}_\pm$ 以外, 位于复平面负实轴上的点

$$\bar{z}_{ph} = F(-\omega_{ph}^{-2}) = \int_0^{\omega_{ph}} \frac{\omega^2 g(\omega)}{\omega^2 - \omega_{ph}^2} d\omega \quad (2)$$

一般来说也是分支点. 因此, 在计算一级 T_c 级数的收敛半径时应当考虑. 这里所谓一级 T_c 级数是指变数 $z = 1/\lambda$ 和 $y = (2\pi T_c)^{-2}$ 的方程(1)的级数展式按拉格朗日公式反演所得的级数^[3]:

$$y = \frac{1}{\langle \omega^2 \rangle} \sum_{n=1}^{\infty} b_n \left(\frac{1}{\lambda} \right)^n, \quad (3)$$

其中

$$b_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n-1} (-1)^k \binom{n+k-1}{k} \sum_{\{m_i\}} a_{m_1+1} a_{m_2+1} \cdots a_{m_k+1} \quad (n \geq 2),$$

$$\left(m_i \geq 1, \sum_{i=1}^k m_i = n-1 \right)$$

$$a_l = (-1)^{l-1} \langle \omega^{2l} \rangle / \langle \omega^2 \rangle^l,$$

$$\langle \omega^n \rangle = \int_0^{\omega_{ph}} \omega^n g(\omega) d\omega.$$

一级 T_c 级数的收敛半径 $1/\lambda_1$ 与吴杭生等的 T_c 级数解^[3]

$$(2\pi T_c)^{-2} = \frac{C_0}{\lambda \langle \omega^2 \rangle} \left\{ 1 + C_1 \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} \frac{1}{\lambda} + \left(C_{21} \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} + C_{22} \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \right) \frac{1}{\lambda^2} + \cdots \right\} \quad (4)$$

的收敛半径有直接的联系^[4].

周子舫等^[5]研究了许多超导体声子谱的 $\bar{z}_{ph}$, 发现多数实际超导体都有 $|\bar{z}_{ph}| < \min(|\bar{z}_{\pm}|, 1)$, 因而一级 T_c 级数的收敛半径几乎都由 $\bar{z}_{ph}$ 决定. 但 $|\bar{z}_{ph}|$ 的值又是如此之小, 以致迄今已算过的超导体的 $1/\lambda$ 都落到由 $|\bar{z}_{ph}|$ 确定的收敛圆外. 在这种情况下, 级数解 (4) 对实际超导体是否还是精确的 T_c 公式?

为了研究这个问题, 周子舫等^[5]对模拟 Pb 谱的一级 T_c 级数 (3) 的前 11 项部分和作了仔细计算, 并与直接从方程 (1) 数值求解所得的结果比较. 他们发现 $1/\lambda = 0.4547$ 时二者的相对误差仅为 $\sim 10^{-4}$, $1/\lambda = 0.5059$ 时相对误差仅为 $\sim 4 \times 10^{-4}$, 而该谱的 $\bar{z}_{ph} = -0.4844$. 这个现象如何理解?

吴杭生和顾一鸣^[6]最近讨论了这个问题. 他们认为, 即使 $1/\lambda$ 在 $|\bar{z}_{ph}|$ 决定的收敛圆外, 只要小于 $\min(|\bar{z}_{\pm}|, 1)$, 一级 T_c 级数仍然是一个误差可以任意小的表达式. 即是说, 取足够大的 N (只要仍然是有限的), T_c 级数解 (4) 的前 N 项可以达到任何给定的精度.

本文提出一些略为不同的看法.

二、 $\bar{z}_{ph}$ 总是奇异点

由 (1) 式确定的复变函数 $z = F(y)$ 是在 y 平面上除了负实轴 $(-\infty, -\omega_{ph}^{-2})$ 外处处有定义的单值解析函数. 它将有割缝 $(-\infty, -\omega_{ph}^{-2})$ 的 y 平面 (其边界为割缝上岸 Γ^+ 和下岸 Γ^-) 映射到 z 平面由曲线 γ^+ 和 γ^- 所围成的区域. 假定在最高频率 ω_{ph} 附近有效声子谱的行为是^[1]

$$g(\omega) \sim (\omega_{ph} - \omega)^n \quad n \geq \frac{1}{2}, \quad (5)$$

靠近 $\bar{z}_{ph}$ 处 γ^+ 和 γ^- 有图 1 所示的形式. 至少在 $\bar{z}_{ph}$ 附近的一个范围内 $\bar{z}_{ph}$ 与原点的

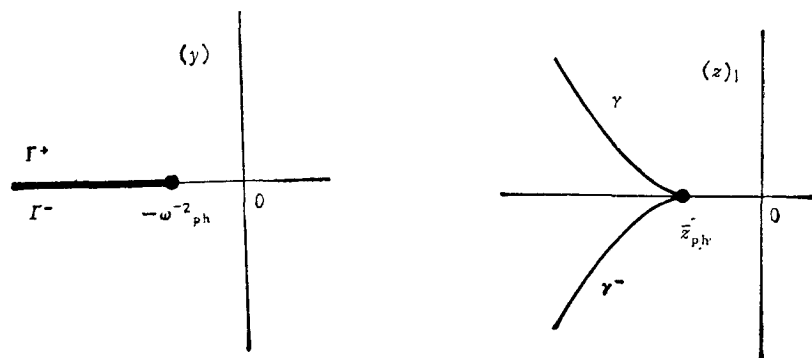


图 1

距离不比其他边界点更远. 这样一个点总要限制级数的收敛半径¹⁾. 实际上, 反函数 $y = G(z)$ 在 $\bar{z}_{ph}$ 附近不外乎两种可能: 1) 不能够越过 γ^+ 和 γ^- 解析延拓, 这时 $\bar{z}_{ph}$ 当然要限制级数的收敛半径; 2) 能够越过 γ^+ 和 γ^- 解析延拓. 这就是说在 $\bar{z}_{ph}$ 附近的 γ^+ 和 γ^- 曲线上函数 $G(z)$ 是解析的. 我们总可以假定在 $\bar{z}_{ph}$ 附近没有相应于 $F'(y) = 0$ 的点 (若不然, $\bar{z}_{ph}$ 附近必有正则分支点, 它也要限制级数的收敛半径). 于是在 $\bar{z}_{ph}$ 附近 γ^+ 和 γ^- 是正则解析曲线. 按照对称原理, 如文献 [1] 所证明的, $\bar{z}_{ph}$ 将是一个分支点, 因而它也要限制级数的收敛半径.

三、谱尾巴的截断

我们限于讨论 $|\bar{z}_{ph}| < \min(|\bar{z}_{\pm}|, 1)$ 的情形. 这时一级 T_c 级数的收敛半径 $1/\Lambda_1 = |\bar{z}_{ph}|$. 当 $1/\lambda > |\bar{z}_{ph}|$ 时级数不再收敛, 严格地讲, 作为无穷级数的这个表达式没有意义了. 但是, 如文献 [7] 指出的, $\bar{z}_{ph}$ 的位置对有效声子谱的高频端行为是很敏感的. 实际超导体的声子谱在高频端往往有小的拖尾, 这个拖尾在整个谱中只占很小的权重. 砍掉一点尾巴对 Eliashberg 方程只有小的影响. 能否因此扩大级数的收敛范围呢?

把 $\mu^* = 0$ 的一级 T_c 方程写作

$$\frac{1}{\lambda} = F_a(y) + \delta, \quad (6)$$

这里 $y = (2\pi T_c)^{-2}$, 而

$$F_a(y) = \int_0^{\omega_{ph}-\alpha} \frac{\omega^2 y}{\omega^2 y + 1} g(\omega) d\omega, \quad (7)$$

$$\delta = \int_{\omega_{ph}-\alpha}^{\omega_{ph}} \frac{\omega^2 y}{\omega^2 y + 1} g(\omega) d\omega, \quad (8)$$

其中 $0 \leq \alpha < \omega_{ph}$. 由于 $y \geq 0$ 及 $g(\omega) \geq 0$, $F_a(y)$ 及 δ 都是正实数. 容易看出, 当 α 足够小时对任何 y 值总可使 $\delta/F_a(y) \ll 1$, 因而 $\delta\lambda \ll 1$; 同时显然有

$$\delta < \delta_m = \int_{\omega_{ph}-\alpha}^{\omega_{ph}} g(\omega) d\omega. \quad (9)$$

如果记

$$z = \frac{1}{\lambda} - \delta, \quad (10)$$

一级 T_c 方程又可形式上写成

$$z = F_a(y). \quad (11)$$

把 $F_a(y)$ 中的被积函数展成级数并将方程 (11) 按拉格朗日公式反解, 将得到一个级数表达式

$$y = \frac{1}{\langle \omega^2 \rangle_\alpha} \sum_{n=1}^{\infty} b_{n\alpha} \left(\frac{1}{\lambda} - \delta \right)^n. \quad (12)$$

这个级数的系数 $b_{n\alpha}$ 与从方程 (1) 出发按拉格朗日公式反解而得的一级 T_c 级数 (3) 的系

1) $\bar{z}_{ph}$ 点显然属于 $G(z)$ 的满足条件——当 z 为正实数时, $y = G(z)$ 也为正实数——的那个单值分支.

数 b_n 的差别只是将所有的 $\langle \cdots \rangle$ 变成

$$\langle \cdots \rangle_\alpha \equiv \int_0^{\omega_{ph}-\alpha} d\omega g(\omega) \cdots, \quad (13)$$

但是, 级数 (12) 的收敛半径 $1/\Lambda_\alpha$ 将决定于函数 $z = F_\alpha(y)$ 的反函数 $y = G_\alpha(z)$ 在复平面上的行为. 一般地说 $1/\Lambda_\alpha$ 依赖于 α 的选取, 也依赖于 $g(\omega)$ 的形式, 但总是大于 $|\bar{z}_{ph}|$ 的. 另一方面 δ 的大小也依赖于 α 及 $g(\omega)$. 对于一个给定的谱, 我们有可能选取适当大小的 α , 使级数 (12) 的收敛半径 $1/\Lambda_\alpha$ 增大到一定程度, 同时 $\delta\lambda$ 及 δ_m 又限制在适当的数值内. 由于幂级数在小于其收敛半径的闭区域内是一致收敛的, 所以当 $\lambda^{-1} < \lambda_0^{-1} - \delta_m(\lambda_0^{-1} < \Lambda_\alpha^{-1})$ 时, 可以使级数的前 N 项和

$$\frac{1}{\langle \omega^2 \rangle_\alpha} \sum_{n=1}^N b_{n\alpha} \left(\frac{1}{\lambda} - \delta \right)^n \quad (14)$$

与 y 之差的绝对值小于某个给定的误差. 因为 N 是某个有限的值, 而 $\delta\lambda$ 及 δ_m 又是小的, 所以 (14) 式与一级 T_c 级数 (3) 的前 N 项部分和

$$S_N = \frac{1}{\langle \omega^2 \rangle} \sum_{n=1}^N b_n \left(\frac{1}{\lambda} \right)^n \quad (15)$$

可以接近到一定程度.

这就是说, 当 $1/\lambda$ 大于一级 T_c 级数 (3) 的收敛半径 $|\bar{z}_{ph}|$ 时, 在一定范围内我们仍然可以用其前 N 项部分和作为 T_c 的近似公式. 但是, N 取什么数最合适, 可以达到多好的近似程度, 都依赖于谱 $g(\omega)$ 的性质. 我们可以通过对 δ_m 及函数 $z = F_\alpha(y)$ 的反函数在复平面上行为的研究作一些估计.

四、函数 $z = F_\alpha(y)$ 在 $\bar{z}_{ph}$ 附近的行为

复变函数 $z = F_\alpha(y)$ 将 y 平面以负实轴割缝 $(-\infty, -(\omega_{ph} - \alpha)^{-2})$ 的上岸 Γ_α^+ 和下游 Γ_α^- 为边界的区域映射成 z 平面以 r_α^+ 和 r_α^- 为边界的区域 (图 2). 图 2(b) 画出的是谱

$$g_1(\omega) = \begin{cases} 4\omega(1 - \omega^2) & \text{当 } \omega \leq 1; \\ 0 & \text{当 } \omega > 1 \end{cases} \quad (16)$$

几个不同 α 值的 r_α^+ 和 r_α^- 曲线. 这个谱 $\omega_{ph} = 1$, $\bar{z}_{ph} = -1$. 虽然由于 $|\bar{z}_{ph}|$ 值已经为 1, 我们对 $\bar{z}_{ph}$ 点并无兴趣, 但可以从这个图看到不同 α 下曲线 r_α^+ 和 r_α^- 变化的情况.

第二个例子是谱

$$g_2(\omega) = \begin{cases} 4(1 - 4\Delta)\omega(1 - \omega^2) + \Delta\omega(4 - \omega^2) & \omega \leq 1, \\ \Delta\omega(4 - \omega) & 1 < \omega \leq 2, \\ 0 & \omega > 2, \end{cases} \quad (17)$$

其中 Δ 是很小的正数. 这个谱 $\omega_{ph} = 2$, $\bar{z}_{ph} = -0.096 - 3.6\Delta$, 相应一级 T_c 级数的收敛半径 $1/\Lambda_1 = |\bar{z}_{ph}|$. 不同 α 的 r_α^+ 曲线及相应的 δ_m 值见图 3(a)–(d).

由图 2 及图 3 可以看出, $\alpha > 0$ 时收敛半径 $1/\Lambda_\alpha$ 比 $|\bar{z}_{ph}|$ 大, 因为它至少已扩大到原点到 r_α^+ 边界的最短距离. 作为 y 平面上的直线 Γ_α^+ 的象的 r_α^+ 曲线可有不同的情况.

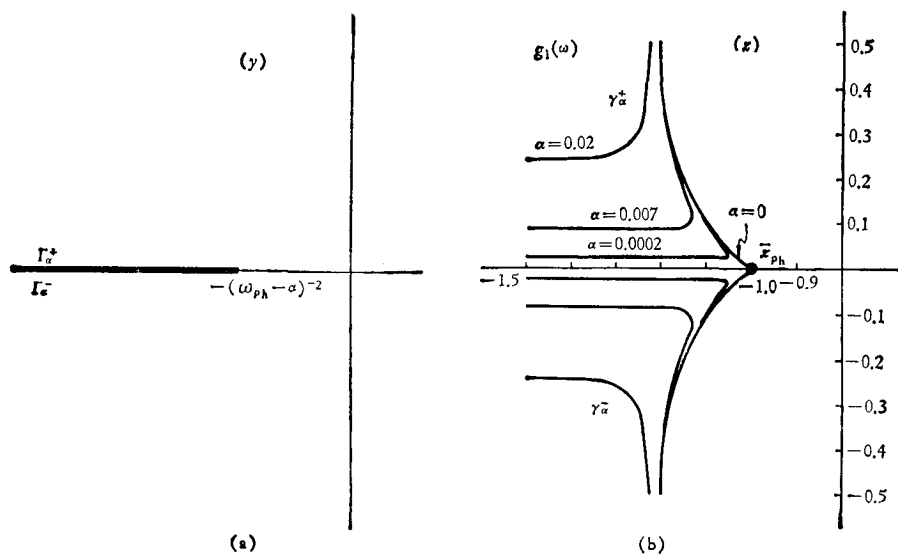


图 2

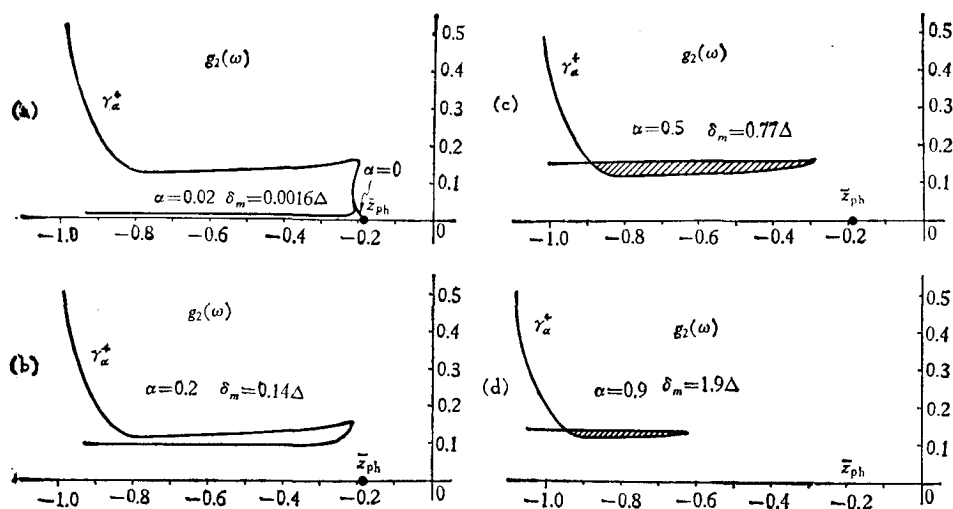


图 3 对几个不同的 \$\alpha\$ 值 \$g_2(\omega)\$ 谱的 \$\gamma_\alpha^+\$ 曲线 取 \$\Delta = 0.025\$ 绘制

一种情况是 γ_α^+ 曲线已经有重点, 如图 3(c) 和 (d) 所示. 这时, 阴影部分的每一个 z 值已经对应于两个不同的 y , 所以 γ_α^+ 曲线必定环绕了分支点. 分支点的确切位置可由 $F'_\alpha(y) = 0$ 的条件确定, 通常总靠近 γ_α^+ 曲线转折特别大的地方. 另一种情况如图 2 及图 3(a) 和 (b), γ_α^+ 曲线没有重点, 而且一般来说是光滑的. 我们不妨认为函数 $y = G_\alpha(z)$ 可以越过 γ_α^+ 解析延拓(如若不能, 它自然要限制收敛半径), 即认为 γ_α^+ 上的点是解析的. 但是, γ_α^+ 曲线的曲率半径总是剧烈变化的, 而它是 y 平面上一条直线的映射. 在这种情况下越过 γ_α^+ 曲线解析延拓出去以后不久将会遇到奇异性, 例如, 经过一段距离后就不能再往前延拓了, 即使能继续延拓也会有分支点, 等等. 奇异点的位置推测不超过离边界最

近的曲率中心¹⁾. 当 α 小的时候 (确切些说是 δ_m 小的时候), r_a^+ 曲线的最小曲率半径很小, 奇异点与原点的距离几乎与 r_a^+ 曲线与原点的最近距离相差无几.

根据这种分析, 画出不同 α 下的 r_a^+ (或 r_a^-) 曲线, 我们就可以从它离原点的距离估计级数 (12) 的收敛半径 $1/\Lambda_a$. 对于 $g_2(\omega)$ 谱, 当 $\alpha = 0.9$ 时 r_a^+ 曲线的限制已超过 0.64, 比 $|\bar{z}_{ph}| = 0.096 + 3.6\Delta$ 大大地增加了. 当 α 增加到 1 时, r_a^+ 曲线的限制也扩大到 ~ 1 , 而这时 $\delta_m = 2.25\Delta$. 所以, 对于 Δ 非常小的 $g_2(\omega)$ 谱, 当 $1/\lambda$ 小于 1 时, 由级数 (3) 的前面有限 N 项部分和作为一级 T_c 方程的解可以足够精确; 虽然作为一个无穷级数它早已不收敛.

但是, 很明显, 收敛半径可以扩张的程度及 δ_m 的大小依赖于具体的谱形. 因此, 当 $1/\lambda > |\bar{z}_{ph}|$ 时, 用一级 T_c 级数的部分和 S_N 代替一级 T_c 方程 (1) 的解可能达到的精确程度与谱形有关. 对于一个给定的谱和一定的 $1/\lambda$, 精度只能达到一定范围, 除了偶然性以外, 不论选取多少项的和, 误差都不可能任意小.

五、模拟 Pb 谱

作为一个实际的例子, 我们考虑周子舫等的模拟 Pb 谱 $\alpha^2 F(\omega)$ ^[5]. 它的归一化谱函数可写成

$$g(\omega) = \begin{cases} 2.461\omega & 0 < \omega \leq 0.2612, \\ 8.949 - 2.170\omega^{-1} & 0.2612 < \omega \leq 0.4015, \\ 32.81(\omega - 0.5727)^2\omega^{-1} + 0.4610\omega^{-1} & 0.4015 < \omega \leq 0.7516, \\ 18.20 - 15.19\omega^{-1} & 0.7516 < \omega \leq 0.8249, \\ 5.742(\omega - 1)^2\omega^{-1} & 0.8249 < \omega \leq 1, \\ 0 & \omega > 1. \end{cases} \quad (18)$$

我们已将频率尺度取成 $\omega_{ph} = 1$. 文献 [5] 给出了 $\bar{z}_{ph} = -0.4844$, $\bar{z}_{\pm} = 0.147 \pm 0.875i$. 我们计算了 $\bar{z}_{ph}$ 附近几个不同 α 值的 r_a^+ 曲线, 示于图 4. 相应的 δ_m 值以及由 r_a^+ 曲线与原点的距离估计的收敛半径 $1/\Lambda_a$ 列于表 1. 可见, 周子舫等^[5] 计算这个谱的一级 T_c 级数的 11 项部分和的结果——当 $1/\lambda = 0.4547$ 时相对误差为 10^{-4} , 当 $1/\lambda = 0.5059$ 时相对误差为 4×10^{-4} ——并不难理解.

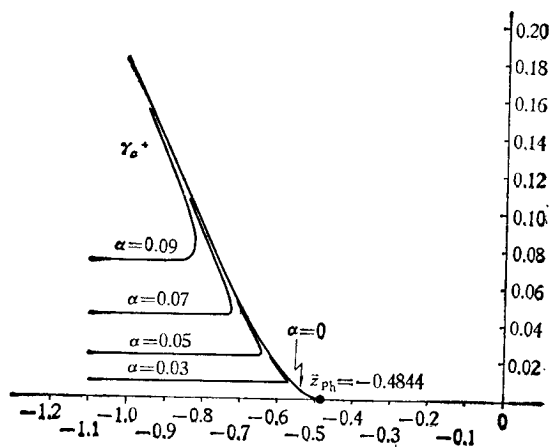


图 4 模拟 Pb 谱的 r_a^+ 曲线

1) 不难证实 $g_1(\omega)$ 和 $g_2(\omega)$ 的情形以及二次、三次曲线符合这一点. 我们推测在普遍的情况下仍然是对的.

表 1

α	0	0.03	0.05	0.07	0.09
δ_m	0	5.3×10^{-5}	2.5×10^{-4}	6.9×10^{-4}	1.5×10^{-3}
$1/\Lambda_\alpha$	0.4844	0.57	0.64	0.72	0.82

六、结 语

纵然对许多实际超导体 $1/\lambda$ 常在 $|\bar{z}_{ph}|$ 所决定的收敛半径以外, 吴杭生等的 T_c 级数解(4) 不能作为严格的临界温度表达式; 但是, 把它前面一些项的部分和作近似 T_c 公式仍可能相当好地用于 $|\bar{z}_{ph}|$ 以外的一定范围. 文献[8] 的大量计算结果与实验符合证明了这一点.

但是, 一般来讲, 当 $1/\lambda$ 大于 $|\bar{z}_{ph}|$ 决定的收敛半径时, T_c 级数解(4) 的精度是有限制的. 它可能达到的近似程度依赖于谱形. 我们可以通过研究截断函数 $F_\alpha(y)$ 在复平面上的行为对此作定性的估计.

参 考 文 献

- [1] 雷啸霖, 物理学报, **29** (1980), 1333.
- [2] 龚昌德、吴杭生、蔡建华、蔡俊道、吉光达, 物理学报, **27** (1978), 85.
- [3] 吴杭生、蔡建华、龚昌德、吉光达、蔡俊道, 物理学报, **26** (1977), 509.
- [4] 周子舫、吴杭生、茅德强、顾一鸣, 物理学报, **29** (1980), 1186.
- [5] 周子舫、茅德强、顾一鸣、吴杭生, 物理学报, **29** (1980), 1338.
- [6] 吴杭生、顾一鸣, 物理学报, **30** (1981), 1132.
- [7] 雷啸霖, 物理学报, **30** (1981) 1127.
- [8] 蔡俊道、吉光达、吴杭生、蔡建华、龚昌德, 物理学报, **28**, (1979), 394.

SINGULAR POINT $\bar{z}_{ph}$ AND THE SERIES FOR SUPERCONDUCTING CRITICAL TEMPERATURE

LEI XIAO-LIN

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica)

ABSTRACT

Based on a discussion on the analytical properties of the complex function $F_\alpha(y) = \int_0^{\omega_{ph}-\alpha} \frac{\omega^2 y}{\omega^2 y + 1} g(\omega) d\omega$, we suggest that the partial sum of the T_c series solution proposed by Wu Hang-sheng et al., as an approximate expression for superconducting critical temperature, may still work fairly well within certain range of $\frac{1}{\lambda}$ greater than the radius of convergence which is limited by the singular point $\bar{z}_{ph}$. However, the error of the expression that depends upon the highfrequency behavior of the effective phonon spectral $g(\omega)$, can not be made infinitely small.