

T_c 对 λ 的微分曲线

刘 长 汶 吴 杭 生

(中国科学技术大学物理系)

1981年6月9日收到

提 要

本文对 $(dT_c/d\lambda)-\lambda$ 曲线进行了分析,得到的结论是, $T_c-\lambda$ 曲线是由性质完全不同的“McMillan 区域”, “ λ^* 区域”和“级数解区域”三个部分组成的. 这个结论和文献 [20] 得到的是是一致的,只是 n 一般不等于 1.55,而是个大于 0.5,并随有效声子谱而异的实数.

一、引 言

自 1968 年 McMillan 的经典性工作^[1]以来,不少作者提出这种或那种 T_c 公式^[2-17]. 在 $\lambda > \lambda^*$ 以及小 λ 区域,可以认为已经得到了正确的或基本正确的解答,它们分别是 T_c 级数解^[15-17]和 McMillan T_c 公式^[1]. 然而,在上述两个区域中间的区域,仍然没有恰当的 T_c 公式,而且对它的了解,严格来说,也是不够的.

研究 $T_c-\lambda$ 曲线的一般变化规律,有助于进一步解决 T_c 公式问题. 为此,作者之一及其合作者在文献 [18-20] 中探讨了这个问题. 他们分析了用数值计算方法从 Eliashberg 方程得出的 $T_c-\lambda$ 曲线,得到的结论是: (1) 继 McMillan T_c 公式适用的“McMillan 区域”后, $T_c-\lambda$ 曲线有一段变化较快的“ λ^* 区域”,其中 $n = 1.55$. (2) 当 λ 一旦超过 λ^* ,进入“级数解区域”后,曲线的变化逐渐减缓到按 $\lambda^{0.5}$ 变化.

本文是文献 [18-20] 的继续和补充. 在本文中,我们企图从 T_c 对 λ 的微分曲线得到支持上述结论的证据. 本文的分析表明,上述结论基本上是正确的,只是 n 一般不等于 1.55,而是一个大于 0.5、并依赖于一有效声子谱 $g(\omega)$ 的正实数.

二、 $(dT_c/d\lambda)-\lambda$ 曲线

选定一组 T_c 数值,用反迭代法^[21]从 Eliashberg 方程算出相应的 λ 值. 然后,用三点插值法^[22]算出 T_c 对 λ 的导数,画出 $dT_c/d\lambda$ 随 λ 变化的曲线. 典型的结果用实曲线画在图 1 中. 计算中用到的有效声子谱数据取自文献 [23] 和 [24]. 除此以外,我们还对一些双 δ 函数谱

$$g(\omega) = c\delta(\omega - r\omega_0) - (1 - c)\delta(\omega - \omega_0) \quad (1)$$

作了计算. ω_0 是最大声子频率,取为 100K. r 和 c 是谱参数,它们均是小于 1 的正实数. 在图 1 的各图中,我们或者注明了超导体名称,或者注明了参数 r 和 c 的数值. 参量 λ 的

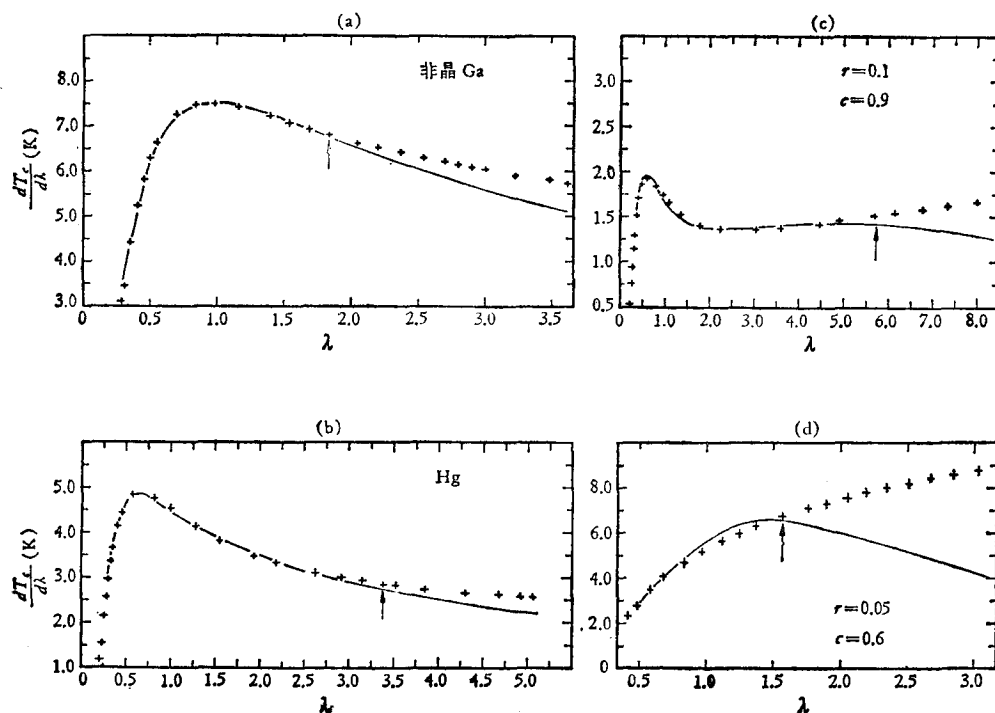


图1 ——为数值解;箭头指出 $\lambda = \Lambda$ 的位置;+按(4)式计算的值,式中的参量取自表1

意义及其计算方法见文献[25]和[26]。应特别提及,用文献[26]叙述的方法算出的 Λ 值只有一个有效数字,第二位数字和真实数值的偏差估计最大可达 ± 2 [26]。

尽管用不同的 $g(\omega)$ 算出的 T_c - λ 曲线均是相似的,没有原则上的差异,但 $(dT_c/d\lambda)$ - λ 曲线则不然了,它有三种不同的类型。

第一种类型如图1(a)和(b)所示。随着 λ 增加, $dT_c/d\lambda$ 开始增加很快,达到一个峰值后,单调地减小,这类 $(dT_c/d\lambda)$ - λ 曲线的特点是:它只有一个极大点。极大点对应的 λ 值随 $g(\omega)$ 而异,介于0.5和 Λ 之间。

另一类 $(dT_c/d\lambda)$ - λ 曲线见图1(d)。这类曲线也只有一个极大点。从图上看,这个极大点出现在紧挨着 $\lambda = \Lambda$ 地方。可是,考虑到用三点插值法算出的 $dT_c/d\lambda$ 最多只有两位有效数字,而在极大点附近, $dT_c/d\lambda$ 变化很慢,仅第三位数字有些差别,因此从图上读出的和极大点对应的 λ 值只有一位有效数字。再进而考虑到,用文献[26]所述的方法算出的 Λ 值也仅有一位有效数字,我们应认为:这类曲线的极大点正好位于 $\lambda = \Lambda$ 处。

第三类 $(dT_c/d\lambda)$ - λ 曲线见图1(c)。这类曲线有一个极小点和两个极大点。在两个极大点中,有一个出现在 λ 较小的区域,而另一个出现在紧挨着 $\lambda = \Lambda$ 地方。根据上面讲到的理由,我们应认为,后一个极大点实际上位于 $\lambda = \Lambda$ 处。

三、分 析

考虑到顾一鸣和作者之一在文献[14]中得到的结果,我们把 $\lambda < \Lambda$ 区域的 T_c 公式

取为如下形式:

$$T_c = \alpha \omega_{\log} \exp\left(-\frac{1+\lambda}{\lambda}\right), \quad (2)$$

α 一般是 λ 的函数. 文献 [14] 给出了计算 α 的方程组和计算步骤, 但没有导出 α 的解析表示式. 给定 T_c , 用反迭代法从 Eliashberg 方程算出 λ . 由此算出

$$\alpha = T_c \left[\omega_{\log} \exp\left(-\frac{1+\lambda}{\lambda}\right) \right]^{-1},$$

并画出 α 对 λ^n 的图. 我们发现, 只要适当选择 n , 可以使得在 $\lambda < \Lambda$ 区域中, α 随 λ^n 的变化是线性的(见图 2), 即

$$\alpha = \delta(1 + \gamma \lambda^n). \quad (3)$$

由直线截距和斜率可算出 δ 和 γ . 对不同有效声子谱, 参量 γ , δ 和 n 一般均是不同的. 表 1 列出了和一些超导体及双 δ 函数谱相应的 n , δ 和 γ 的数值. 我们从图 2 还可清楚地看到, 当 λ 一旦超过 Λ 后, α 的变化逐渐减缓.

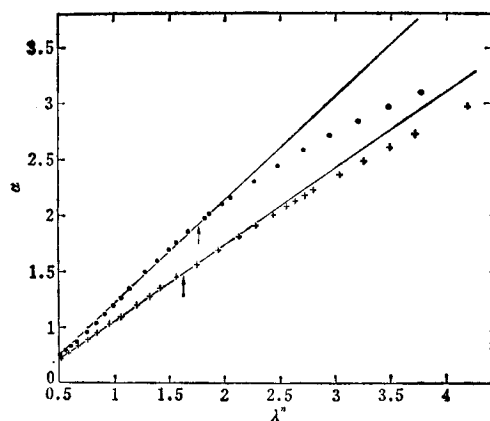


图 2 +· 为数值解; 箭头指出 $\lambda = \Lambda$ 的位置;
+ 为非晶 Ga, $n = 0.8$; • 为双 δ 函数谱
($r = 0.05$, $c = 0.6$), $n = 1.26$

表 1

	Λ	$\omega_{\log}(\text{K})$	n	γ	δ
Hg	3.4	28.6	0.88	0.536	0.580
Ga (非晶)	1.8	34.5	0.8	1.883	0.365
Bi (非晶)	1.9	18.7	0.75	1.977	0.353
Pb _{0.8} Bi _{0.2} (非晶)	1.6	21.8	0.9	0.873	0.512
双 δ 函数谱 $r = 0.1$ $c = 0.9$	5.7	12.6	1.31	0.217	0.667
双 δ 函数谱 $r = 0.05$ $c = 0.6$	1.6	16.6	1.26	3.285	0.281

应指出, 作者之一及其合作者在文献 [18] 和 [19] 中也作过类似的分析, 但是他们得到的结论是, $n = 1.55$. 这是由于他们只是对一些特殊双 δ 函数谱算出的数据进行分析所致¹⁾. 另外, 文献 [18] 采用的不是 (2) 式所示的指数函数 $\exp\left(-\frac{1+\lambda}{\lambda}\right)$, 而是 $\exp\left(-1.04 \frac{1+\lambda}{\lambda}\right)$, 这自然影响 n 的数值使之增大.

由 (2) 和 (3) 式可得

1) 见文献 [18] 的图 2 和文献 [19] 的图 1.

$$\frac{dT_c}{d\lambda} = \delta\omega_{\log} \exp\left(-\frac{1+\lambda}{\lambda^2}\right) \frac{1}{\lambda^2} + \delta\omega_{\log} \exp\left(-\frac{1+\lambda}{\lambda}\right) \frac{\gamma}{\lambda^{1-n}} \left(n + \frac{1}{\lambda}\right). \quad (4)$$

式中右端的两项分别是由 $\delta\exp\left(-\frac{1+\lambda}{\lambda}\right)$ 和 $\delta\gamma\lambda^n \exp\left(-\frac{1+\lambda}{\lambda}\right)$ 贡献的. 在图 1 中“+”是根据 (4) 式算出的.

由 McMillan T_c 公式 $\delta\omega_{\log} \exp\left(-\frac{1+\lambda}{\lambda}\right)$ 算出的 $dT_c/d\lambda$ 只能在 $\lambda < 0.5$ 区域近似地和数值解相符; 当 λ 超过 0.5 后, 由它算出的 $dT_c/d\lambda$ 下降过快, 并且 $dT_c/d\lambda$ 的极大点总是位于 $\lambda = 0.5$ 处, 这些都是和数值解不符的. 把 McMillan T_c 公式推广成 (2) 和 (3) 式, 情况便不同了. 在 $\lambda < 1$ 区域, 不仅它本身能相当好地吻合 T_c - λ 曲线, 而且由它得到的 $dT_c/d\lambda$ 也能近似地吻合 $(dT_c/d\lambda)$ - λ 曲线(见图 3 和图 1). 值得注意的是, 图 1 再次显示出在图 2 中已经看到的现象: 当 λ 超过 1 后, 由 (4) 式算出的 $dT_c/d\lambda$ 逐渐偏离数值解.

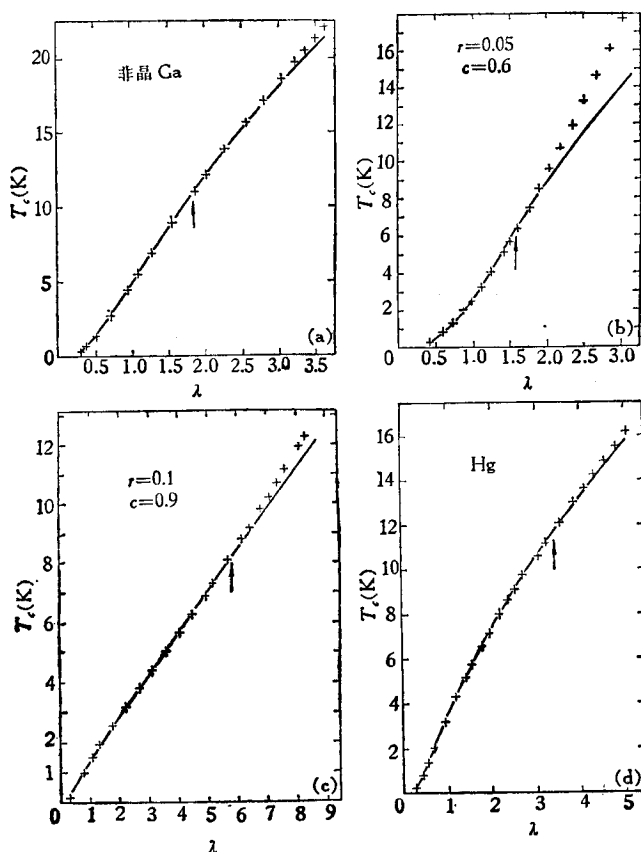


图 3 —为数值解;箭头指出 $\lambda = 1$ 的位置;+按 (2) 和 (3) 式计算的值;式中参量取自表 1

由 (4) 式得出的 $(dT_c/d\lambda)$ - λ 曲线一般具有极大点和极小点. 极值点的个数 l 就是方程 (5) 的正实根数目:

$$1 - 2\lambda + \gamma\lambda^n \{n(n-1)\lambda^2 + 2(n-1)\lambda + 1\} = 0. \quad (5)$$

注意到,在此方程中不出现参量 δ . 所以,决定 l 的参量只是 n 和 γ . 用数值计算方法确

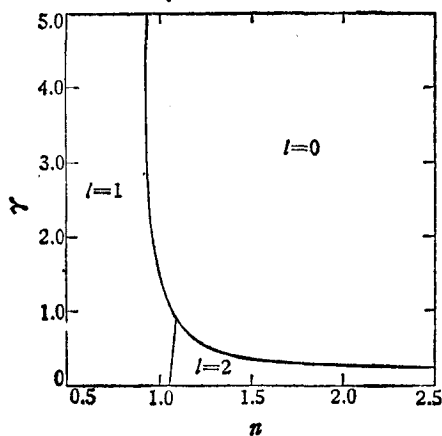


图 4

定当 $0.5 \leq n \leq 2.5$ 和 $0 < \gamma \leq 5$ 时, 方程(5)的正实根的个数. 计算表明, 存在三种情形: 1) 在 $0 < n < 1$ 时, 方程(5)只有一个正实根, 从而 $l = 1$. 2) 当 $n > 1$ 但 γ 较小时, 方程(5)有两个正实根, 即 $l = 2$. 3) 当 $n > 1$ 同时 γ 较大时, 方程(5)没有正实根; 即 $l = 0$. 在图 4 所示的 n - γ 平面中, 画出了这三种情形的大致边界, 并注明每个区域中的正实根的个数. 不难看出, 第一种情形是和第一类 $(dT_c/d\lambda)$ - λ 曲线对应的, 而另外两种情形则分别对应于第三类及第二类曲线. 由此可知, n 取值随规一有效声子谱 $g(\omega)$ 而异, 是解释图 1 所示的三类 $(dT_c/d\lambda)$ - λ 曲线所必须的. 作者之一及其合作者在

文献 [18] 和 [19] 中, 把 n 取为 1.55, 一般是不合适的. 它不能说明图 1 所示的三种不同类型的 $(dT_c/d\lambda)$ - λ 曲线.

四、结 论

1. 通过对 $(dT_c/d\lambda)$ - λ 曲线的分析, 得到了和文献 [18, 20] 基本上相同的结论, 即: 1) 继 “McMillan 区域” 后, 存在一段变化较快的 “ λ^* 区域”. 2) 当 λ 一旦超过参量 Λ , 进入级数解区域后, T_c 随 λ 的变化逐渐减缓到按 $\lambda^{0.5}$ 变化. 和文献 [18, 20] 不同的只是, n 一般不等于 1.55, 而是一个随规一有效声子谱 $g(\omega)$ 而异的实数. 我们认为, 一个成功的, 对所有 λ 都适用的 T_c 公式应能说明这些事实.

2. 把 (2) 式代入 (1) 式, 得到

$$T_c = \delta(1 + \gamma\lambda^n)\omega_{\log}\exp\left(-\frac{1+\lambda}{\lambda}\right), \quad (6)$$

式中 n , γ 和 δ 均是依赖谱形的参量 (见表 1). 这个 T_c 公式和 T_c 级数解分别适用于 $\lambda < \Lambda$ 和 $\lambda > \Lambda$ 区域, 它们一起可以较好地说明上述诸事实.

自然, 用弥合数值解方法, 把 γ , δ 和 n 分别用一个由矩和 Λ 适当组合的函数表示出来, 不是一件困难任务, 正如我们在文献 [18] 和 [19] 已经做过的那样. 不过, 本文并不打算这样做, 我们只希望弄清即使一个严格的 T_c 公式也应具有的一些性质, 从而有助于进一步解决 T_c 公式问题.

我们并不认为, 一个严格的 T_c 公式在 $\lambda < \Lambda$ 区域应采取 (6) 式所示的函数形式. 同样, 我们也不认为, 不可能从 Eliashberg 方程得到一个对所有 λ 都适用的统一的 T_c 公式. 但是, 我们认为, 一个严格的对所有 λ 都适用的 T_c 公式应具有以下性质: 在 $\lambda > \Lambda$ 区域, 它应能化为 T_c 级数解; 在 $\lambda < \Lambda$ 区域, 由这个公式算出的 T_c 和 $dT_c/d\lambda$ 均应和 (6) 式算出的相逼近.

3. 尽管不少作者作了许多努力,只是由于数学上的困难,到目前为止,从 Eliashberg 方程解析导出一个对整个 λ 区域,特别是对“ λ ”区域”适用的 T_c 公式,仍是没有解决的问题.我们希望,本文的分析对进一步解决这个问题是有益的.

参 考 文 献

- [1] W. L. McMillan, *Phys. Rev.*, **167**(1968), 331.
- [2] A. E. Каракозов, Е. Г. Максимов, С. А. Машков, *ЖЭТФ*, **68**(1975), 1937.
- [3] W. Kessel, *Zeit. Naturforsch.*, **29A**(1974), 445.
- [4] W. Klose, P. Hertel, *Zeit. für Physik*, **239**(1970), 331.
- [5] H. Nowotny, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **77**(1976), 623.
- [6] H. Nowotny, O. Hittair, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **91**(1979), 647.
- [7] R. C. Dynes, *Solid State Comm.*, **10**(1972), 615.
- [8] J. W. Garland, P. B. Allen, *Physica*, **55**(1971), 669.
- [9] P. B. Allen, R. C. Dynes, *Phys. Rev. B*, **12**(1975), 905.
- [10] S. G. Louis, M. L. Cohen, *Solid State Communication*, **22**(1977), 1.
- [11] M. Dayam, J. Bar Sagi, *J. Low Temp. Phys.*, **37**(1979), 695.
- [12] 吴杭生、茅德强、顾一鸣, *物理学报*, **30** (1981), 783.
- [13] 吴杭生、顾一鸣、茅德强, *物理学报*, **30** (1981), 1137.
- [14] 吴杭生、顾一鸣, *物理学报*, **30** (1981), 1693.
- [15] 吴杭生、蔡建华、龚昌德、吉光达、蔡俊道, *物理学报*, **26** (1977), 509.
- [16] 龚昌德、吴杭生、蔡建华、蔡俊道、吉光达, *物理学报*, **27** (1978), 85.
- [17] 蔡俊道、吉光达、吴杭生、蔡建华、蔡俊道, *物理学报*, **28** (1979), 393.
- [18] 吴杭生、周子舫、王钟炎、张锡祥, *物理学报*, **29** (1980), 409.
- [19] 王钟炎、周子舫、茅德强、张锡祥、吴杭生, *物理学报*, **29** (1980), 843.
- [20] 周子舫、顾一鸣、茅德强、吴杭生, *物理学报*, **30** (1981), 277.
- [21] P. B. Allen, Technical Report, No. 7, TCM Group, Cavendish Laboratory, unpublished.
- [22] 冯康等编, 数值计算方法, 国防工业出版社, 第一章, (1978).
- [23] J. M. Rowell, W. L. McMillan, R. C. Dynes, A Tabulation of the Electron-phonon Interaction in Superconducting Metals and Alloys, Part 1, to be published.
- [24] J. D. Leslie *et al.*, The Data of the Effective Phonon Spectra of Amorphous Ga, Bi, and Pb-Bi Alloys, unpublished.
- [25] 吴杭生、顾一鸣, *物理学报*, **30** (1981), 1132.
- [26] 周子舫、吴杭生、茅德强、顾一鸣, *物理学报*, **29** (1980), 1186.

THE DIFFERENTIAL CURVE OF T_c WITH RESPECT TO λ

LIU CHANG-WEN WU HANG-SHENG

(Department of Physics University of Science and Technology of China)

ABSTRACT

In the present paper, the conclusion we arrive through analyzing the $(dT_c/d\lambda)$ - λ curve is that the T_c - λ curve is composed of three parts with entirely different properties, namely, “McMillan region”, “ λ ” region” and “series solution region”. This conclusion is identical with that obtained in paper [20] except that the value of n is, in general, not equal to 1.55 but is a real number larger than 0.5 and varies with the shape of the effective phonon spectrum.