

超导临界温度级数公式系数的改进

李 宏 成

(中国科学院物理研究所)

1981 年 9 月 5 日收到

提 要

本文报道用 λ 较小的数值解确定出的超导临界温度级数公式的系数。在较小 λ 值范围内,它与数值解拟合较好,同时也适用于大的 λ 值。

一、引 言

吴杭生等人由 Eliashberg 方程出发导出了一个关于超导体临界温度的公式^[1](形式与原文略有不同):

$$T_c = \alpha_0 \sqrt{\lambda \langle \omega^2 \rangle} \left\{ 1 + \alpha_1 \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^2} \frac{1}{\lambda} + \left(\alpha_2 \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^3} + \alpha_3 \frac{\langle \omega^4 \rangle^2}{\langle \omega^2 \rangle^4} \right) \frac{1}{\lambda^2} + \left(\alpha_4 \frac{\langle \omega^8 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^4} + \alpha_5 \frac{\langle \omega^4 \rangle \langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle^5} + \alpha_6 \frac{\langle \omega^4 \rangle^3}{\langle \omega^2 \rangle^6} \right) \frac{1}{\lambda^3} + \cdots \right\}, \quad (1)$$

其中 $\alpha_i = \alpha_i(\mu^*)$ $i = 0, 1, 2, \dots, 6$,

$$\alpha_i(\mu^*) = \begin{cases} \alpha_{i0}(1 + a_i \mu^*)^{-1/2} & i = 0, \\ \alpha_{i0}(1 + a_i \mu^*) & i = 1, \\ \alpha_{i0}(1 + a_i \mu^*)^2 & i = 2, 3, \\ \alpha_{i0}(1 + a_i \mu^*)^3 & i = 4, 5, 6. \end{cases} \quad (2)$$

这些作者同时还定出了系数 α_{i0} 与 a_i ^[2]。我们发现,在 λ 值较小时,用方程 (1), (2) 和这些系数计算出的临界温度值与数值解偏离较大。表 1 给出了对于某些谱形计算值与数值解的比较。

产生这种偏差的原因是 (1) 式只取到了无穷级数中的 $1/\lambda^3$ 项,对于较小的 λ 值截断误差较大。其次用 (2) 式来表示 $\alpha_i(\mu^*)$ 与 μ^* 的关系近似程度较差,因而 μ^* 越大偏差越大。

为了改进 (1) 式在 λ 较小时与数值解的拟合精度,本文报道在 λ 较小时用数值解确定系数 α_{i0} 及 a_i 的结果。为了进一步改进 μ^* 大时 (1) 式的精度,我们将 $\alpha_i(\mu^*)$ 用 μ^* 的幂级数表示,即

$$\alpha_i(\mu^*) = \alpha_{i0} \left(1 + \sum_{j=1}^4 b_{ij} \mu^{*j} \right), \quad i = 0, 1, \dots, 6, \quad (3)$$

并且定出了 28 个 b_{ij} 系数。

表 1 用文献 [1] 给出的系数计算出的 y_i 与数值结果 y_0 的比较

r	a	μ^*	y_0	λ	y_i	DTC1(%)
0.3	0.5	0	0.1	1.1114	0.0923	7.72
		0.02	0.1	1.1901	0.0935	6.45
		0.04	0.1	1.2625	0.0940	5.98
		0.06	0.1	1.3293	0.0939	6.14
		0.08	0.1	1.3913	0.0932	6.78
		0.10	0.1	1.4489	0.0922	7.81
		0.12	0.1	1.5025	0.0909	9.15
		0.14	0.1	1.5526	0.0893	10.7
		0.16	0.1	1.5996	0.0875	12.5
0.1	0.7	0	0.1	1.7567	0.0725	27.5
		0.02	0.1	1.8896	0.0753	24.7
		0.04	0.1	2.0130	0.0762	23.3
		0.06	0.1	2.1280	0.0771	22.9
		0.08	0.1	2.2354	0.0768	23.2
		0.10	0.1	2.3358	0.0756	24.2
		0.12	0.1	2.4300	0.0742	25.8
		0.14	0.1	2.5186	0.0723	27.7
		0.16	0.1	2.6020	0.0700	30.0

$$y_i = T_{ci}/\sqrt{\lambda\langle\omega^2\rangle} \quad i = 0, 1, 2, 3.$$

T_{c0} ——数值解; T_{c1} ——用级数公式 (1)、(2), 采用文献 [2] 的系数求出的 T_c 值;

T_{c2} ——用级数公式 (1)、(2), 采用表 2 的系数计算出的 T_c 值;

T_{c3} ——用级数公式 (1)、(3), 采用表 3 的系数计算出的 T_c 值.

二、确定系数的方法

为了方便起见, 将 (1) 式改写如下:

$$y = \sum_{i=1}^7 B_i x_i, \quad (4)$$

其中 $y = T_c/\sqrt{\lambda\langle\omega^2\rangle}$, $x_1 = \alpha_0$, $x_i = \alpha_0\alpha_{i-1}$ $i = 2, \dots, 7$;

$$\begin{aligned}
 B_1 &= 1, \quad B_2 = \frac{\langle\omega^4\rangle}{\langle\omega^2\rangle^2} \frac{1}{\lambda}, \quad B_3 = \frac{\langle\omega^6\rangle}{\langle\omega^2\rangle^3} \frac{1}{\lambda^2}, \\
 B_4 &= \frac{\langle\omega^4\rangle^2}{\langle\omega^2\rangle^4} \frac{1}{\lambda^2}, \quad B_5 = \frac{\langle\omega^8\rangle}{\langle\omega^2\rangle^4} \frac{1}{\lambda^3}, \\
 B_6 &= \frac{\langle\omega^6\rangle\langle\omega^4\rangle}{\langle\omega^2\rangle^5} \frac{1}{\lambda^3}, \quad B_7 = \frac{\langle\omega^4\rangle^3}{\langle\omega^2\rangle^6} \frac{1}{\lambda^3}.
 \end{aligned} \quad (5)$$

选定一系列的双峰谱:

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda}{2} \omega [a \delta(\omega - \omega_1) + (1 - a) \delta(\omega - \omega_2)], \quad (6)$$

以及 μ^* 值, 给定 T_c 值, 则可由数值法^[3]定出对应的 λ 值. 假设共得到 M 组 (T_c, λ) 数值解, 将对应的 y 值及 B_i 值分别记为 y_i 与 B_{ji} $j = 1, 2, \dots, M$. 则由 (4) 式可得 M 个代数方程

$$y_i = \sum_{j=1}^7 B_{ji} x_j \quad j = 1, 2, \dots, M \geq 7. \quad (7)$$

只要解出 x_i 值即可由 (5) 式求出系数 $\alpha_i(\mu^*)$, 因而确定系数的问题就变成了解代数方程 (7) 的问题了.

为了用较多的数值解来确定系数, 我们采用最小二乘法在 $M \gg 7$ 的情况下来解 (7) 式. 为此定义偏差函数

$$G(x_1, x_2, \dots, x_7) = \sum_{j=1}^M \left(y_j - \sum_{i=1}^7 B_{ji} x_i \right)^2. \quad (8)$$

我们要找到一组 $x_1, x_2, \dots, x_7$ 使 $G(x_1, x_2, \dots, x_7)$ 取极小值. 这需要使 $G(x_1, x_2, \dots, x_7)$ 对 x_i 的各个偏导数等于零,

$$\frac{\partial G}{\partial x_k} = -2 \sum_{j=1}^M \left(y_j - \sum_{i=1}^7 B_{ji} x_i \right) B_{jk} = 0,$$

即

$$\sum_{j=1}^7 \left\{ \sum_{i=1}^M B_{ik} B_{ji} \right\} x_i = \sum_{i=1}^M B_{ik} y_i. \quad (9)$$

引入矩阵 $\hat{F} = \{F_{ki}\}$, 向量 $x = \{x_i\}$ 与 $E = \{E_k\}$:

$$F_{ki} = \sum_{j=1}^M B_{jk} B_{ji}, \quad E_k = \sum_{j=1}^M B_{jk} y_j, \quad (10)$$

则 (9) 式可简写为

$$\hat{F}X = E. \quad (11)$$

在 M 个数值解 (T_c, λ) 已求出的情况下, $\hat{F}$ 与 E 可求出. 因此按常规的解线性方程组的方法可求得 $X = \{x_i\}$. 由此立即可得到 α_i .

为了确定 $\alpha_i(\mu^*)$ 与 μ^* 间的函数形式, 我们采用两种方法. 第一种, $\alpha_i(\mu^*)$ 的关系采用 (2) 式. 稍加变化, 即可得到 μ^* 的线性函数

$$(1 + a_i \mu^*) = \begin{cases} (\alpha_i/\alpha_{i0})^{-2} & i = 0, \\ \alpha_i/\alpha_{i0} & i = 1, \\ (\alpha_i/\alpha_{i0})^{1/2} & i = 2, 3, \\ (\alpha_i/\alpha_{i0})^{1/3} & i = 4, 5, 6. \end{cases} \quad (12)$$

对于一系列不同的 μ^* 值, 由 (11) 式求出数组 $\alpha_i(\mu^*)$. 再由 (12) 式, 仍采用最小二乘法来确定系数 a_i . 为了减小 μ^* 较小时的偏差, 我们采取使相对偏差取极小的方法来确定系数 a_i .

第二种, $\alpha_i(\mu^*)$ 采用 (3) 式的级数形式. 仍然采取使相对偏差取极小的方法来确定

系数 b_{ji} .

所有这些计算过程都在一个程序内完成.

三、结果及检验

我们采用 9 个 μ^* 值 (0, 0.02, ..., 0.16), 四种谱形, 每种谱形取 4 个 T_c 值, 共 144 个数值解来确定 7 个 α_{i0} , 7 个 a_i 与 28 个 b_{ji} 系数. 求数值解时采用 64×64 行列式. μ^* 与切断频率 ω_c 有关, $\omega_c = (2n + 1)\pi T_c$. 为了与文献 [2] 一致, 我们固定 $n = 50$. 我们求得的各个系数如表 2, 表 3 所示.

表 2 用最小二乘法确定的 T_c 级数公式的系数 d_{i0} 与 a_i

i 种类	1	2	3	4	5	6	7
α_{i0}	0.18244	-0.33364	0.35970	-0.42557	-0.37575	0.8697	-0.4636
a_i	2.3652	2.4786	2.5794	2.8489	3.4979	3.6881	3.8980

表 3 用最小二乘法确定的 T_c 级数公式中的系数 b_{ji} .

b_{ji} $i \backslash j$	1	2	3	4	5	6	7
1	-1.5558	3.2747	6.8308	7.3594	12.673	13.225	13.831
2	7.1852	-8.5136	-6.5665	-4.2026	32.129	37.700	44.099
3	-25.024	18.941	-8.3293	-16.549	-77.990	80.805	82.312
4	42.56	-24.225	29.262	39.931	70.145	61.551	48.640

我们用另外 288 个数值解来检查用这些系数及公式 (1), (2), (3) 计算出的 T_c 的准确性. 其中的一部分结果列于表 4.

为了给出这些比较结果的整体概念, 引入平方偏差和 S_i :

$$S_i = \sum_{k=1}^{144} (1 - (y_k)_i / (y_k)_0)^2 \quad i = 1, 2, 3, \quad (13)$$

其中 $(y_k)_0$ 是第 k 个数值解. $(y_k)_1$ 是用文献 [2] 及 (1), (2) 式求得的 y 值, $(y_k)_2$ 是用表 2 的系数及 (1), (2) 式求得的 y 值, $(y_k)_3$ 是用表 3 的系数及 (1), (3) 式求得的 y 值.

表 4 中的数值分成三部分. 第一部分是用来确定各个系数的谱形及 λ 值. 此部分数据的平方偏差分别为

$$S_1 = 0.1181, \quad S_2 = 0.01907, \quad S_3 = 0.0001145.$$

它们说明确定系数所使用的方法是正确的. 这些系数可以相当准确地给出 T_c 值. 第二部分数据的谱形与第一部分相同, 但 λ 较大. 相应的平方偏差和为

$$S_1 = 0.0094, \quad S_2 = 0.0067, \quad S_3 = 0.00015.$$

它说明在小 λ 值下确定的系数在高 λ 值范围内精度仍很高. 第三部分数据的谱形与第二

表 4

γ	a	μ^*	λ	y_0	y_2	y_3	$DTC2(\%)$	$DTC3(\%)$
0.5	0.5	0	0.9728	0.1000	0.099946	0.099945	0.0537	0.0551
			2.0138	0.2000	0.199925	0.199921	0.0376	0.0393
			3.5670	0.3000	0.300129	0.300124	-0.0429	-0.0412
			5.6883	0.4000	0.40004	0.400033	-0.0099	-0.0083
		0.10	1.2616	0.1000	0.10099	0.09995	-0.990	0.0456
			2.5483	0.2000	0.20126	0.19989	-0.632	0.0565
			4.4781	0.3000	0.30184	0.30016	-0.613	-0.0534
			7.1173	0.4000	0.40206	0.40005	-0.516	-0.0118
		0.16	1.3896	0.1000	0.09736	0.09996	2.64	0.0423
			2.7771	0.2000	0.19653	0.19986	1.74	0.0690
			4.8638	0.3000	0.29615	0.30016	1.28	-0.0544
			7.7194	0.4000	0.39524	0.40004	1.19	-0.0088
0.3	0.5	0	8.6230	0.5000	0.49990	0.49989	0.0210	0.0226
			11.9263	0.6000	0.59972	0.59971	0.0417	0.0488
			15.8253	0.7000	0.69953	0.69951	0.0677	0.0694
			20.3214	0.8000	0.79933	0.79932	0.0835	0.0852
		0.10	10.7795	0.5000	0.50232	0.49987	-0.464	0.0264
			14.8912	0.6000	0.60242	0.59960	-0.403	0.0668
			19.7448	0.7000	0.70251	0.69931	-0.359	0.0991
			25.3421	0.8000	0.80261	0.79901	-0.326	0.124
		0.16	11.6871	0.5000	0.49402	0.49984	1.20	0.0324
			16.1369	0.6000	0.59283	0.59952	1.19	0.0795
			21.3899	0.7000	0.69158	0.69918	1.20	0.117
			27.4479	0.8000	0.79030	0.79883	1.21	0.146
0.1	0.7	0	1.7567	0.1000	0.09701	0.09701	2.99	2.99
			3.0533	0.2000	0.19976	0.19976	0.121	0.122
			4.7055	0.3000	0.30000	0.29999	0.00011	0.00028
			6.8716	0.4000	0.39997	0.39996	0.00074	0.00091
		0.10	2.3358	0.1000	0.09683	0.09536	3.17	4.64
			3.9247	0.2000	0.20166	0.19972	-0.829	0.140
			5.9633	0.3000	0.30212	0.29994	-0.707	0.0201
			8.6498	0.4000	0.40241	0.39997	-0.603	0.00068
		0.16	2.6020	0.1000	0.09085	0.09475	9.15	5.25
			4.3062	0.2000	0.19488	0.19968	2.56	0.158
			6.5029	0.3000	0.29460	0.29990	1.80	0.0335
			9.4054	0.4000	0.39410	0.39996	1.47	0.0094

注: $DTC2 = 1 - y_2/y_0$, $DTC3 = 1 - y_3/y_0$.

部分不同,相应的平方偏差为

$$S_1 = 0.6243, \quad S_2 = 0.06577, \quad S_3 = 0.05038.$$

这些结果表明,在所比较的范围内,对于较小的 λ 值,新定出的系数比文献[2]的系数给出的 T_c 偏离小一个量级到两个量级. 对于大的 λ 值,文献[2]的系数精度也足够

高。用幂级数表示 $\alpha_i(\mu^*)$ 时,精度可显著提高。

吴杭生同志提出此工作并和作者作过多次有益的讨论,周子舫同志参加了一部分程序的编写工作,仅向他们表示深切的谢意。

参 考 文 献

- [1] 吴杭生、蔡建华、龚昌德、吉光达、蔡俊道,物理学报, **26**(1977), 509.
- [2] 蔡俊道、吉光达、吴杭生、蔡建华、龚昌德,物理学报, **28**(1979), 393.
- [3] P. B. Allen and R. C. Dynes, *Phys. Rev. B*, **12** (1975), 905.

MODIFICATION OF THE COEFFICIENTS OF THE SERIES FORMULA FOR THE SUPERCONDUCTING CRITICAL TEMPERATURE

LI HONG-CHENG

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

The coefficients of the series formula for the superconducting critical temperature have been determined by using the numerical solutions in which the value of λ is low. The new coefficients can be used not only in the case of small λ , but also in large λ cases.