

# 各向异性的费密系统超导转变温度 及热力学性质

衣学喜 王锡绂 王志兴

东北师范大学物理系, 长春 130024

1993年1月18日收到

把超导体作为各向异性的费密系统, 考虑到电子拓扑跃变情况下, 利用三能带交迭模型计算出超导转变温度  $T_c$  和化学势  $\mu$  的关系, 以及其它的热力学量. 计算结果同实验进行了比较.

**PACC:** 7420; 7430E; 7125

## 一、引言

高温超导性在金属氧化陶瓷  $L-M-Cu-O$ ,  $Y-M-Cu-O$  (这里  $M$  为二价金属, 如  $Ba, Ca, Sr$ ) 中的发现, 激发了人们对超导体超导机制、磁性、热力学性质, 特别是氧含量对  $T_c$  的影响的研究. 除了普通的电子-声子耦合 (BCS 理论) 机制外, 又提出了高温超导的激子机制<sup>[1]</sup>、空穴机制<sup>[2]</sup>、磁机制<sup>[3]</sup>等等.

对超导体  $L-M-Cu-O$ ,  $Y-M-Cu-O$  能谱的研究表明:  $Cu$  的  $3d-(x^2 - y^2)$  和  $O$  的  $2p-(x, y)$  能级在费密面附近有交迭. 这就使能带间的电子通过相互作用也结成库伯对. 即可能比 BCS 理论有更多的库伯对. 能谱的研究还发现: 在金属氧化陶瓷  $La_{1-x}Sr_{0.2}CuO_4$  中有两个能隙, 对应比值  $2\Delta/k_B T_c$  分别为: 3.3, 8.0. 实验上还发现:  $d \ln T_c / d \ln V$  ( $V$  为体积) 是个负值, 且绝对值很大, 上临界磁场在  $T_c$  附近有正的曲率等等. 这都和能带交迭理论的预言相一致.

文献[4,5]中, 基于能带交迭超导模型的哈密顿量

$$H = \sum_{n, k, \sigma} \epsilon_n(k) a_{n, k, \sigma}^+ a_{n, k, \sigma} - \sum_{n, m, k, k'} V_{m, n}(k, k') a_{n, k, \sigma}^+ a_{n, -k, \sigma}^+ a_{m, -k', \sigma} a_{m, k', \sigma},$$

式中  $\epsilon_n$  为第  $n$  个能带的电子能量,  $V_{m, n}$  为  $n, m$  能带电子有效相互作用矩阵元,  $a_{n, k, \sigma}^+$ ,  $a_{n, k, \sigma}$  分别为电子位于  $|n, k, \sigma\rangle$  态的产生和湮没算符. 利用二能带交迭模型计算了  $T_c$ ,  $H_c$ ,  $c - c_n$ ,  $d \ln T_c / d \ln V$  等等, 得到与 BCS 理论不同的结果<sup>[4]</sup>, 见表 1.

从表 1 容易看出: 能带交迭理论在特殊条件下 ( $N_1 = 0$  或  $N_2 = 0$ ) 能回到 BCS 理论. 在 BCS 理论中要求  $H$  表达式中  $V_{m, n} > 0$ , 而能带交迭理论中并无此限制. 文献[6]中指出: 超导体  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  在费密面附近能带的数量随  $x$  的变化而变化,  $x = 1$  时有两个能带, 当  $x = 0$  时有三个能带. 而  $YBa_2Cu_3O_6$  并不具有超导性<sup>[7]</sup>. 超导体中  $T_c$  随杂质含

二能带交迭理论	BCS 理论
<p>(a)</p> $\hbar_B T = \frac{2\gamma_E}{\pi} \hbar\omega_D \exp(\xi_{\pm})$ <p><math>\gamma_E = e^c</math>, <math>c = 0.577</math> 为欧拉常数</p> $\xi_{\pm} = \frac{1}{2N_1 N_2 (V_{11} V_{22} - V_{12}^2)} [N_1 V_{11} + N_2 V_{22} \pm \sqrt{(N_1 V_{11} - N_2 V_{22})^2 + 4N_1 N_2 V_{12}^2}]$	<p><math>\hbar_B T = 1.13 \hbar\omega_D</math></p> <p><math>\omega_D</math> 为 Debye 频率</p>
<p>(b)</p> $\frac{c - c_n}{c_n} = \frac{(N_1 + \frac{N_2}{Z_c^2})^2 \times 1.43}{(N_1 + N_2)(N_1 + \frac{N_2}{Z_c^2})}$ $Z_c = \left[ \frac{\Delta_1}{\Delta_2} \right] T_c$	<p><math>\frac{c - c_n}{c_n} = 1.43</math></p>
<p>(c)</p> $\Delta_1(0) = 2\hbar\omega_D(Z_c) \frac{N_2}{N_1 + N_2 Z_c^2} \exp(-\xi_c)$ $\Delta_2(0) = 2\hbar\omega_D(Z_c) \frac{N_1 Z_c^2}{N_2 + N_1 Z_c^2} \exp(-\xi_c)$	<p><math>\Delta(0) = 2\hbar\omega_D \exp(-\xi_c)</math></p>

量的增加而下降(电子在杂质原子上散射)。另一方面,杂质影响到费密面的位置,改变费密面的拓扑性质(Von Hove-Lifshitz 跃变)<sup>[9]</sup>,从而可能提高电子的态密度,影响  $T_c$  及其它热力学量<sup>[9]</sup>。文献[10]中从实验上给出了  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  的超导转变温度随  $x$  的变化曲线,文献[4]中基于:

$$\varepsilon_1(\mathbf{p}) = \varepsilon_{k1} + \frac{p_x^2}{2m_1},$$

$$\varepsilon_2(\mathbf{p}) = \varepsilon_{k2} + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_2}$$

的色散关系,计算了  $T_c$  对  $\mu$  的依赖关系,但许多文献<sup>[7,11,12]</sup>指出:超导体中的  $\text{CuO}$  面对超导电性起关键作用,考虑到 Von Hove-Lifshitz 跃变,可以把超导体当作具有各向异性<sup>[13]</sup>的费密系统用三能带交迭模型来处理。

本文利用三能带交迭模型,处理各向异性的费密系统中的超导问题,主要考虑能带间的相互作用对形成超导的贡献,求出  $T_c$  和  $\mu$  满足的方程,利用数值解法得到  $T_c$  和  $\mu$  的曲线,并同实验结果进行了比较,还计算了其它的热力学量。研究表明:三能带交迭模型中,如两个能带的色散关系取为一维运动,第三个能带取为二维运动,得到的结果同实验符合得比较好。

## 二、模型的哈密顿量和态密度

取三能带交迭理论的哈密顿量为

$$H = \sum_{n k \alpha} \varepsilon_n(k) a_{nk\alpha}^+ a_{nk\alpha} - \sum_{n m k k'} V_{mn}(kk') a_{nk}^+ a_{n-k}^+ a_{m-k'} + a_{mk'} + \text{c.c.},$$

$$n, m = 1, 2, 3, \quad (1)$$

式中各量的意义与引言中同。色散关系为

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{k_n} - \frac{P_n^2}{2m} \quad (2)$$

时, 态密度为<sup>[4]</sup>

$$N_n = \frac{m_n P_{F_n}}{2\pi^2} \alpha_n, \quad \alpha_n = \frac{2(\iint dp_x dp_y)_n}{4\pi p_{F_n}^2}, \quad (3)$$

$m_n, P_{F_n}$  分别为第  $n$  个能带电子的有效质量和费密动量。文献[11]中计算了

$$\varepsilon_n(k) = \varepsilon_{n1} - W_n \cos k_x a - W'_n \cos k_y b \quad (4)$$

型色散关系的态密度为

$$N_n(\varepsilon) = \frac{W'_n}{\pi^2 ab W_n} \left\{ \frac{\theta[(\varepsilon_n - \varepsilon_{1n})^2 - (W_n - W'_n)^2]}{\sqrt{W_n W'_n}} K(k_{1n}) \right. \\ \left. + 2 \frac{\theta[(W_n - W'_n)^2 - (\varepsilon_n - \varepsilon_{1n})^2]}{\sqrt{(W_n + W'_n)^2 - (\varepsilon_n - \varepsilon_{1n})^2}} K(k_{2n}) \right\} \quad (5)$$

式中  $n$  为能带指标,  $(W_n + W'_n)$  为第  $n$  个能带的半宽度,  $a, b$  为晶格常数,  $\theta[\dots]$  为阶跃函数,  $K(k)$  为椭圆积分, 而宗量分别为

$$k_{1n}^2 = \frac{(W_n + W'_n)^2 - (\varepsilon_n - \varepsilon_{1n})^2}{4W_n W'_n}, \quad k_{2n}^2 = \frac{4W_n W'_n}{(W_n + W'_n)^2 - (\varepsilon_n - \varepsilon_{1n})^2}. \quad (6)$$

### 三、 $T_c$ 的确定

对  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  来说,  $x = 0$  时有三个能带, 超导载流子为空穴。下面分两种色散关系来研究。

#### 1. 取各向异性色散关系(其中 $m > 0$ )

$$\varepsilon_1 = -\varepsilon_{k1} - \frac{P_x^2}{2m},$$

$$\varepsilon_2 = -\varepsilon_{k2} - \frac{P_y^2}{2m}, \quad (7)$$

$$\varepsilon_3 = -\varepsilon_{k3} - W \cos k_x a - W' \cos k_y b.$$

现在计算  $T_c$  对  $\mu$  的依赖关系

当  $T$  趋于  $T_c$   $V_{nn} \ll V_{nm}$  时参量的方程组为<sup>[4]</sup>

$$\Delta_1 = \sum_k V_{12} \frac{\tanh h \left[ \frac{\beta(\varepsilon_2 - \mu)}{2} \right]}{\varepsilon_2 - \mu} \Delta_2 + \sum_k V_{13} \frac{\tanh h \left[ \frac{\beta(\varepsilon_3 - \mu)}{2} \right]}{\varepsilon_3 - \mu} \Delta_3,$$

$$\begin{aligned}\Delta_2 &= \sum_k V_{21} \frac{\tanh\left[\frac{\beta(\varepsilon_1 - \mu)}{2}\right]}{\varepsilon_1 - \mu} \Delta_1 + \sum_k V_{23} \frac{\tanh\left[\frac{\beta(\varepsilon_3 - \mu)}{2}\right]}{\varepsilon_3 - \mu} \Delta_3, \\ \Delta_3 &= \sum_k V_{31} \frac{\tanh\left[\frac{\beta(\varepsilon_1 - \mu)}{2}\right]}{\varepsilon_1 - \mu} \Delta_1 + \sum_k V_{32} \frac{\tanh\left[\frac{\beta(\varepsilon_2 - \mu)}{2}\right]}{\varepsilon_2 - \mu} \Delta_2,\end{aligned}\quad (8)$$

作变换

$$\frac{1}{V} \sum_k \Rightarrow \int N d\varepsilon,$$

式中  $N$  为态密度,  $N_1, N_2$  由(3)式给出, 而  $N_3$  由(5), (6)式给出如下:

$$\begin{aligned}N_n &= \frac{m_n P_{F_n}}{2\pi^2} \alpha_n, \quad \alpha_n = \frac{2(\iint d\rho_x d\rho_y)_n}{4\pi P_{F_n}}, \quad n = 1, 2, \\ N_3 &= \frac{W'}{\pi^2 ab W} \left\{ \frac{\theta[(\varepsilon_3 + \varepsilon_{k_3})^2 - (W - W')^2]}{\sqrt{W W'}} K(k_1) \right. \\ &\quad \left. + 2 \frac{\theta[(W - W')^2 - (\varepsilon_3 + \varepsilon_{k_3})^2]}{\sqrt{(W + W')^2 - (\varepsilon_3 + \varepsilon_{k_3})^2}} K(k_2) \right\},\end{aligned}$$

式中

$$k_1^2 = \frac{(W + W')^2 - (\varepsilon_3 + \varepsilon_{k_3})^2}{4W W'}, \quad k_2^2 = \frac{1}{k_1^2}.$$

现在把  $N_3$  中的椭圆函数对宗量展开:

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \phi}} = \frac{\pi}{2} \sum_{r=0}^{\infty} \left[ \left( \frac{1}{2} \right)_r \right]^2 \frac{k^{2r}}{(r!)^2}, \quad r = 0, 1, 2, \dots \quad (9)$$

如取

$$(\varepsilon_3 + \varepsilon_{k_3})^2 > (W - W')^2, \quad W > W',$$

则序参量方程组(8)变成

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= A_2 V_{12} I_2(\beta \varepsilon'_{k_2}) \Delta_2 + \Delta_3 V_{13} \frac{\sqrt{W'}}{4\pi ab W \sqrt{W}} \ln \frac{W - W' - \varepsilon_{k_3} - \mu}{-W + W' - \varepsilon_{k_3} - \mu} \\ &\quad + \Delta_3 V_{13} \frac{(W + W')^2}{16\pi ab W^2 \sqrt{W W'}} \ln \frac{W - W' - \varepsilon_{k_3} - \mu}{-W + W' - \varepsilon_{k_3} - \mu} \\ &\quad - \Delta_3 \int V_{13} \frac{\tanh\left[\frac{\beta(\varepsilon_3 - \mu)}{2}\right]}{\varepsilon_3 - \mu} \frac{(\varepsilon_3 + \varepsilon_{k_3})^2}{16\pi ab W^2 \sqrt{W W'}} d\varepsilon_3, \\ \Delta_2 &= A_1 V_{21} I_1(\beta \varepsilon'_{k_1}) \Delta_1 + \Delta_3 V_{23} \frac{\sqrt{W'}}{4\pi ab W \sqrt{W}} \ln \frac{W - W' - \varepsilon_{k_3} - \mu}{-W + W' - \varepsilon_{k_3} - \mu} \\ &\quad + \Delta_3 V_{13} \frac{(W + W')^2}{16\pi ab W^2 \sqrt{W W'}} \ln \frac{W - W' - \varepsilon_{k_3} - \mu}{-W + W' - \varepsilon_{k_3} - \mu} \\ &\quad - \Delta_3 \int V_{23} \frac{\tanh\left[\frac{\beta(\varepsilon_3 - \mu)}{2}\right]}{\varepsilon_3 - \mu} \frac{(\varepsilon_3 + \varepsilon_{k_3})^2}{16\pi ab W^2 \sqrt{W W'}} d\varepsilon_3,\end{aligned}\quad (10)$$

$$\Delta_1 = A_1 I_1 (\beta \varepsilon'_{k1}) V_{13} \Delta_1 + V_{12} A_2 I_2 (\beta \varepsilon'_{k2}) \Delta_2,$$

式中

$$I_n = \int_0^{W_n} \frac{d\varepsilon}{(-\varepsilon + \varepsilon'_{kn})^{\frac{1}{2}}} \theta(-\varepsilon + \varepsilon'_{kn}) \frac{\tanh\left(\frac{\beta \varepsilon}{2}\right)}{\varepsilon},$$

$$\varepsilon'_{kn} = \mu + \varepsilon_{kn},$$

$$A_n = N_n \varepsilon^{\frac{1}{2}},$$

$$N_n = \frac{m_n P_{Fn}}{2\pi^2} \alpha_n, \quad \alpha_n = \frac{2(\iint dp_x dp_y)_n}{4\pi p_{Fn}^2}.$$

如取

$$W - W' \Rightarrow 0^+,$$

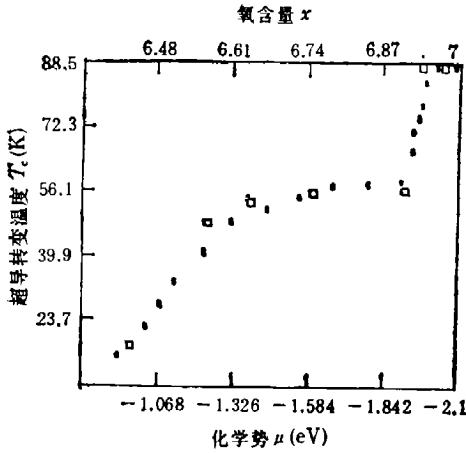
上面序参量的线性齐次方程组有解的条件是系数行列式等于零,即

$$\begin{aligned} & 1 + V_{21} V_{23} A_1 A_2 I_1 I_2 V_{13} B_1 \\ & + A_2 V_{12} I_2 A_1 I_1 V_{31} V_{23} B_1 + A_1 I_1 V_{31} B_1 \\ & + V_{32} A_2 I_2 V_{23} B_1 - A_1 A_2 I_1 I_2 V_{12} V_{21} = 0, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \text{式中 } B_1 = & \int \frac{\tanh\left[\frac{\beta(\varepsilon_1 - \mu)}{2}\right]}{\varepsilon_1 - \mu} \frac{(\varepsilon_1 + \varepsilon_{k1})^2}{16\pi ab} \\ & \times \frac{d\varepsilon_1}{W^2 \sqrt{W W'}}. \end{aligned} \quad (12)$$

数值法解此方程,参数(对 Y-Ba-Cu-O)选取:  $A_1 = 0.018 \times (5 \times 10^7)$ ,  $A_2 = 2 \times A_1$ ,  $W = 1.2556 \text{eV}$ ,  $W' = 2.5 - W$ ,  $V_{13} = -0.01 \text{eV}$ ,  $V_{23} = 0.012 \text{eV}$ ,  $V_{12} = V_{23}$ ,  $a = 3.872 \text{\AA}$ ,  $b = 3.874 \text{\AA}$ ,  $\varepsilon_{11} = 0 \text{eV}$ ,  $\varepsilon_{12} = -1.0 \text{eV}$ ,  $\varepsilon_{11} = -2.2 \text{eV}$ , 求出  $T_c - \mu$  的关系曲线如图 1, 从图 1 中看出, 理论曲线和实验曲线符合得比较好, 并且  $x = (6.61, 6.90)$  时  $T_c$  无明显改变, 即  $T_c$  对  $x$  不敏感的平台区域<sup>[13]</sup>, 当  $x$  为 7 时  $T_c$  达到最大, 这同实验是相符的。

图 1 色散关系为(7)式时超导转变温度  $T_c$  对化学势  $\mu$  的依赖关系 ■ 为理论计算值; □ 为实验测定值



## 2. 色散关系为 $\varepsilon_n(k) = -\varepsilon_{1n} - W_n \cos k_x a - W'_n \cos k_y b (n = 1, 2, 3)$ 的情况

在方程组(8)中把对  $k$  的求和变成对  $\varepsilon$  的积分, 如  $W_n > W'_n$  且取

$$\begin{aligned} W'_3 - W_1 + \varepsilon_{11} < \varepsilon_1 < \varepsilon_{11} + W_1 - W'_3, \\ W'_1 - W_1 + \varepsilon_{11} < \varepsilon_1 < \varepsilon_{11} + W_1 - W'_1, \\ W'_2 - W_2 + \varepsilon_{12} < \varepsilon_2 < \varepsilon_{12} + W_2 - W'_2, \end{aligned}$$

则序参量方程简化成如下形式:

$$\Delta_1 = V_{13} \frac{W'_3 \Delta_1}{\pi^2 ab W_1 \sqrt{W_1 W'_3}} \int \frac{\tanh\left(\frac{\beta(\varepsilon_1 - \mu)}{2}\right)}{\varepsilon_1 - \mu} K(k_{11}) d\varepsilon_1,$$

$$\begin{aligned}
& + V_{21} \frac{W_2' \Delta_2}{\pi^2 a b W_2 \sqrt{W_2 W_2'}} \int \frac{\tanh \frac{\beta(\varepsilon_2 - \mu)}{2}}{\varepsilon_2 - \mu} K(k_{12}) d\varepsilon_2, \\
\Delta_2 = & V_{21} \frac{W_1' \Delta_1}{\pi^2 a b W_1 \sqrt{W_1 W_1'}} \int \frac{\tanh \frac{\beta(\varepsilon_1 - \mu)}{2}}{\varepsilon_1 - \mu} K(k_{11}) d\varepsilon_1 \\
& + V_{23} \frac{W_3' \Delta_3}{\pi^2 a b W_3 \sqrt{W_3 W_3'}} \int \frac{\tanh \frac{\beta(\varepsilon_3 - \mu)}{2}}{\varepsilon_3 - \mu} K(k_{13}) d\varepsilon_3, \\
\Delta_3 = & V_{31} \frac{W_1' \Delta_1}{\pi^2 a b W_1 \sqrt{W_1 W_1'}} \int \frac{\tanh \frac{\beta(\varepsilon_1 - \mu)}{2}}{\varepsilon_1 - \mu} K(k_{11}) d\varepsilon_1 \\
& + V_{32} \frac{W_2' \Delta_2}{\pi^2 a b W_2 \sqrt{W_2 W_2'}} \int \frac{\tanh \frac{\beta(\varepsilon_2 - \mu)}{2}}{\varepsilon_2 - \mu} K(k_{12}) d\varepsilon_2. \quad (13)
\end{aligned}$$

这是关于  $\Delta_n$  的线性齐次方程组, 有解的条件是系数行列式等于零, 即

$$\begin{aligned}
1 - & \frac{W_2' W_3' V_{23} V_{32} Y_2 Y_3}{\pi^4 a^2 b^2 W_2 W_3 \sqrt{W_2 W_2' W_3 W_3'}} \\
- & \frac{V_{12} V_{21} W_1' W_2 Y_1 Y_2}{\pi^4 a^2 b^2 W_2 W_1 \sqrt{W_1' W_2 W_1 W_2'}} \\
- & \frac{V_{13} V_{31} W_1' W_3 Y_1 Y_3}{\pi^4 a^2 b^2 W_3 W_1 \sqrt{W_1' W_3 W_1 W_3'}} \\
- 2 & \frac{V_{12} V_{23} V_{31} W_1' W_2' W_3' Y_1 Y_2 Y_3}{\pi^6 a^3 b^2 W_1 W_2 W_3 \sqrt{W_1 W_1' W_2 W_2' W_3 W_3'}} \\
= & 0, \quad (14)
\end{aligned}$$

式中

$$\begin{aligned}
Y_1 = & \int K(k_{11}) \frac{\tanh \left( \frac{\beta(\varepsilon_1 - \mu)}{2} \right)}{\varepsilon_1 - \mu} d\varepsilon_1, \\
Y_2 = & \int K(k_{12}) \frac{\tanh \left( \frac{\beta(\varepsilon_2 - \mu)}{2} \right)}{\varepsilon_2 - \mu} d\varepsilon_2, \quad (15) \\
Y_3 = & \int K(k_{13}) \frac{\tanh \left( \frac{\beta(\varepsilon_3 - \mu)}{2} \right)}{\varepsilon_3 - \mu} d\varepsilon_3.
\end{aligned}$$

参数选取:  $W_1 = 1.3\text{eV}$ ,  $W_2 = 0.78\text{eV}$ ,  $W_3 = 0.35\text{eV}$ ,  $W_1' = (2.5 - W_1)\text{eV}$ ,  $W_2' = (1.55 - W_2)\text{eV}$ ,  $W_3' = (0.60 - W_3)\text{eV}$ ,  $V_{13} = -0.1\text{eV}$ ,  $V_{23} = 0.12\text{eV}$ ,  $V_{12} = V_{23}$ ,  $a$

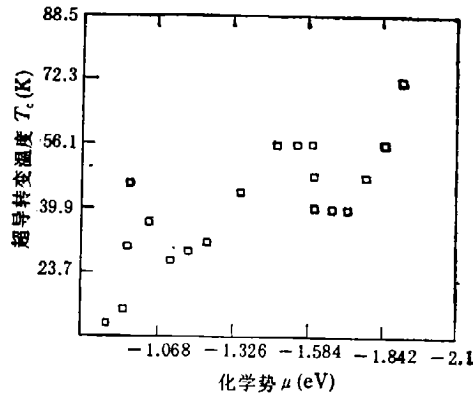


图2 色散关系为  $\varepsilon_n(k) = -\varepsilon_n - W_n \cos k_x a - W_n' \cos k_y b$  时超导转变温度  $T_c$  对化学势  $\mu$  的依赖关系

$= b = 3.874 \text{ \AA}$ ,  $\varepsilon_{11} = 0\text{eV}$ ,  $\varepsilon_{12} = 1.0\text{eV}$ ,  $\varepsilon_{13} = 2.1\text{eV}$ . 解方程(3)得到  $T_e - \mu$  关系曲线(图2).

#### 四、 $T$ 趋于 $T_c$ 情况下,各热力学量的计算

取色散关系(7)式,利用文献[4]中方程组:

$$\Delta_n = \sum_m \int_{-\hbar\omega_n}^{\hbar\omega_n} d\varepsilon_m \frac{N_m V_{nm}}{\beta} \sum_{\omega} \frac{\Delta_m}{\omega^2 + \varepsilon_m^2 + \Delta_m^2}, \quad (16)$$

$N_m$  为态密度,它们由(3),(5),(6)式给出,取

$$(W - W')^2 < (\varepsilon_3 + \varepsilon_{k3})^2, \quad W > W',$$

且能带间的相互作用为主要的,即

$$V_{nn} \ll V_{nm}.$$

利用文献[4]中的结果

$$\int_{-\hbar\omega_1}^{\hbar\omega_1} d\varepsilon_1 \frac{N_1 V_{12}}{\beta} \sum_{\omega} \frac{\Delta_2}{\omega^2 + \varepsilon_1^2 + \Delta_2^2} = V_{12} N_2 \Delta_2 \left[ \ln \frac{2\hbar\omega_2}{\Delta_2} + 2 \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l K_0(\beta l \Delta_2) \right],$$

代入(16)式中得序参量方程组:

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \frac{\Delta_1 V_{13}}{16\pi^2 W^2 ab \sqrt{W W'}} \left[ \Delta_3 \ln \frac{2\beta\gamma_E \hbar \omega_D}{\pi} - \frac{7\zeta(3)}{24\pi^2} \beta^2 \Delta_3^3(T) \right. \\ &\quad \left. + \frac{93\zeta(5)}{5 \times 128\pi^4} \beta^4 \Delta_3^5(T) \right] + \frac{\sqrt{W'}}{2abW\sqrt{W}} \left[ \left( 1 + \frac{(W+W')^2}{8WW'} \right) \right] \\ &\quad \times \frac{V_{13}}{\pi} \Delta_3 f(\Delta_3) - \frac{V_{13} \varepsilon_{k3}^2}{16W^2 \pi^2 ab \sqrt{W W'}} \Delta_3 f(\Delta_3) \\ &\quad - \frac{\hbar^2 \omega_D \Delta_3 V_{13} W}{4W^2 \beta \pi ab \sqrt{W W'}} + V_{12} N_2 \Delta_2 [f(\Delta_2)], \\ \Delta_2 &= \frac{\Delta_2 V_{23}}{16\pi^2 W^2 ab \sqrt{W W'}} \left[ \Delta_3 \ln \frac{2\beta\gamma_E \hbar \omega_D}{\pi} - \frac{7\zeta(3)}{24\pi^2} \beta^2 \Delta_3^3(T) \right. \\ &\quad \left. + \frac{93\zeta(5)}{5 \times 128\pi^4} \beta^4 \Delta_3^5(T) \right] + \frac{\sqrt{W'}}{2abW\sqrt{W}} \left[ \left( 1 + \frac{(W+W')^2}{8WW'} \right) \right] \\ &\quad \times \frac{V_{23}}{\pi} \Delta_3 f(\Delta_3) - \frac{V_{23} \varepsilon_{k3}^2}{16W^2 \pi^2 ab \sqrt{W W'}} \Delta_3 f(\Delta_3) \\ &\quad - \frac{\hbar^2 \omega_D \Delta_3 V_{23} W}{4W^2 \beta \pi ab \sqrt{W W'}} + V_{12} N_1 \Delta_1 [f(\Delta_1)], \\ \Delta_3 &= V_{13} N_1 \Delta_1 [f(\Delta_1)] + N_2 V_{23} \Delta_2 [f(\Delta_2)], \end{aligned} \quad (17)$$

式中  $f(x) \equiv \ln \frac{2\beta\gamma_E \hbar \omega_D}{\pi} - \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} (\beta x)^2 + \frac{93\zeta(5)}{128\pi^4} (\beta x)^4$ , 利用

$$\frac{1}{V}(\phi - \phi_n) = - \sum_{n_1, n_2} \int_0^{\Delta_p} \Delta_{n_1} \Delta_{n_2} \frac{\delta(V_{n_1, n_2}^{-1})}{\delta \Delta_r} d\Delta_r,$$

可求得自由能之差

$$\begin{aligned} \frac{\phi - \phi_n}{V} = & - \frac{7}{16} N_2 \Delta_1^2 \frac{\beta_c^2 \zeta(3)}{\pi^2} - \frac{7}{16} N_1 \Delta_1^2 \frac{\beta_c^2 \zeta(3)}{\pi^2} \\ & + \frac{7}{16} \frac{\beta_c^2 \zeta(3)}{\pi^2} \Delta_1^2 \left[ \frac{\varepsilon_{k3}^2}{16W^2 \pi^2 ab \sqrt{WW'}} - \frac{\sqrt{W'}}{2\pi ab W \sqrt{W}} \right. \\ & \left. \times \left( 1 + \frac{(W + W')^2}{8WW'} \right) \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

当  $T$  趋于  $T_c$  时,  $\Delta_n$  趋于零, 令  $t = 1 - \frac{T_c}{T}$ , 把(18)式中的  $\Delta_n$  展开成  $t$  的级数形式,

并取  $\Delta_n \sim c_n t^{\frac{1}{2}}$ , 则得

(1) 自由能之差:

$$\begin{aligned} \frac{\phi - \phi_n}{V} = & - \frac{7\zeta(3)t^2}{16\pi^2} \beta_c^2 N_2 c_2^4 - \frac{7}{16\pi^2} \beta_c^2 \zeta(3) t^2 c_1^4 N_1 \\ & - \frac{7}{16\pi^2} \beta_c^2 \zeta(3) t^2 c_3^4 \left[ \frac{\sqrt{W'}}{2\pi ab W \sqrt{W}} \right. \\ & \left. \times \left( 1 + \frac{(W + W')^2}{8WW'} \right) - \frac{\varepsilon_{k3}^2}{16W^2 \pi^2 ab \sqrt{WW'}} \right]. \end{aligned} \quad (19)$$

(2) 熵之差:

$$\begin{aligned} \frac{S - S_n}{V} = & - \frac{\partial(\phi - \phi_n)}{V \partial T} = \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} \beta_c^2 k_B N_2 c_2^4 + \frac{7}{8\pi^2} \zeta(3) \beta_c^2 k_B N_1 c_1^4 \\ & + \frac{7}{8\pi^2} \beta_c^2 \zeta(3) k_B c_3^4 \left[ \frac{\sqrt{W'}}{2\pi ab W \sqrt{W}} \left( 1 + \frac{(W + W')^2}{8WW'} \right) \right. \\ & \left. - \frac{\varepsilon_{k3}^2}{16W^2 \pi^2 ab \sqrt{WW'}} \right]. \end{aligned} \quad (20)$$

(3) 比热跃变:

$$\begin{aligned} \left( \frac{c - c_n}{V} \right) T_c = & \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} \beta_c^2 N_2 c_2^4 + \frac{7}{8\pi^2} \beta_c^2 \zeta(3) c_1^4 N_1 \\ & + \frac{7}{8\pi^2} \beta_c^2 \zeta(3) c_3^4 \left[ \frac{\sqrt{W'}}{2\pi ab W \sqrt{W}} \left( 1 + \frac{(W + W')^2}{8WW'} \right) \right. \\ & \left. - \frac{\varepsilon_{k3}^2}{16W^2 \pi^2 ab \sqrt{WW'}} \right]. \end{aligned} \quad (21)$$

## 五、 $T$ 趋于零情况下, 各热力学量的计算

类似于第四节中的计算, 我们得到  $T$  趋于零情况下的熵和比热的表达式:

## 1. 熵

$$\begin{aligned}
 S = & - \left( \frac{\partial \psi}{\partial T} \right) \Delta_i = N_2 \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3 k}{T}} e^{-\beta\Delta_2} + \frac{2N_2\Delta_2}{kT^2} \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3}{\beta}} e^{-\beta\Delta_2} \\
 & - \frac{2\sqrt{W'}}{\pi ab W \sqrt{W}} \left( 1 + \frac{(W+W')^2}{8WW'} \right) \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3}{T}} e^{-\beta\Delta_3} \right. \\
 & + \left. \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3}{\beta}} \frac{\Delta_3}{T} e^{-\beta\Delta_3} \right] + \left[ \frac{\varepsilon_{k_3}^2}{8W^2 \sqrt{WW'} \pi^2 ab} \right. \\
 & \left. - \frac{1}{8W^2 \pi^2 ab \sqrt{WW'}} \right] \left\{ \frac{\Delta_i}{2} - 2 \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{-l} \left[ 2 - \int_{\beta l \Delta_3}^{\infty} K_1(x) x^2 dx \right] \right\} \\
 & + N_1 \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3 k}{T}} e^{-\beta\Delta_1} + 2N_1 \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3}{\beta}} \frac{\Delta_1 e^{-\beta\Delta_1}}{kT^2}. \quad (22)
 \end{aligned}$$

## 2. 比热

$$\begin{aligned}
 c = T \frac{dS}{dT} = & \left( N_2 \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3 k}{T^3}} \frac{\Delta_2}{k} - \frac{N_2}{2} \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3 k}{T^3}} \right) e^{-\beta\Delta_2} + \left( N_1 \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3 k}{T^3}} \frac{\Delta_1}{k} \right. \\
 & \left. - \frac{N_1}{2} \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3 k}{T^3}} \right) e^{-\beta\Delta_1} + \left[ \frac{\varepsilon_{k_3}^2}{8W^2 \pi^2 ab \sqrt{WW'}} - \frac{\sqrt{W'}}{\pi ab W \sqrt{W}} \left( 1 \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{(W+W')^2}{8WW'} \right) - \frac{1}{8W^2 \pi^2 ab \sqrt{WW'}} \right] \\
 & \times \left( \sqrt{\frac{\pi\Delta_3^3 k}{2T^3}} \frac{\Delta_3}{k} - \sqrt{\frac{\pi\Delta_3^3 k}{8T^3}} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3 k}{T^3}} \frac{\Delta_3}{k} \right. \\
 & \left. + \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3 k}{T^3}} \frac{\Delta_3}{k} - 2 \sqrt{\frac{2\pi\Delta_3^3 k}{T^3}} \right) e^{-\beta\Delta_3}. \quad (23)
 \end{aligned}$$

## 六、结 论

上面应用三能带交迭模型, 基于各向异性两种不同的色散关系分别对超导体的超导转变温度进行了计算, 利用(7)式色散关系, 计算了热力学量, 得到了不同的超导转变温度对化学势的关系曲线和在  $T_c$  点的比热跃迁等量。注意到电子与电子间的相互作用势无论是正的还是负的(参数  $V_{13} < 0$ ), 多能带系统中都可以产生超导现象。由图 1 看出:  $x = (6.61, 6.90)$  (对应  $\mu = [-1.326, -1.920]$ ) 时  $T_c$  无明显变化, 这与实验符合。由此看出色散关系(7)式较(4)式 ( $n = 1, 2, 3$ ) 更能正确地描述三能带超导体的行为。

对莫尔多瓦科学院院士 V. A. Moskalenko 教授给予有益的讨论以及 M. E. Palistrant 教授寄来他们的抽印本, 表示衷心的感谢。

- [1] А. С. Александров, *Письма в ЖЭТФ*, **46**(1987), приложение 128.
- [2] J. E. Hirsch, F. Marsiglio, *Phys. Rev. Ser.*, **B39** (1989), 145.
- [3] P. W. Anderson, *Science*, **235** (1987), 1190.
- [4] V. A. Moskalenko, M. E. Palistrant, V. M. Vakalyuk, *Soviet Phys. Uspekhi* **34**(1991), 717.
- [5] В. А. Москаленко, *Физика Металлов и Металловедения*, **8**(1959), 504.
- [6] J. F. Herman, R. V. Kasowski, W. Y. Hsu, *Phys. Rev. Ser.*, **B36**(1987), 6904.
- [7] В. В. Нрыткнн и др., *Физика Твёрдого Тела*, **33**(1991), 2733.
- [8] Е. М. Лифшиц, *ЖЭТФ*, **38**(1960), 1769.
- [9] М. Г. Калаб, Ф. Г. Кочорбэ, М. Е. Палистрант, *ТМФ*, **91**(1992), 483.
- [10] A. A. Rozenbaum, Yu. N. Shvachko, V. V. Ustinov, *Soviet Phys. Uspekhi*, **34**(1991), 862.
- [11] М. Е. Налистрант, Ф. Г. Кочорбэ, *Известие А. Н. Молдовы*, **2**(1991), 7.
- [12] 许祝安等, *物理学报*, **40**(1991)807.
- [13] Zh. X. Wang, X. F. Wang, *Commun. Theor. Phys.*, **18**(1992), 283.

## TRANSITION TEMPERATURE AND THERMODYNAMIC PROPERTIES OF SUPERCONDUCTORS AS ANISOTROPIC FERMI SYSTEMS

YI XUE-XI WANG XI-FU WANG ZHI-XING

*Department of Physics, Northeast Normal University, Changchun 130024*

(Received 18 January 1993)

### ABSTRACT

In this paper, we regard the superconductor as an anisotropic Fermi system, taking into account topological transitions of the electronic energy. We have worked out the relationship between the transition temperature  $T_c$  and chemical potential, and other thermodynamic quantities on the basis of the model of three overlapping energy bands. The results are in agreement with experimental data.

**PACC:** 7420; 7430E; 7125