

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

M715

P11-87-615

Т.М.Мишонов, Т.Л.Бояджиев

**ПРОГРАММА ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ
КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ
СВЕРХПРОВОДНИКА В ФОНОННОЙ МОДЕЛИ**

1987

В связи с широким интересом к проблеме сверхпроводимости в последнее время (1987 г.) возникает необходимость в достаточно просто оформленных программах для персональных компьютеров, предназначенных для расчета основных свойств сверхпроводников, таких как критическая температура, критические магнитные поля, частотные зависимости щелей и т.д.

Цель настоящей работы - описание такой программы для расчета критической температуры сверхпроводника в рамках стандартной фононной модели. При составлении программы учитывалось требование возможности простого ее изменения для включения новых механизмов к конвенциональной модели, как, например, акустические плазмоны, локальные ангармонические фононные моды и т.д. В предлагаемом минимальном варианте программа основывается на фононной модели с кулоновским псевдопотенциалом отталкивания. Для введения в теорию сверхпроводящего фазового перехода см. обзор Аллена и Митровича^{/1/}.

Программа активируется при помощи команды TC.

В технике Мацубары величина критической температуры определяется как точка, в которой обращается в ноль минимальное собственное значение действительной симметрической матрицы

$$A_{in} = \delta_{in} \left\{ (2n-1) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} \lambda_k \right\} - (1 - \delta_{in}) \lambda_{|i-n|} - \lambda_{|i+n|} + 2\mu, \quad (1)$$

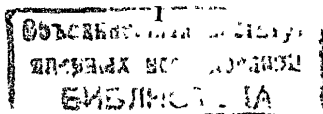
$$i, n = 1, 2, \dots, N,$$

где функция взаимодействия λ_k выражается через функцию Элиашберга $\alpha^2(\Omega) F(\Omega)$ по формуле

$$\lambda_k = \int_0^{\infty} \frac{2\Omega}{\Omega^2 + (2\pi T k)^2} \alpha^2(\Omega) F(\Omega) d\Omega, \quad (2)$$

$$k = 1, 2, \dots, 2N-1.$$

Здесь δ_{ik} - символы Кроннекера, μ - кулоновский псевдопотенциал. Параметр λ_0 сокращается во всех формулах^{/1/}, и поэтому в программе



для улучшения численной устойчивости положено $\lambda_0 = 0$.

Конечный размер N матрицы A приводит к эффективному обрезанию маубаровских частот

$$\omega_i = \pi T(2i-1), \quad i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

до значения $\omega_{cutoff} = 2\pi T(N-1/2)$, т.е. $|\omega_i| < \omega_{cutoff}$.

Конечномерная аппроксимация вносит несущественные изменения вычисленной критической температуры T_c , если характерные фононные частоты значительно меньше (например, в 6 раз $\sqrt{2}$).

Число N точек маубаровской оси представляет собой первый входной параметр программы. После этого вводится параметр кулоновского псевдопотенциала.

Обозначим через N_{ph} число фононных мод; тогда для функции Элиашберга имеет место аппроксимация

$$\alpha^2(\Omega) F(\Omega) = (\text{area}) \sum_{k=1, N_{ph}} f_k \delta(\Omega - \Omega_k). \quad (3)$$

Далее вводится число N_{ph} фононных мод, а также интеграл

$$(\text{area}) = \int_0^{\infty} \alpha^2(\Omega) F(\Omega) d\Omega$$

(площадь фигуры, ограниченной сверху функцией Элиашберга). Затем в цикле по k от 1 до N_{ph} на дисплей отпечатывается номер k фононной моды и вводятся соответствующие силы f_k осциллятора и фононная частота $\omega_k = \Omega_k$. При этом предполагается, что для сил осциллятора справедливо правило сумм $\sum_{k=1, N_{ph}} f_k = I$.

Последними входными параметрами являются границы T_{min} и T_{max} температурного интервала, для которых без проверки предполагается выполненным неравенство $T_{min} < T_c < T_{max}$. Численная реализация алгоритма использует хорошо известный метод деления отрезка пополам. Более экономичный алгоритм будет рассмотрен в отдельной работе. Если критическая температура T_c находится вне интервала (T_{min}, T_{max}) , то в конце выполнения программы печатается сообщение об ошибке ***** ERROR*****.

Для отыскания собственных значений и соответствующих собственных функций используется стандартная программа EIGRS библиотеки IMSL.

Предполагается, что все входные параметры для температуры и частоты выражены в одинаковых энергетических единицах; если эти величины заданы в мэВ, то на выходе $II \cdot 6 \cdot T_c$ есть критическая температура в К.

Критерием правильности выполнения программы является отношение

$\omega_{cutoff}/\max(\Omega_{phonon})$, выводимое на дисплей - это должно быть достаточно большое число (больше 5).

В программе предусмотрена возможность графической интерпретации полученных результатов. В случае положительного ответа /I:ENTER/ на вопрос "Do you want a picture (0/1)", на экране строятся зависимости первых двух и последней собственных функций матрицы A . Отметим, что первый собственный вектор есть зависимость щели Δ_n от маубаровской частоты. На картине абсциссой и ординатой являются безразмерные отношения $\omega/\omega_{cutoff} \in (0, 1)$ и $\Delta_n(i\omega_n)/\max(\Delta_n) \in (0, 1)$. Для построения графиков использован широко распространенный пакет GSX (см. соответствующую документацию).

Программа написана на языке Fortran - 77, MS 3.20;

В случае необходимости изменения, включающие новые эффекты, делаются между комментариями {begin matrix и end matrix}. После изменений на шаге LINK необходимо связать программы TC и GSXCALL. Соответствующая команда имеет вид B>A:LINK TC + GSXCALL. Кроме стандартных используется библиотека EIGENRS.LIB, в которой находятся объектные модули EIGRS.OBJ и GSX. Перед запуском TC необходимо установить пакет GSX (команда /GSX:ENTER/).

Программа доступна на гибком диске.

Литература

1. Ph.B. Allen, B.Mitrovic. Theory of Superconducting T_c in Solid State Physics, v.37, p.50, Ed. H. Ehrenreich, F. Seitz, D. Turnbull, Acad.Press, 1982, New.York.
2. F.Mersiglio, J.P.Carbotte. Phys.Rev. B, v.33, N9, 1986., p.6141.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 августа 1987 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р.55 к.
Д2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р.00 к.
Д13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р.50 к.
Д2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р.30 к.
Д1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р.50 к.
Д10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983.	3 р.50 к.
Д17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р.75 к.
Д11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р.00 к.
Д13-85-793	Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна, 1985.	4 р.80 к.
Д4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1985.	3 р.75 к.
Д3,4,17-86-747	Труды V Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1986.	4 р.50 к.
-	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984. /2 тома/	13 р.50 к.
Д1,2-86-668	Труды VIII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1986. /2 тома/	7 р.35 к.
Д9-87-105	Труды X Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1986. /2 тома/	13 р.45 к.
Д7-87-68	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Дубна, 1986	7 р.10 к.
Д2-87-123	Труды Совещания "Ренормгруппа-86". Дубна, 1986	4 р.45 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу: 101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79. Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.

Мишонов Т.М., Бояджиев Т.Л.

P11-87-615

Программа для вычисления критической температуры сверхпроводника в фононной модели

Программа написана на языке Фортран-77 и предназначена для использования на ПЭВМ "Правец 16" и совместимых с ними. В диалоговом режиме вводятся фононный спектр /функция Элиашберга/ и температурный потенциал, содержащий критическую температуру T_c . Предусмотрена возможность построения графика зависимости сверхпроводящей щели от мацубаровской частоты.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод авторов

Mishonov T.M., Boyadzhiev T.

P11-87-615

Program for Calculating Critical Temperature for Superconductor in Phonon Model

The program is written in Fortran 77 language and is intended for IBM PC users. In dialogical regime input phonon spectrum /Eliashberg function/ and temperature interval which contains the critical temperature T_c are introduced. A possibility is foreseen for graphical representation of superconducting temperature as a function of Matsubara frequency.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987