

使用 Eliashberg. f90 程序得到超导临界温度的几点注意事项

整理人：张培育

整理时间：2022. 6. 17

程序安装及输入输出文件的详细说明参考文件《如何用 eliashberg. x 直接处理谱函数文件得到超导临界温度》，这里不再重复介绍。

本文主要补充说明使用此程序需要注意的一些细节。

一、 Eliashberg. f90 用于求解各项同性超导能隙方程

The isotropic Eliashberg equations take the form:

$$[1 - Z(i\omega_n)]i\omega_n = -\frac{\pi}{\beta} \sum_{n'} \frac{Z(i\omega_{n'})i\omega_{n'}}{\mathcal{E}(i\omega_{n'})} \int \frac{2\omega\alpha^2 F(\omega)}{(\omega_n - i\omega_{n'})^2 + \omega^2} d\omega \quad (1)$$

$$\Phi(i\omega_n) = \frac{\pi}{\beta} \sum_{n'} \frac{\Phi(i\omega_{n'})}{\mathcal{E}(i\omega_{n'})} \left[\int \frac{2\omega\alpha^2 F(\omega)}{(\omega_n - i\omega_{n'})^2 + \omega^2} d\omega - N_F \bar{V}_C \right] \quad (2)$$

$$\Phi(i\omega_n) = \Delta(i\omega_n)Z(i\omega_n) \quad (3)$$

$$\mathcal{E}(i\omega_n) = \sqrt{[Z(i\omega_n)\omega_n]^2 + [\Phi(i\omega_n)]^2} \quad (4)$$

where $\Delta(i\omega_n)$ and $Z(i\omega_n)$ represent superconducting gap and the renormalization function, N_F is the density of electronic states at the Fermi level, \bar{V}_C represents an appropriate Fermi surface average of the screened Coulomb potential V_C . and $i\omega_n = i(2n + 1)\pi k_B T$ (with n integer) are the fermion Matsubara frequencies. Including the repulsive term in the Eliashberg equations is a quite hard task. Thus, $\mu^* = \frac{N_F \bar{V}_C}{1 + N_F \bar{V}_C \ln(E_F/\omega_c)}$ is often chosen in solving Eliashberg equations. Then, the equation (2) is written as the sum of the following two equations:

$$\Phi^{ph}(i\omega_n) = \frac{\pi}{\beta} \sum_{n'} \frac{\Phi(i\omega_{n'})}{\mathcal{E}(i\omega_{n'})} \int \frac{2\omega\alpha^2 F(\omega)}{(\omega_n - i\omega_{n'})^2 + \omega^2} d\omega \quad (5)$$

$$\Phi^C(i\omega_n) = -\mu^* \frac{\pi}{\beta} \sum_{n'} \frac{\Phi(i\omega_{n'})}{\mathcal{E}(i\omega_{n'})} \theta(\omega_c - |\omega_{n'}|) \quad (6)$$

The cutoff frequency ω_c is taken to be some multiple (typically six to ten) of the maximum phonon frequency [1-3]. To estimate a reasonable T_c , $\omega_c = 20 \omega_2$ is usually used in simulations, where $\omega_2 = \left[\frac{1}{\lambda} \int_0^{\omega_{max}} 2\alpha^2 F(\omega) \omega d\omega \right]^{\frac{1}{2}}$.

由 $N_F \bar{V}_C$ 到 μ^* 的详细推导可参考 J. A. Flores-Livas, L. Boeri, A. Sanna, G. Profeta, R. Arita, and M. Eremets, Phys. Rep. 856, 1 (2020) 第 27 页。

其他参考资料 <https://elk.sourceforge.io/CECAM/Sanna-Eliashberg.pdf>

<https://www.cond-mat.de/events/correl13/manuscripts/ummarino.pdf>

个人理解引入 ω_c 的意义: Eliashberg 方程中的排斥相很难求解。库仑相互作用不能以与电子-声子相互作用相同的精度引入, 因为它没有自然截止以确保对松原频率求和收敛。电子-声子相互作用的能量尺度小, 时间尺度长, 而电子-电子相互作用的能量尺度大, 时间尺度短。人为引入一个低能和高能的分界线即 ω_c , 将方程 (2) 的高能部分和低能部分分开处理, 通过一些近似简化处理, 比如高能部分的电声耦合 λ 为 0, 超导能隙为常数, 最后推导出的 $\mu^* = \frac{N_F \bar{V}_C}{1 + N_F \bar{V}_C \ln(E_F / \omega_c)}$ 被称为 Morel-Anderson pseudopotential, 将其引入到方程 (2) 中, 可以看出电-声和库仑部分有相同的截止频率。一般情况下, μ^* 的经验值是 0.1-0.2, 这时 Eliashberg 方程便可以解析求解。

二、 修改源程序

1. ω_c

Eliashberg.f90 程序中默认的 ω_c 等于 $1\omega_2$, 这使得超导能隙随温度升高不是单调下降的平滑曲线, 如图 1 (a), 这违背了超导能隙随温度升高而减小这一事实。通过测试发现增大 ω_c , 曲线会变得平滑。 ω_c 的经验值是 6-10 倍的最高声子频率, 大约为 12-20 倍的 ω_2 。

```
! number of Matsubara frequencies
nwf=nint(wfmax/(2.d0*t0))
if (nwf.gt.maxwf) nwf=maxwf
nwfc1=nint(20.d0*wrms/(2.d0*t0))
if (nwfc1.gt.nwf) nwfc1=nwf
```

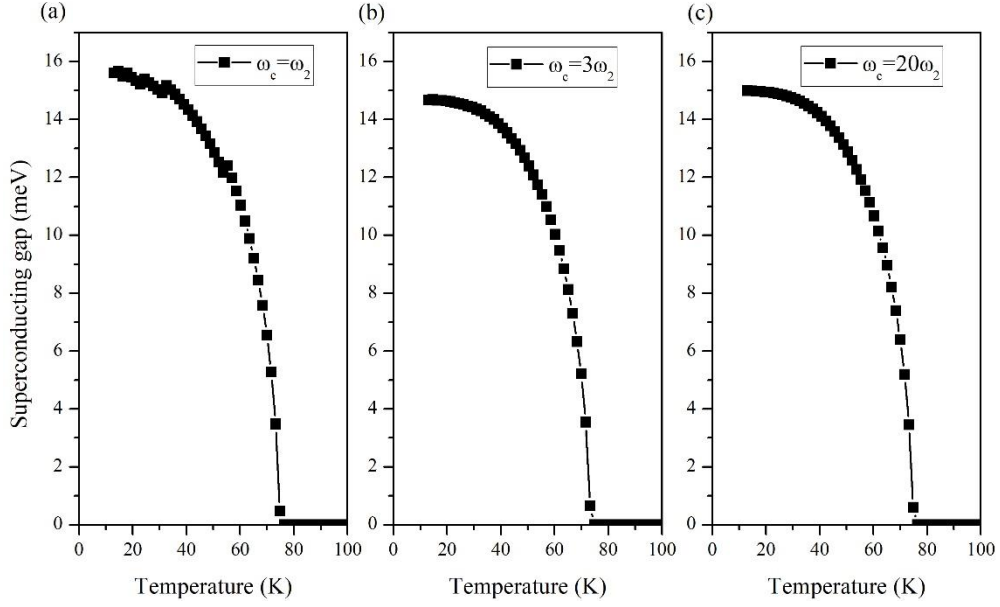


图 1. 超导能隙随温度的变化曲线

2. ntemp

输入文件 INPUT 中的温度步数设置对超导转变有一定的影响, 经测试发现温度步数设置越大 T_c 越趋于收敛 (图 2)。测试体系为常压下 $\text{Rb}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{B}_3\text{C}_3$, 其中 $T_{c,\min} = \sim 10 \text{ K}$, $T_{c,\max} = \sim 200 \text{ K}$ 。结果表明, 当 ntemp 大于 50000, 即温度步长小于 0.0038 K 时, 可以获得合理的 T_c 。

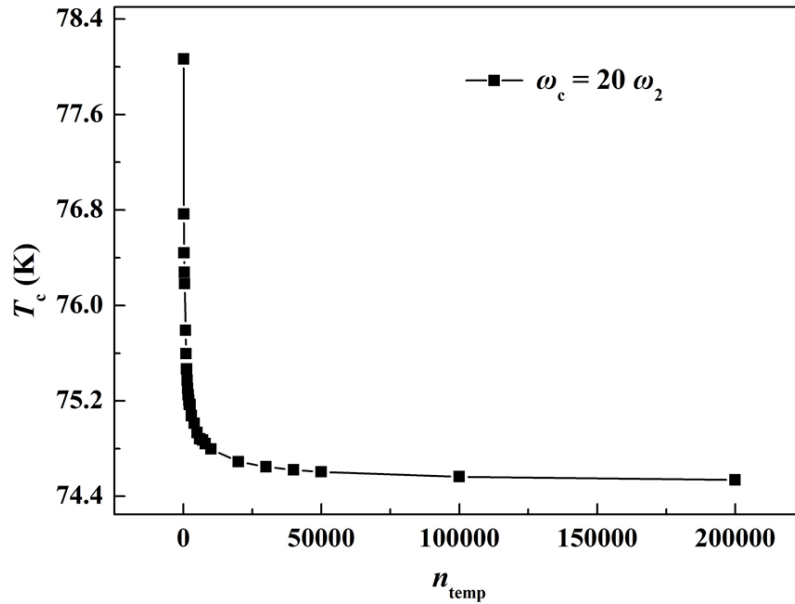


图 2. 超导转变温度随温度步数变化的收敛测试

三、 单位换算

输出文件 ELIASHBERG_GAP_T.OUT 中第一列为温度，第二列为超导能隙，其单位为 Hartree，转化为 meV 需要乘以 27212。(1 Hartree = 27.212 eV)。

参考文献

- [1] J. N. Wang, X. W. Yan, and M. Gao, Phys. Rev. B 103, 144515 (2021).
- [2] Y. Yao, J. S. Tse, K. Tanaka, F. Marsiglio, and Y. Ma, Phys. Rev. B **79**, 054524 (2009).
- [3] M. Gao, X. W. Yan, Z. Y. Lu, and T. Xiang, Phys. Rev. B **104**, L100504 (2021).