

УДК 538.945

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СОСТОЯНИЯ БИНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ $\text{Cu}_x\text{Zr}_{100-x}$ МЕТОДОМ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА

А.М. ВОРА

Пармешвари, Гуджарат, Индия

(Поступила в редакцию 11 августа 2007 г.)

Теоретически исследованы свойства сверхпроводящего состояния (ССС), а именно, константа электрон-фононной связи λ , кулоновский псевдопотенциал μ^* , температура перехода T_C , показатель изотопического эффекта α и эффективное взаимодействие N_0V для десяти бинарных металлических стекол $\text{Cu}_x\text{Zr}_{100-x}$ ($x = 25-60$ ат%), с использованием модельного потенциала пустого ядра Ашкрофта. Используются пять поправочных на локальное поле функций, предложенных Хартри (Х), Тейлором (Т), Ичимару-Уцуми (ИУ), Фаридом и др. (Ф), и Саркаром и др. (С) для изучения экранирующего влияния на вышеотмеченные параметры. Показано, что константа электрон-фононной связи λ и температура перехода T_C достаточно чувствительны к выбору поправочной на локальные поля функции, в то время как кулоновский псевдопотенциал μ^* , показатель изотопического эффекта α и эффективное взаимодействие N_0V слабо зависят от поправочной функции. Показано, что значения T_C , полученные с использованием поправочной функции Х, качественно согласуются с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными и зависят от концентрации меди x почти линейно. Показано, что приведенные результаты хорошо согласуются с другими имеющимися теоретическими и экспериментальными данными. Полученные по СССР результаты подтверждают существование сверхпроводящей фазы в металлических стеклах.

1. Введение

Корреляции электронов в твердом теле, и в частности, сверхпроводимость являются интенсивно развивающейся областью физики твердого тела, где имеют место открытия новых явлений, неизвестных свойств известных явлений, а также разработка новых материалов и приборов для технических применений. За последние несколько лет получены сверхпроводящие металлические стекла на основе различных металлов периодической системы. Изучение СССР металлических стекол имеет большое значение для определения их применимости в сверхпроводящих линиях передач, а исследование зависимости температуры перехода T_C от состава металлического стекла способствует изысканию новых сверхпроводников с более высокой температурой перехода. Эксперименты показывают также, что температура сверхпроводящего перехода T_C для аморфных металлов намного выше, чем у кристаллов, что также зависит от содержания металла в кристаллической или в аморфной фазе [1-19]. Хотя

теория псевдопотенциалов успешно использовалась при изучении различных свойств металлических стекол, имеется лишь небольшое число несистематических попыток исследования ССС бинарных металлических стекол на основе модельного потенциала [7-19]. Концепция псевдопотенциала в случае бинарных металлических стекол предполагает наличие псевдоионов, свойства которых в среднем описывают два типа ионов в бинарной системе, а газ свободных электронов предполагается распределенным между ними. Система электрон-псевдоион рассматривается посредством псевдопотенциала, а взаимодействие между электронами учитывается через диэлектрическую экранирующую функцию. Для правильного предсказания сверхпроводящих свойств металлических стекол очень существенен правильный выбор псевдопотенциала и экранирующей функции [4-19].

Среди большого числа металлических стекол, к настоящему времени имеются сообщения о ССС, полученных с использованием псевдопотенциалов, лишь для некоторых из них. Так, например, Вора и др. [4-9] исследовали ССС некоторых металлов, бинарных сплавов на основе индия и на основе щелочных металлов и целый ряд металлических стекол, используя формализм однопараметрического модельного потенциала.

ССС металлических стекол $\text{Ca}_{70}\text{Mg}_{30}$ сообщались в работах Гупты и др. [15] и Шармы и др. [16]. Изучение ССС стекла $\text{Mg}_{70}\text{Zn}_{30}$ проводилось Агарвалом и др. [17] и Гуптой и др. [18]. Они использовали для вычисления ССС модельный потенциал пустого ядра Ашкрофта (ППЯ) [20]. Зависимость ССС от экранирования в металлических стеклах $\text{Ca}_{70}\text{Mg}_{30}$ изучалась Р.Шармой и К.С.Шармой [19] с помощью модельного ППЯ Ашкрофта [20], линейного потенциала Шармы-Качавы [21] и модельного потенциала Вельжковича-Славича [22].

Теоретическое исследование ССС металлических стекол $\text{Cu}_x\text{Zr}_{100-x}$ сообщалось Шармой и др. [10-12]. В большей части этих работ расчеты проводились с модельным ППЯ Ашкрофта [20]. Однако ни в одной из работ при вычислении ССС не использовались поправочные на локальное поле функции X [23], T [24], IY [25], Φ [26] и C [27]. Кроме того, медь является хорошим проводником и проявляет условно сверхпроводящие свойства, в то время как цирконий – переходной металл и имеет несверхпроводящий характер в нормальных условиях, так что этот класс стекол может быть вполне подходящим для промышленного применения. Поэтому в настоящей работе на основе модельного ППЯ Ашкрофта исследованы ССС десяти бинарных металлических стекол $\text{Cu}_x\text{Zr}_{100-x}$ ($x=25(60 \text{ at}\%)$), а именно, константа электрон-фононной связи λ , кулоновский псевдопотенциал μ^* , температура перехода T_C , а также показатель изотопического эффекта α и эффективное взаимодействие N_0V .

2. Техника вычислений

Константа электрон-фононной связи λ вычисляется в настоящей работе с помощью соотношения [4-9]

$$\lambda = \frac{m_b \Omega_0}{4\pi^2 k_F M \langle \omega^2 \rangle} \int_0^{2k_F} q^3 |V(q)|^2 dq. \quad (1)$$

Здесь m_b – зонная масса, M – масса иона, Ω_0 – объем атома, k_F – волновой вектор Ферми, $V(q)$ – экранированный псевдопотенциал и $\langle \omega^2 \rangle$ – среднеквадратичная частота фонона бинарного стекловидного сплава.

Используя соотношения $X = q/2k_F$ и $\Omega_0 = 3\pi^2 Z / (k_F)^3$, получим равенство (1) в форме

$$\lambda = \frac{12 m_b Z}{M \langle \omega^2 \rangle} \int_0^1 X^3 |W(X)|^2 dX, \quad (2)$$

где Z и $W(X)$ суть, соответственно, валентность металлического стекла и экранированный псевдопотенциал пустого ядра Ашкрофта для бинарных смесей [20].

Известное выражение экранированного модельного ППЯ Ашкрофта [20], используемое в настоящих вычислениях ССС бинарных металлических стекол, имеет вид

$$W(X) = \frac{-\pi Z}{\Omega_0 X^2 k_F^2 \epsilon(X)} \cos(2k_F X r_C), \quad (3)$$

где r_C – параметр модельного потенциала бинарных металлических стекол. Модельный ППЯ Ашкрофта является простой однопараметрической моделью [20], которая успешно использовалась для различных металлокомплексов [10-19]. Оказалось, что при использовании с подходящим видом диэлектрической экранирующей функции этот потенциал дает хорошие результаты также в расчетах ССС металлических стекол [10-19]. Поэтому в настоящей работе мы впервые используем модельный ППЯ с улучшенными поправочными на локальное поле функциями ИУ, Φ и S . Параметр r_C модельного потенциала можно получить путем фитинга либо с определенными экспериментальными данными, либо с реальными форм-факторами, относящимися к исследуемым свойствам. Величина параметра r_C модельного потенциала для исследуемых бинарных металлостекол получена здесь фитированием форм-факторов, как предлагается в [11,12,28].

Кулоновский псевдопотенциал μ^* дается выражением [4-9]

$$\mu^* = \frac{\frac{m_b}{\pi k_F} \int_0^1 \frac{dX}{\epsilon(X)}}{1 + \frac{m_b}{\pi k_F} \ln\left(\frac{E_F}{10\theta_D}\right) \int_0^1 \frac{dX}{\epsilon(X)}}, \quad (4)$$

где E_F – энергия Ферми, а $\epsilon(X)$ – модифицированная диэлектрическая функция Хартри, записываемая в виде [23]

$$\varepsilon(X) = 1 + [(\varepsilon_H(X) - 1)(1 - f(X))]. \quad (5)$$

Здесь $\varepsilon_H(X)$ – статическая диэлектрическая функция Хартри [23], а $f(X)$ – поправочная на локальное поле функция. В настоящей работе поправочные на локальное поле функции X, T, ИУ, Ф и С включают воздействие обменных и корреляционных эффектов. Подробности всех локально-полевых поправок приведены ниже.

Экранирующая функция X [23] является чисто статической и не содержит обменных и корреляционных эффектов:

$$f(X) = 0. \quad (6)$$

Тейлором (Т) было предложено аналитическое выражение для локально-полевой поправочной функции, для которой точно выполняется правило сумм на сжимаемость. Это наиболее общепринятая локально-полевая поправочная функция, полностью содержащая все характеристики этих функций описанных до 1972 года. Согласно Тейлору,

$$f(X) = \frac{q^2}{4k_F^2} \left[1 + \frac{0.1534}{\pi k_F^2} \right]. \quad (7)$$

Локально-полевая поправочная функция ИУ [25] является подгоночной формулой для диэлектрической экранирующей функции вырожденной электронной жидкости при металлических и меньших плотностях, которая точно воспроизводит результат, полученный методом Монте-Карло, а также удовлетворяет условию самосогласованности в смысле правила сумм сжимаемости и короткодействующих корреляций. Эта формула имеет вид

$$f(X) = A_{IU}Q^4 + B_{IU}Q^2 + C_{IU} + \left[A_{IU}Q^4 + \left(B_{IU} + \frac{8A_{IU}}{3} \right)Q^2 - C_{IU} \right] \left\{ \frac{4-Q^2}{4Q} \ln \left| \frac{2+Q}{2-Q} \right| \right\}. \quad (8)$$

На основе локально-полевой поправочной функции ИУ Фарид и др. (Ф) [26] предложили локально-полевую поправочную функцию вида

$$f(X) = A_FQ^4 + B_FQ^2 + C_F + \left[A_FQ^4 + D_FQ^2 - C_F \right] \left\{ \frac{4-Q^2}{4Q} \ln \left| \frac{2+Q}{2-Q} \right| \right\}. \quad (9)$$

Основываясь на формулах (8) и (9), Саркар и др. (С) [27] предложили простой вид локально-полевой поправочной функции

$$f(X) = A_S \left\{ 1 - (1 + B_S Q^4) \exp(-C_S Q^2) \right\}, \quad (10)$$

где $Q = 2X$. Параметры A_{IU} , B_{IU} , C_{IU} , A_F , B_F , C_F , D_F , A_S , B_S и C_S являются параметрами локально-полевых поправочных функций ИУ, Ф и С, зависящими от объема атома. Математические выражения для этих параметров приведены в соответствующих работах [25-27] по локально-полевым поправочным функциям

После вычисления λ и μ^* температура перехода T_C и показатель изотопического эффекта α исследуются по формулам Макмиллана [4-9]

$$T_C = \frac{\theta_D}{1.45} \exp \left[\frac{-1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^* (1+0.62\lambda)} \right], \quad (11)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \left[1 - \left(\mu^* \ln \frac{\theta_D}{1.45 T_C} \right)^2 \frac{1+0.62\lambda}{1.04(1+\lambda)} \right]. \quad (12)$$

Эффективная длина взаимодействия $N_0 V$ изучается по формуле [4-9]

$$N_0 V = \frac{\lambda - \mu^*}{1 + \frac{10}{11} \lambda}. \quad (13)$$

3. Результаты и обсуждение

Величины входных параметров для исследуемых металлостекол $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$ собраны в табл.1. Вычисленные нами данные по ССС приведены в табл.2 наряду с экспериментальными [29] и аналогичными теоретическими результатами [9,12]. Графическое представление параметра r_C модельного потенциала в зависимости от концентрации меди (С) (в ат %) приведено на рис.1. Графический анализ ССС систем $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$ приведен на рис.2-6.

Табл.1. Исходные параметры металлостекол $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$.

Металло-стекло	Z^*	r_C , а.е.	Ω_0 , а.е.	k_F , а.е.	m_b , а.е.	M (а.е.м.)	θ_D (К)	$\langle w^2 \rangle \times 10^{-6}$ (произв.ед.)
$\text{Cu}_{25}\text{Zr}_{75}$	3.25	1.573	137.86	0.8621	1.113	77.55	304.00	0.4957
$\text{Cu}_{30}\text{Zr}_{70}$	3.10	1.597	133.98	0.8525	1.115	74.82	306.60	0.5028
$\text{Cu}_{33}\text{Zr}_{67}$	3.01	1.606	131.65	0.8468	1.117	73.18	308.16	0.5071
$\text{Cu}_{35}\text{Zr}_{65}$	2.95	1.617	130.10	0.8430	1.118	72.09	309.20	0.5099
$\text{Cu}_{40}\text{Zr}_{60}$	2.80	1.638	126.22	0.8334	1.120	69.35	311.80	0.5170
$\text{Cu}_{45}\text{Zr}_{55}$	2.65	1.658	122.34	0.8239	1.123	66.62	314.40	0.5241
$\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$	2.50	1.687	118.47	0.8144	1.125	63.89	317.00	0.5311
$\text{Cu}_{55}\text{Zr}_{45}$	2.35	1.720	114.59	0.8048	1.128	61.15	319.60	0.5382
$\text{Cu}_{57}\text{Zr}_{43}$	2.29	1.729	113.04	0.8010	1.129	60.06	320.64	0.5410
$\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{40}$	2.20	1.739	110.71	0.7953	1.130	58.42	322.20	0.5453

Вычисленные значения константы электрон-фононной связи λ для десяти бинарных металлостекол $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$, приведены в табл.2 наряду с другими теоретическими данными [9,12]; вычисления проведены с использованием пяти локально-полевых поправочных функций и модельного потенциала ППЯ. График изменения λ с концентрацией меди (С) (в ат%) также приведен на рис.2 для различных локально-полевых поправочных функций. Графики λ имеют ту же форму, которая предложена Баконьи [30]. Из табл.2 и рис.2 видно, что величина λ чувствительна к выбору локально-полевой поправочной функции. График, полученный для экранирующей функции X, хорошо согласуется с результатами Баконьи [30]. Заметим, что в настоящем исследовании процентное отношение влияния на константу электрон-фононной связи λ различных локально-полевых поправочных функций к влиянию статической экранирующей функции X равно примерно 20-64%. Кроме того, X-экранирование дает

наименьшее значение λ , в то время как при использовании Φ -функции это значение максимально. Из табл.1 видно также, что при переходе от $\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{40}$ к $\text{Cu}_{25}\text{Zr}_{75}$ вычисленная величина λ растет от 0.5526 до 1.0634 при возрастании концентрации циркония от 0.40 до 0.75. Рост λ с концентрацией циркония показывает постепенный переход от слабой связи электронов с фононами до промежуточной, что может быть объяснено увеличением гибридизации *sp-d* электронов циркония с увеличением концентрации, которое наблюдалось также фон Миннигеродом и Самвером [31]. Это может быть также объяснено увеличением роли колебаний ионов в областях с повышенной концентрацией циркония [31]. Наиболее важной особенностью, которую необходимо отметить, является уменьшение вычисляемой здесь величины λ с увеличением концентрации меди в серии металлостекол $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$.

Вычисленные значения кулоновского псевдопотенциала μ^* , учитывающего кулоновское взаимодействие между электронами проводимости, приведены в табл.2 наряду с другими теоретическими данными [9,12]; вычисления проведены с использованием различных форм локально-полевых поправочных функций. Из табл.2 видно, что расчетные значения μ^* находятся в интервале от 0.1563 до 0.1843 для всех металлостекол, что согласуется с данными Макмиллана [32], где приводится значение $\mu^* \approx 0.13$ для переходных металлов. Видно, что экранирующее влияние на расчетные значения μ^* незначительно. Графики зависимости μ^* от концентрации для различных локально-полевых поправочных функций приведены на рис.3, которые показывают слабую зависимость от выбора этих функций. Процентное влияние на расчетную величину μ^* различных локально-полевых поправочных функций по отношению к статической X-функции экранирования лежит для металлостекол в интервале 5.25%–11.29%. И в этом случае экранирующая X-функция дает наименьшее значение μ^* , а величина, получаемая из Φ -функции, максимальна. Эти результаты хорошо согласуются с имеющимися теоретическими данными [8-19]. И в этом случае величина μ^* растет с ростом концентрации меди.

Табл.2 содержит также величину температуры перехода T_C бинарных металлостекол $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$, рассчитанную с различными видами локально-полевых поправочных функций, наряду с экспериментальными [29] и теоретическими [9,12] данными. Из таблицы видно, что экранирующая X-функция дает наименьшее значение T_C , а Φ -функция – наибольшую величину.

Табл.2. Параметры сверхпроводящего состояния бинарных металлостекол $\text{Cu}_x\text{Zr}_{100-x}$.

Стекло	CCC	Результаты настоящей работы					Экс-пер. [29]	Другие эксперименты
		H	T	IU	F	S		
$\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{40}$	λ	0.5526	0.8471	0.8838	0.9038	0.6799	0.31	0.44[12], 0.40[12], 0.39[12], 0.39[12], 0.39[12]
	μ^*	0.1656	0.1817	0.1839	0.1843	0.1752		0.15[12], 0.14[12], 0.14[12], 0.14[12], 0.14[12]
	T_C (K)	1.6728	7.6362	8.4449	8.9410	3.8514		0.52[12], 0.31[12], 0.31[12], 0.30[12], 0.27[12]
	α	0.2274	0.3510	0.3571	0.3619	0.2946		0.16[12], 0.12[12], 0.14[12], 0.14[12], 0.14[12]
	N_0V	0.2576	0.3759	0.3881	0.3950	0.3119		0.21[12], 0.19[12], 0.19[12], 0.19[12], 0.18[12]
$\text{Cu}_{57}\text{Zr}_{43}$	λ	0.5748	0.8788	0.9167	0.9374	0.7056	—	0.6911[9]
	μ^*	0.1648	0.1807	0.1828	0.1832	0.1742		0.2052[9]
	T_C (K)	2.0901	8.5031	9.3431	9.8547	4.4901		2.6834[9]
	α	0.2557	0.3630	0.3684	0.3726	0.3133		0.1662[9]
	N_0V	0.2693	0.3881	0.4003	0.4072	0.3237		0.2984[9]
$\text{Cu}_{55}\text{Zr}_{45}$	λ	0.5864	0.8946	0.9331	0.9540	0.7186	0.65	0.47[12], 0.44[12], 0.43[12], 0.43[12], 0.42[12]
	μ^*	0.1642	0.1800	0.1821	0.1825	0.1736		0.15[12], 0.14[12], 0.14[12], 0.14[12], 0.14[12]
	T_C (K)	2.3255	8.9407	9.7914	10.3091	4.8276		0.98[12], 0.65[12], 0.63[12], 0.61[12], 0.57[12]
	α	0.2692	0.3687	0.3737	0.3777	0.3222		0.23[12], 0.20[12], 0.21[12], 0.22[12], 0.22[12]
	N_0V	0.2754	0.3941	0.4063	0.4132	0.3297		0.23[12], 0.21[12], 0.21[12], 0.21[12], 0.21[12]
$\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$	λ	0.6000	0.9095	0.9477	0.9688	0.7321	0.92	0.50[12], 0.46[12], 0.45[12], 0.45[12], 0.44[12]
	μ^*	0.1628	0.1783	0.1804	0.1807	0.1719		0.15[12], 0.14[12], 0.14[12], 0.14[12], 0.14[12]
	T_C (K)	2.6344	9.3810	10.2218	10.7398	5.2117		1.33[12], 0.92[12], 0.88[12], 0.86[12], 0.81[12]
	α	0.2866	0.3759	0.3804	0.3841	0.3334		0.26[12], 0.24[12], 0.25[12], 0.25[12], 0.25[12]
	N_0V	0.2829	0.4003	0.4122	0.4190	0.3363		0.24[12], 0.22[12], 0.22[12], 0.22[12], 0.22[12]
$\text{Cu}_{45}\text{Zr}_{55}$	λ	0.6139	0.9253	0.9633	0.9845	0.7462	1.25	0.52[12], 0.48[12], 0.47[12], 0.47[12], 0.46[12]
	μ^*	0.1615	0.1766	0.1787	0.1790	0.1704		0.14[12], 0.14[12], 0.14[12], 0.13[12], 0.13[12]
	T_C (K)	2.9637	9.8354	10.6688	11.1865	5.6136		1.74[12], 1.25[12], 1.18[12], 1.15[12], 1.09[12]
	α	0.3024	0.3827	0.3868	0.3901	0.3439		0.29[12], 0.27[12], 0.28[12], 0.28[12], 0.28[12]
	N_0V	0.2904	0.4066	0.4183	0.4251	0.3431		0.25[12], 0.24[12], 0.23[12], 0.23[12], 0.23[12]
$\text{Cu}_{40}\text{Zr}_{60}$	λ	0.6360	0.9540	0.9928	1.0145	0.7704	1.75	0.55[12], 0.51[12], 0.50[12], 0.49[12], 0.49[12]
	μ^*	0.1602	0.1750	0.1770	0.1774	0.1689		0.14[12], 0.14[12], 0.14[12], 0.13[12], 0.13[12]
	T_C (K)	3.4826	10.6161	11.4591	11.9808	6.2720		2.34[12], 1.75[12], 1.65[12], 1.61[12], 1.53[12]
	α	0.3213	0.3915	0.3950	0.3980	0.3571		0.32[12], 0.31[12], 0.31[12], 0.31[12], 0.31[12]
	N_0V	0.3015	0.4172	0.4288	0.4355	0.3538		0.27[12], 0.25[12], 0.25[12], 0.25[12], 0.25[12]
$\text{Cu}_{35}\text{Zr}_{65}$	λ	0.6536	0.9758	1.0150	1.0370	0.7892	2.25	0.58[12], 0.54[12], 0.52[12], 0.52[12], 0.51[12]
	μ^*	0.1588	0.1734	0.1754	0.1757	0.1674		0.14[12], 0.14[12], 0.13[12], 0.13[12], 0.13[12]
	T_C (K)	3.9218	11.2051	12.0491	12.5703	6.7964		2.93[12], 2.25[12], 2.11[12], 2.07[12], 1.98[12]
	α	0.3354	0.3981	0.4013	0.4040	0.3669		0.34[12], 0.33[12], 0.34[12], 0.34[12], 0.34[12]
	N_0V	0.3103	0.4252	0.4367	0.4433	0.3621		0.28[12], 0.27[12], 0.26[12], 0.26[12], 0.26[12]
$\text{Cu}_{33}\text{Zr}_{67}$	λ	0.6563	0.9775	1.0166	1.0384	0.7913	2.38	0.58[12], 0.54[12], 0.53[12], 0.52[12], 0.52[12]
	μ^*	0.1583	0.1728	0.1747	0.1751	0.1668		0.14[12], 0.14[12], 0.13[12], 0.13[12], 0.13[12]
	T_C (K)	3.9968	11.2589	12.0956	12.6138	6.8657		3.09[12], 2.39[12], 2.23[12], 2.19[12], 2.10[12]
	α	0.3383	0.3994	0.4025	0.4052	0.3689		0.35[12], 0.34[12], 0.35[12], 0.35[12], 0.35[12]
	N_0V	0.3119	0.4261	0.4375	0.4441	0.3633		0.29[12], 0.27[12], 0.27[12], 0.26[12], 0.26[12]
$\text{Cu}_{30}\text{Zr}_{70}$	λ	0.6699	0.9956	1.0352	1.0574	0.8065	2.78	0.47[12], 0.44[12], 0.43[12], 0.43[12], 0.42[12]
	μ^*	0.1576	0.1719	0.1738	0.1741	0.1659		0.14[12], 0.14[12], 0.13[12], 0.13[12], 0.13[12]
	T_C (K)	4.3398	11.7293	12.5718	13.0908	7.2781		2.53[12], 2.78[12], 2.60[12], 2.56[12], 2.46[12]
	α	0.3472	0.4038	0.4067	0.4092	0.3753		0.36[12], 0.35[12], 0.35[12], 0.35[12], 0.35[12]
	N_0V	0.3184	0.4324	0.4438	0.4503	0.3696		0.30[12], 0.28[12], 0.28[12], 0.27[12], 0.27[12]
$\text{Cu}_{25}\text{Zr}_{75}$	λ	0.6778	1.0021	1.0414	1.0634	0.8135	3.18	0.62[12], 0.58[12], 0.56[12], 0.55[12], 0.55[12]
	μ^*	0.1563	0.1703	0.1722	0.1726	0.1645		0.14[12], 0.14[12], 0.13[12], 0.13[12], 0.13[12]
	T_C (K)	4.5590	11.9088	12.7372	13.2491	7.4894		3.98[12], 3.18[12], 2.97[12], 2.92[12], 2.81[12]
	α	0.3542	0.4071	0.4098	0.4122	0.3802		0.37[12], 0.36[12], 0.36[12], 0.36[12], 0.36[12]
	N_0V	0.3227	0.4353	0.4465	0.4530	0.3731		0.31[12], 0.29[12], 0.28[12], 0.28[12], 0.28[12]

Результаты, полученные нами с помощью локально-полевой поправочной X-функции хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными [29] и теоретическими [9,12] данными. Экспериментальные данные по T_C для металлостекол $\text{Cu}_{57}\text{Zr}_{43}$ в литературе отсутствуют.

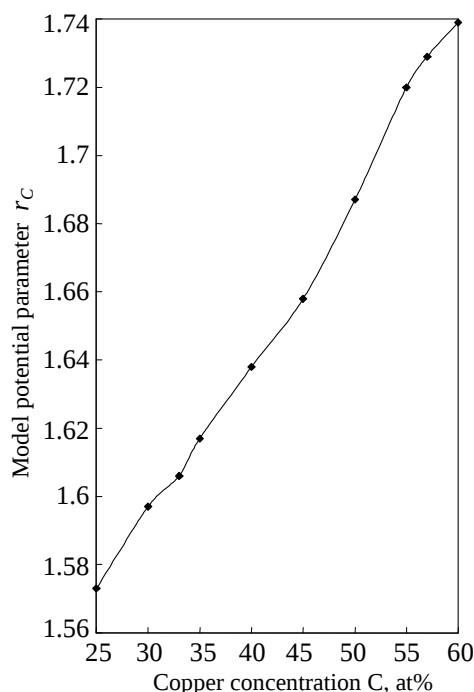


Рис.1. Зависимость параметра r_C модельного потенциала от концентрации меди.

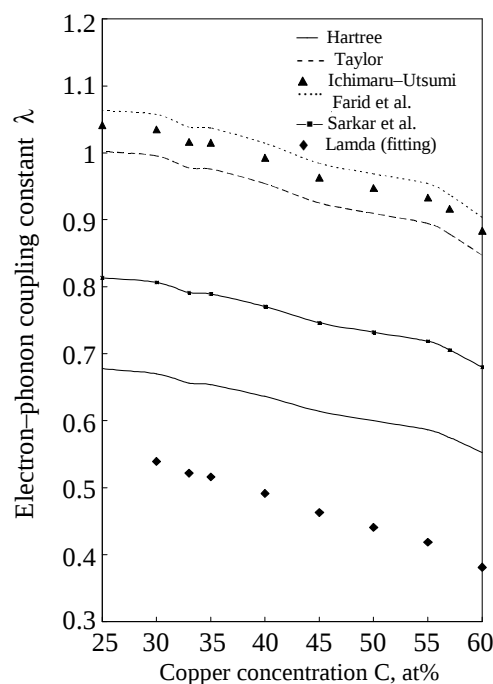


Рис.2. Изменение константы электрон-фононной связи λ с концентрацией меди.

Изменение расчетных величин температуры перехода T_C металлостекол $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$ с концентрацией меди при использовании пяти различных типов локально-полевых поправочных функций с ППЯ показано на рис.4. На графике приведены также экспериментальные значения Алтуняна и др. [29]. Видно, что T_C довольно чувствительна к выбору локально-полевой поправочной функции, а результаты по T_C с X-экранированием качественно согласуются с экспериментальными данными по исследуемым металлостеклам $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$, поскольку соответствующие кривые при X-экранировании почти полностью перекрываются с экспериментальными кривыми. Видно также, что экранирующая X-функция дает наименьшее, а Ф-функция – наибольшее значение T_C . Кроме того, график T_C спадает почти линейно с ростом концентрации меди. Зависимость от состава может быть описана линейной регрессией данных, полученных при X-экранировании для различных значений концентрации меди, откуда получаем

$$T_C (K) = -0.0818C + 6.717. \quad (14)$$

Подгоночный график этого уравнения приведен на рис.4, который показывает, что T_C спадает почти линейно с ростом содержания меди с наклоном $dT_C/dC = -0.0818$. Широкая экстраполяция дает $T_C = 6.717$ K в гипотетическом случае чистого аморфного циркония.

Линейная T_C формулы (14), полученная в настоящей работе, очень близка к линейным зависимостям

$$T_C (\text{K}) = -0.0893C + 5.35, \quad (15)$$

$$T_C (\text{K}) = -0.08369C + 5.1903, \quad (16)$$

предложенным Баконьи [30] и Шармой и др. [12] на основе экспериментальных и теоретических данных для системы $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$.

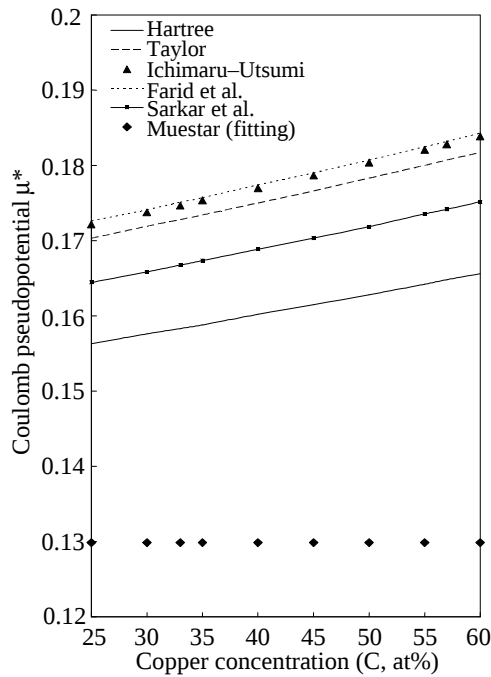


Рис.3. Изменение кулоновского псевдопотенциала μ^* с концентрацией меди.

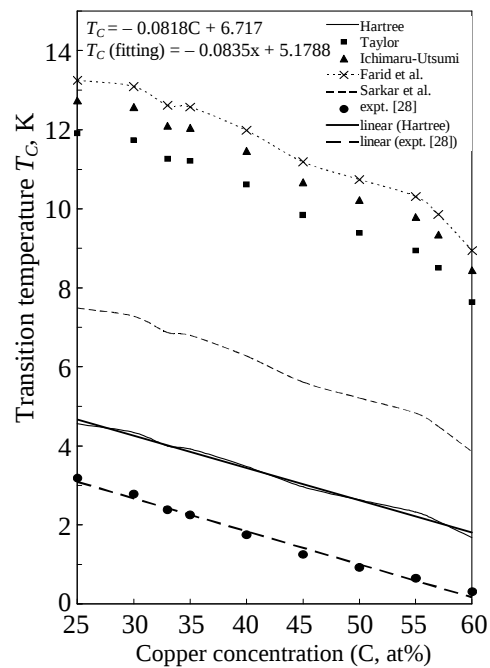


Рис.4. Изменение температуры перехода T_C с концентрацией меди.

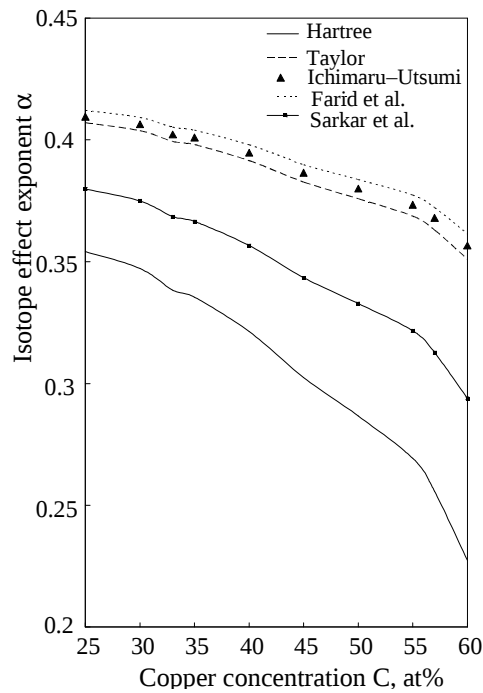


Рис.5. Изменение показателя изотопического эффекта α с концентрацией меди.

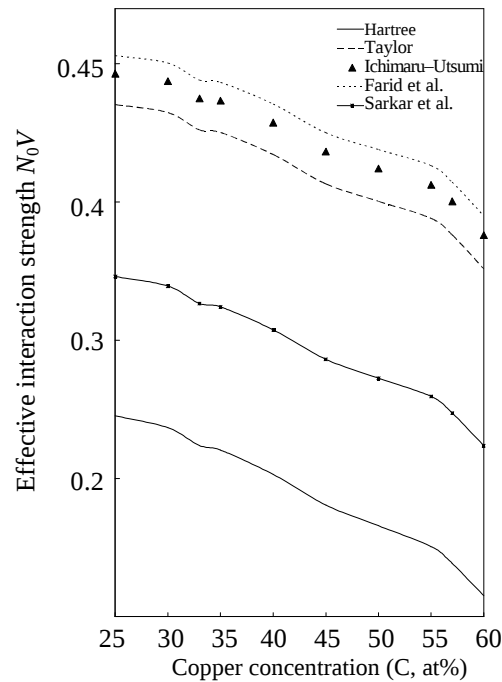


Рис.6. Изменение эффективной длины взаимодействия N_0V с концентрацией меди.

Нами проделаны также обратные вычисления для получения константы электрон-фононной связи λ через кулоновский псевдопотенциал μ^* и измеренную температуру перехода T_C для систем $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$. Сначала фиксируем $\mu^* \approx 0.13$ согласно Макмиллану [32], который предложил для переходных металлов подставлять измеренную температуру перехода T_C в формулу (11) и считать, что она дает правильное значение λ . Поведение подобранного таким образом значения λ согласуется с нашими вычислениями этой величины. Подгоночные значения константы λ электрон-фононной связи, кулоновского псевдопотенциала μ^* и измеренной температуры перехода T_C описываются рис.2–4. Результаты фитирования весьма благоприятны для большинства металлостекол. Зависимость от состава может быть описана линейной регрессией фитирования экспериментальных значений температуры перехода T_C для различных значений концентрации меди; эта зависимость также представлена на рис.4 и описывается формулой

$$T_C (\text{K}) = -0.0835C + 5.1788. \quad (17)$$

Это означает, что T_C почти линейно спадает с ростом содержания меди с наклоном $dT_C/dC = -0.0835$. Расширенная экстраполяция дает $T_C = 5.1788$ К. Наше линейное уравнение (14) очень близко к полученному фитированием на эксперимент линейному уравнению для температуры перехода T_C .

Вычисленные нами значения T_C находятся в области, которая пригодна при применениях металлостекол для линий передач без потерь в криогенной технике. Поскольку

металлостекла обладают хорошей упругостью и могут выполняться в виде проволок, они могут успешно применяться в сверхпроводящих линиях передач при температурах порядка 7 К.

Значения показателя изотопического эффекта α для металлостекол $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$ приведены в табл.2. Рис.5 демонстрирует изменение α с концентрацией меди; эта величина растет (с уменьшением концентрации циркония). Вычисленные значения показателя изотопического эффекта α проявляют слабую зависимость от диэлектрического экранирования; они минимальны для экранирующей X-функции и максимальны в случае Ф-функции. Отрицательное значение α наблюдается в случае металлостекол, что свидетельствует о том, что электрон-фононная связь в этих металлических комплексах не объясняет полностью все их свойства, связанные со сверхпроводящим поведением. Сравнение наших результатов с другими теоретическими данными [9,12] весьма обнадеживает. Поскольку экспериментальные значения α в литературе до сих пор не сообщались, значения, полученные нами, могут быть использованы для исследования колебаний ионов в сверхпроводимости аморфных веществ. Поскольку локально-полевая поправочная функция ИУ дает наилучшие результаты для λ и T_C , то можно считать, что величина α , полученная с таким экранированием, даст возможность наилучшим образом учесть роль колебаний ионов в сверхпроводящем поведении этих систем. Наиболее важная особенность, которую необходимо здесь отметить, это резкое уменьшение величины α с ростом концентрации меди.

Значения эффективной длины взаимодействия N_0V приведены в табл.2 и изображены на рис.6 для различных локально-полевых поправочных функций. Видно, что величина N_0V для исследуемых металлостекол лежит в области сверхпроводников со слабой связью. Величина N_0V также проявляет слабую зависимость от диэлектрического экранирования и имеет минимальное значение для экранирующей функции X и максимальное для функции Ф. Полученные здесь результаты находятся в качественном согласии с имеющимися теоретическими данными [9,12]. Изменение полученных значений N_0V показывает, что рассматриваемые металлостекла попадают в область сверхпроводников со слабой связью. В этом случае также величина N_0V убывает с ростом концентрации меди.

Воздействие локально-полевых поправочных функций играет важную роль в вычислении λ и μ^* , что приводит к сильным изменениям T_C , α и N_0V . Локально-полевые поправочные функции ИУ, Ф и С могут давать согласованные результаты при рассмотрении ССС бинарных металлостекол также, как и обычно используемые функции X и Т. Таким образом, использование этих, более перспективных, локально-полевых поправочных функций полностью установлено. Результаты вычислений α и N_0V не выявили каких-либо аномальных значений для металлостекол $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$.

Необходимо подчеркнуть важность использования точного вида псевдопотенциала. Надо признать, что, хотя эффект псевдопотенциала значителен также и в сверхпроводниках с сильной связью, однако он играет решающую роль в слабосвязанных сверхпроводниках, т.е. в веществах, пограничных между сверхпроводниками и несверхпроводниками. Другими словами, малые изменения электрон-ионного взаимодействия могут приводить к резким изменениям сверхпроводящих свойств рассматриваемого материала. В связи с этим надо учитывать важность точного вида псевдопотенциала.

4. Заключение

Подытоживая, можно утверждать, что локально-полевая поправочная функция X при использовании с модельным ППЯ дает наилучшее объяснение сверхпроводимости систем $\text{Cu}_x\text{Zr}_{100-x}$. Значения константы электрон-фононной связи λ и температуры перехода T_C проявляют существенную зависимость от вида локально-полевой поправочной функции, в то время как кулоновский псевдопотенциал μ^* , показатель изотопического эффекта α и эффективная длина взаимодействия N_0V слабо зависят от выбора этой функции. Величины λ , α и N_0V показывают, что металлостекла $\text{Cu}_x\text{Zr}_{100-x}$ попадают в область от слабых до промежуточных сверхпроводников. Поскольку экспериментальные данные по α и N_0V отсутствуют, вычисленные нами значения этих параметров можно рассматривать как надежные данные по металлостеклам, т.к. они находятся в пределах, получаемых из теории Элиасберга–Макмиллана. Линейный характер T_C показывает, что эта величина убывает с ростом содержания меди в металлостеклах $\text{Cu}_x\text{Zr}_{100-x}$, а полученное для T_C линейное уравнение оказывается в хорошем согласии с известными результатами Баконьи [30], полученными из экспериментальных данных. Можно также заключить, что металлостекла $\text{Cu}_x\text{Zr}_{100-x}$ являются хорошими сверхпроводниками. Сравнение вычисленных нами результатов по ССС металлостекла $\text{Cu}_x\text{Zr}_{100-x}$ с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными весьма благоприятно, что подтверждает применимость модельного ППЯ и различных видов локально-полевых поправочных функций. В настоящее время проводятся подобные исследования ССС других многокомпонентных металлостекел.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P.B.Allen**, in: C.P.Poole Jr. (Eds.), Handbook of Superconductivity, Academic Press, New York, 1999, p.478.
2. **A.V.Narlikar, S.N.Ekbote**. Superconductivity and Superconducting Materials. South Asian Publishers, New Delhi, 1983.
3. **S.V.Vonsovsky, Yu.A.Izyumov, E.Z.Kurmaev**. Superconductivity of Transition Metals, their Alloys and Compounds. Springer-Verlag, Berlin, 1982.
4. **A.M.Vora, M.H.Patel, P.N.Gajjar, A.R.Jani**. Pramana J. Phys., **58**, 849 (2002).
5. **P.N.Gajjar, A.M.Vora, M.H.Patel, A.R.Jani**. Int. J. Mod. Phys., **B17**, 6001 (2003).
6. **P.N.Gajjar, A.M.Vora, A.R.Jani**. Indian J. Phys., **78**, 775 (2004).
7. **A.M.Vora**. Physica, **C450**, 135 (2006).
8. **A.M.Vora, M.H.Patel, S.R.Mishra, P.N.Gajjar, A.R.Jani**. Solid State Physics, **44**, 345 (2001).
9. **P.N.Gajjar, A.M.Vora, A.R.Jani**. Mod. Phys. Lett., **B18**, 573 (2004).
10. **S.Sharma, K.S.Sharma, H.Khan**. Czech J. Phys., **55**, 1005 (2005).
11. **S.Sharma, K.S.Sharma, H.Khan**. Supercond. Sci. Technol., **17**, 474 (2004).
12. **S.Sharma, H.Khan, K.S.Sharma**. Phys. Stat. Sol. (b), **241**, 2526 (2004).
13. **S.Sharma, H.Khan**. Solid State Physics, **46**, 635 (2003).
14. **S.Sharma, H.Khan, K.S.Sharma**. Ind. J. Pure & Appl. Phys., **41**, 301 (2003).
15. **M.Gupta, P.C.Agarwal, K.S.Sharma, L.Dass**. Phys. Stat. Sol. (b), **211**, 731 (1999).
16. **K.S.Sharma, R.Sharma, M.Gupta, P.C.Agarwal, L.Dass**, in: Saksena et al. (Eds.). The Physics of Disordered Materials. NISCOM, New Delhi, 1997, p.95.
17. **P.C.Agarwal, M.Gupta, K.S.Sharma, L.Dass**, in: Saksena et al. (Eds.). The Physics of Disordered Materials. NISCOM, New Delhi, 1997, p.102.
18. **M.Gupta, K.S.Sharma, L.Dass**. Pramana J. Phys., **48**, 923 (1997).

19. **R.Sharma, K.S.Sharma.** Supercond. Sci. Technol., **10**, 557 (1997).
20. **N.W.Ashcroft.** Phys. Lett., **23**, 48 (1966).
21. **K.S.Sharma, C.M.Kachhava.** Solid State Commun., **30**, 749 (1979).
22. **V.Veljkovic, I.Slavic.** Phys. Rev., Lett., **29**, 105 (1972).
23. **W.A.Harrison.** Pseudopotentials in the Theory of Metals. New York, Benjamin, 1966.
24. **R.Taylor.** J. Phys. F: Met. Phys., **8**, 1699 (1978).
25. **S.Ichimaru, K.Utsumi.** Phys. Rev., **B24**, 3220 (1981).
26. **B.Farid, V.Heine, G.E.Engel, I.J.Robertson.** Phys. Rev., **B48**, 11602 (1993).
27. **A.Sarkar, D.S.Sen, S.Haldar, D.Roy.** Mod. Phys. Lett., **B12**, 639 (1998).
28. **Y.P.Krasny, N.P.Kovalenko, V.A.Tesis.** J. Non-Cryst. Solids, **205-207**, 669 (1996).
29. **Z.Altounian, J.O.Strom-Olsen.** Phys. Rev., **B27**, 4149 (1983).
30. **I.Bakonyi.** J. Non-Cryst. Solids, **180**, 131 (1995).
31. **G.Von Minnigerode, K.Samwer.** Physica, **B108**, 1217 (1981).
32. **W.L.Mcmillan.** Phys. Rev., **167**, 331 (1968).

A PSEUDOPOTENTIAL APPROACH TO THE SUPERCONDUCTING STATE PROPERTIES OF $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$ BINARY METALLIC GLASSES

A.M. VORA

The theoretical investigation of the superconducting state properties viz. the electron-phonon coupling constant λ , Coulomb pseudopotential μ^* , transition temperature T_C , isotope effect exponent α and effective interaction strength N_0V of ten binary $\text{Cu}_C\text{Zr}_{100-C}$ ($C=25-60$ at%) metallic glasses is reported, using Ashcroft's empty core (EMC) model potential. Five local field correction functions proposed by Hartree (H), Taylor (T), Ichimaru-Utsumi (IU), Farid et al. (F) and Sarkar et al. (S) are used to study the screening influence on the aforesaid properties. It is shown that the electron-phonon coupling strength λ and the transition temperature T_C are quite sensitive to the selection of the local-field correction functions, whereas the Coulomb pseudopotential μ^* , isotope effect exponent α and effective interaction strength N_0V show a weak dependence on the local field correction functions. The values of T_C obtained from the H-local-field correction function are found to be in qualitative agreement with available theoretical or experimental data and show almost linear behavior with respect to the concentration C of Cu. The obtained results are shown to be in good agreement with other available theoretical or experimental data and confirm the existence of the superconducting phase in the metallic glasses.