

05.4

Параметры сверхпроводящего состояния сплавов Pb—Ti—Bi

© Aditya M. Vora

Parmeshwari 165, Vijaynagar Area, Hospital Road,
Bhuj-Kutch, 370 001, Gujarat, India

Поступило в Редакцию 14 января 2008 г.

Впервые проведено подробное теоретическое исследование с использованием формализма модельного потенциала параметров сверхпроводящего состояния (ПСС), таких как константа электрон-фононного взаимодействия λ , кулоновский псевдопотенциал μ^* , температура сверхпроводящего перехода T_C , показатель изотопического эффекта α и эффективный параметр электрон-электронного взаимодействия N_0V , для сплавов Pb—Ti—Bi составов $\text{Ti}_{0.90}\text{Bi}_{0.10}$, $\text{Pb}_{0.40}\text{Ti}_{0.60}$, $\text{Pb}_{0.60}\text{Ti}_{0.40}$, $\text{Pb}_{0.80}\text{Ti}_{0.20}$, $\text{Pb}_{0.60}\text{Ti}_{0.20}\text{Bi}_{0.20}$, $\text{Pb}_{0.90}\text{Bi}_{0.10}$, $\text{Pb}_{0.80}\text{Bi}_{0.20}$, $\text{Pb}_{0.70}\text{Bi}_{0.30}$, $\text{Pb}_{0.65}\text{Bi}_{0.35}$ и $\text{Pb}_{0.45}\text{Bi}_{0.55}$. Обнаружено заметное влияние различных обменных и корреляционных функций на λ и μ^* . Полученные величины ПСС находятся в качественном согласии с имеющимися экспериментальными данными.

PACS: 61.43.Dq, 71.15.Dx, 74.20.-z, 74.70.Ad

Существуют лишь немногие и разрозненные попытки изучения параметров сверхпроводящего состояния бинарных сплавов при помощи модельного потенциала [1–5]. Поэтому мы решили произвести исследование параметров сверхпроводящего состояния сплавов $\text{Ti}_{0.90}\text{Bi}_{0.10}$, $\text{Pb}_{0.40}\text{Ti}_{0.60}$, $\text{Pb}_{0.60}\text{Ti}_{0.40}$, $\text{Pb}_{0.80}\text{Ti}_{0.20}$, $\text{Pb}_{0.60}\text{Ti}_{0.20}\text{Bi}_{0.20}$, $\text{Pb}_{0.90}\text{Bi}_{0.10}$, $\text{Pb}_{0.80}\text{Bi}_{0.20}$, $\text{Pb}_{0.70}\text{Bi}_{0.30}$, $\text{Pb}_{0.65}\text{Bi}_{0.35}$ и $\text{Pb}_{0.45}\text{Bi}_{0.55}$ на основе широко известного модельного потенциала Ашкрофта (empty core, EMC) [6]. Мы использовали пять разных видов функции коррекции локального поля, предложенных Хартри (H) [1–5], Тейлором (T) [1–5], Ичимару и Уцуми (IU) [1–5], Фаридом с соавторами (F) [1–5] и Саркарсом с соавторами (S) [1–5] для учета влияния обмена и корреляций на вышеупомянутые свойства. Для нахождения константы электрон-фононного взаимодействия λ , кулоновского псевдопотенциала μ^* , температуры сверхпроводящего перехода T_C , показателя изотопического эффекта α и эффективного параметра электрон-электронного

взаимодействия N_0V (N_0 — плотность состояний на уровне Ферми, V — матричный элемент электрон-электронного взаимодействия) мы обобщили способ, примененный Макмилланом для металлов [1–5,7].

Для вычисления λ , μ^* , T_C , α и N_0V использовались следующие выражения [1–5,7]:

$$\lambda = \frac{12m_0Z}{M\langle\omega^2\rangle} \int_0^1 X^3 |W(X)|^2 dX, \quad (1)$$

$$\mu^* = \left[\frac{m_b}{\pi k_F} \int_0^1 \frac{dx}{X\varepsilon(X)} \right] / \left[1 + \frac{m_b}{\pi k_F} \ln \left(\frac{E_F}{10\theta_D} \right) \int_0^1 \frac{dx}{X\varepsilon(X)} \right], \quad (2)$$

$$T_C = \frac{\theta_D}{1.45} \exp \left[\frac{-1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^*(1+0.62\lambda)} \right], \quad (3)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \left[1 - \left(\mu^* \ln \left(\frac{\theta_D}{1.45T_C} \right) \right)^2 \frac{1+0.62\lambda}{1.04(1+\lambda)} \right], \quad (4)$$

$$N_0V = [\lambda - \mu^*] / \left[1 + \frac{10}{11} \lambda \right]. \quad (5)$$

Здесь Z — валентность, m_b — зонная масса, M — масса иона, k_F — волновой вектор Ферми, а $\langle\omega^2\rangle$ — средний квадрат частоты фононов, который вычисляется при помощи полученного Батлером [8] соотношения $\langle\omega^2\rangle^{1/2} = 0.69\theta_D$, где θ_D — температура Дебая для сплавов Pb–Tl–Bi. Широко известный модельный экранировочный потенциал Ашкрофта [6], используемый в настоящих вычислениях ПСС сплавов Pb–Tl–Bi, имеет форму

$$W(X) = \frac{-\pi Z}{\Omega_0 X^2 k_F^2 \varepsilon(X)} \cos(2k_F X r_C), \quad (6)$$

где Ω_0 — атомный объем, r_C — параметр модельного потенциала для сплавов Pb–Tl–Bi, а $\varepsilon(X)$ — модифицированная диэлектрическая функция Хартри, записываемая как [3–9]

$$\varepsilon(X) = 1 + (\varepsilon_H(X) - 1)(1 - f(X)). \quad (7)$$

$\varepsilon_H(X)$ — статическая диэлектрическая функция Хартри [3–9], а $f(X)$ — функция коррекции локального поля. В настоящем исследовании рассматриваются функции коррекции локального поля H, T, U, F и S и описываемые ими обменные и корреляционные эффекты.

Параметры сверхпроводящего состояния сплавов Pb–Tl–Bi

Сплавы	ПСС	Настоящие результаты					Эксперимент [9]
		H	T	IU	F	S	
Tl _{0.90} Bi _{0.10}	λ	0.7123	1.0067	1.0621	1.0650	0.9012	0.78
	μ^*	0.1195	0.1288	0.1300	0.1303	0.1252	
	T_C, K	2.3011	4.5437	4.9372	4.9540	3.7799	2.30
	α	0.4372	0.4558	0.4580	0.4580	0.4515	
	N_0V	0.3598	0.4584	0.4742	0.4749	0.4265	
Pb _{0.40} Tl _{0.60}	λ	0.9788	1.3999	1.4795	1.4859	1.2374	1.15
	μ^*	0.1185	0.1276	0.1288	0.1290	0.1241	
	T_C, K	4.6004	7.2982	7.7222	7.7522	6.3648	4.60
	α	0.4627	0.4719	0.4730	0.4730	0.4695	
	N_0V	0.4553	0.5599	0.5760	0.5772	0.5239	
Pb _{0.60} Tl _{0.40}	λ	1.1317	1.6220	1.7141	1.7226	1.4269	1.38
	μ^*	0.1179	0.1269	0.1281	0.1283	0.1234	
	T_C, K	5.9021	8.6916	9.1119	9.1465	7.7143	5.90
	α	0.4697	0.4764	0.4773	0.4773	0.4746	
	N_0V	0.4997	0.6042	0.6199	0.6213	0.5674	
Pb _{0.80} Tl _{0.20}	λ	0.2398	1.7739	1.8738	1.8834	1.5581	1.53
	μ^*	0.1174	0.1263	0.1275	0.1277	0.1228	
	T_C, K	6.8014	9.6015	10.0139	10.0497	8.6140	6.80
	α	0.4733	0.4788	0.4794	0.4795	0.4772	
	N_0V	0.5277	0.6306	0.6460	0.6473	0.5940	
Pb _{0.60} Tl _{0.20} Bi _{0.20}	λ	0.8677	1.2976	1.3726	1.3888	1.0909	1.81
	μ^*	0.1276	0.1382	0.1396	0.1398	0.1340	
	T_C, K	7.2606	13.4096	14.3079	14.4995	10.6459	7.26
	α	0.4460	0.4625	0.4641	0.4645	0.4564	
	N_0V	0.4137	0.5319	0.5485	0.5520	0.4804	
Pb _{0.90} Bi _{0.10}	λ	1.3151	1.8770	1.9815	1.9919	1.6465	1.66
	μ^*	0.1172	0.1260	0.1272	0.1274	0.1225	
	T_C, K	7.6521	10.5294	10.9469	10.9849	9.5032	7.65
	α	0.4753	0.4800	0.4806	0.4806	0.4787	
	N_0V	0.5456	0.6470	0.6619	0.6633	0.6104	
Pb _{0.80} Bi _{0.20}	λ	1.3335	1.9055	2.0117	2.0228	1.6688	1.88
	μ^*	0.1174	0.1262	0.1274	0.1276	0.1228	
	T_C, K	7.9501	10.8947	11.3199	11.3602	9.8361	7.95
	α	0.4756	0.4802	0.4808	0.4808	0.4789	
	N_0V	0.5497	0.6512	0.6661	0.6676	0.6142	

Продолжение таблицы

Сплавы	ПСС	Настоящие результаты					Эксперимент [9]
		H	T	IU	F	S	
Pb _{0.70} Bi _{0.30}	λ	1.3809	1.9782	2.0888	2.1011	1.7277	2.01
	μ^*	0.1176	0.1265	0.1277	0.1279	0.1230	
	T_C, K	8.4518	11.4578	11.8872	11.9309	10.3650	8.45
	α	0.4765	0.4808	0.4814	0.4814	0.4795	
	N_0V	0.5601	0.6617	0.6765	0.6781	0.6243	
Pb _{0.65} Bi _{0.35}	λ	1.4418	2.0711	2.1875	2.2012	1.8039	2.13
	μ^*	0.1177	0.1266	0.1278	0.1280	0.1231	
	T_C, K	8.9511	11.9763	12.4032	12.4496	10.8663	8.95
	α	0.4776	0.4816	0.4821	0.4821	0.4804	
	N_0V	0.5730	0.6745	0.6892	0.6908	0.6367	
α Pb _{0.45} Bi _{0.55}	λ	1.1426	1.6289	1.7195	1.7281	1.4315	2.59
	μ^*	0.1188	0.1278	0.1291	0.1293	0.1243	
	T_C, K	7.0042	10.2267	10.7090	10.7508	9.0714	7.0
	α	0.4696	0.4761	0.4769	0.4770	0.4743	
	N_0V	0.5022	0.6051	0.6205	0.6219	0.5680	

Исходные параметры и константы, использованные в данном исследовании для чистых металлов, взяты из литературы [1–5]. В таблице указаны вычисленные значения параметров сверхпроводящего состояния наряду с экспериментальными данными [9]. Видно, что среди пяти экранировочных функций, использованных при вычислениях, экранировочная функция H (статическая — без обмена и корреляции) дает минимальное значение параметров сверхпроводящего состояния (ПСС), в то время как экранировочная функция F дает максимальное значение. Результаты вычисления для функций коррекции локального поля T, IU и S находятся между значениями, полученными для этих двух экранировочных функций. Эти функции коррекции локального поля дают согласующиеся результаты для ПСС сплавов Pb–Tl–Bi. Оказывается, что численные значения вышеперечисленных свойств весьма чувствительны к выбору функции коррекции локального поля и демонстрируют существенное изменение при смене функции. При уменьшении концентрации таллия от 0.60 до 0.20 λ увеличивается

от 0.9788 до 1.8834; при увеличении концентрации висмута, за исключением случая сплавов $\alpha\text{Pb}_{0.45}\text{Bi}_{0.55}$, λ также увеличивается. Увеличение λ демонстрирует постепенный переход от слабой связи к средней связи электронов и фононов, причиной чего может являться увеличение степени $sp-d$ -гибридизации электронов. По отношению к статической диэлектрической функции N влияние выбора различных функций коррекции локального поля на величину λ составляет 25.14–52.67%. Влияние этого выбора на величину μ^* находится в пределах 4.59–9.56%. Эти изменения λ и μ^* приводят к резким вариациям T_C , α и N_0V . Значение μ^* , описывающее кулоновское взаимодействие между электронами проводимости, лежит между 0.11 и 0.14, что находится в согласии с результатом Макмиллана [7]. Результаты вычислений температуры перехода T_C для сплавов Pb-Tl-Bi отличаются от экспериментальных значений [9] на 0.115%. Вычисленные значения α демонстрируют слабую зависимость от диэлектрического экранирования. Поскольку в литературе еще не приводились экспериментальные значения α , данные результаты могут быть использованы для изучения роли колебаний ионов в сверхпроводимости сплавов. Также видно, что величина N_0V лежит в диапазоне, характерном для сверхпроводников со слабой связью, а также демонстрирует незначительную зависимость от диэлектрического экранирования.

Значения λ и T_C заметно зависят от функции коррекции локального поля, в то время как для μ^* , α и N_0V наблюдается слабая зависимость. Величина λ , α и N_0V показывает, что сплавы Pb-Tl-Bi являются сверхпроводниками со слабой или средней связью. В отсутствие экспериментальных данных по ПСС вычисленные в настоящей работе значения этих параметров могут считаться надежными, поскольку лежат в теоретических пределах приближения Элиашберга–Макмиллана [7].

Сравнение вычисленных в настоящей работе результатов с имеющимися экспериментальными данными для сплавов Pb-Tl-Bi очень обнадеживает и подтверждает применимость формализма модельного потенциала. Для большинства сплавов Pb-Tl-Bi теоретические значения ПСС не известны, поэтому сложно сделать какие-либо конкретные выводы. Однако сравнение с другими подобными теоретическими данными свидетельствует в пользу настоящих расчетов ПСС. В настоящее время ведется аналогичное исследование ПСС других бинарных и многокомпонентных сплавов, а также металлических стекол.

Список литературы

- [1] *Aditya M. Vora* // Physica C. 2006. V. 450. P. 135; Physica C. 2007. V. 458. P. 21, 43.
- [2] *Aditya M. Vora* // J. Supercond. Novel. Magn. 2007. V. 20. P. 355, 373, 387; Phys. Scr. 2007. V. 76. P. 204; J. Optoelec. Adv. Mater. 2007. V. 9. P. 2498.
- [3] *Aditya M. Vora* // Comp. Mater. Sci. 2007. V. 40. P. 492; Chinese Phys. Lett. 2007. V. 24. P. 2624.
- [4] *Vora A.M., Patel M.H., Gajjar P.N., Jani A.R.* // Pramana-J. Phys. 2002. V. 58. P. 849.
- [5] *Gajjar P.N., Vora A.M., Patel M.H., Jani A.R.* // Int. J. Mod. Phys. B. 2003. V. 17. P. 6001.
- [6] *Ashcroft N.W.* // Phys. Lett. 1966. V. 23. P. 48.
- [7] *McMillan W.L.* // Phys. Rev. 1968. V. 167. P. 331.
- [8] *Butler W.H.* // Phys. Rev. 1977. V. 15. P. 5267.
- [9] *Allen P.B. and Dynes R.C.* // Phys. Rev. 1975. V. 12. P. 905.