

## ВПЛИВ ПРИФЕРМІЙСЬКОЇ СТРУКТУРИ ГУСТИНИ СТАНІВ НА НОРМАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ НАДПРОВІДНИКА $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

О. Й. Бабич, Р. В. Луців

*Львівський національний університет імені Івана Франка,  
кафедра радіоелектронного матеріалознавства,  
бул. Драгоманова, 50, Львів, 79005, Україна*

(Отримано 20 листопада 2000 р.; в остаточному вигляді — 22 травня 2001 р.)

Проведено розрахунок температурних залежностей коефіцієнта термо-е.р.с., магнетної сприйнятливості, електронної теплоємності й електропровідності високотемпературного надпровідника  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  на основі густини станів  $g(E)$ , обчисленої в зонній теорії, а також дещо модифікованої в ділянці  $E_F$ . Отримано добре узгодження з результатами експериментальних досліджень при  $T > T_C$ .

**Ключові слова:** високотемпературна надпровідність, густина станів, коефіцієнт термо-е.р.с., електронна теплоємність, магнетна сприйнятливість.

PACS number(s): 74.25Fy; 74.62.Dh; 74.72.Jt.

Наведені в літературі результати розрахунків кричих залежності густини станів від енергії  $g(E)$  для високотемпературних надпровідників (ВТНП) можуть відрізнятися в ділянці енергії Фермі  $E_F$  величиною й енергетичним положенням наявного там піка. Тому важливою є кількісна оцінка точності цих розрахунків. Розв'язання проблеми пов'язано, з одного боку, з повнішим і детальнішим порівнянням результатів зонної теорії з відповідними експериментами, а з другого — з урахуванням впливу кореляційних ефектів.

Відомо, що характер електропереносу визначається властивостями носіїв у деякому температурному інтервалі біля  $E_F$ . Якщо в системі в прифермійській ділянці енергетичного спектра виникає тонка структура густини станів, то це особливо виявляється на таких низькоенергетичних характеристиках, як термо-е.р.с., паулівська магнетна сприйнятливість, електронна теплоємність, електропровідність. Вирази для  $\alpha(T)$ ,  $\chi_p(T)$ ,  $C_e(T)$ ,  $\sigma(T)$  можна записати у вигляді:

$$\alpha(T) = \frac{k_B}{eT} \frac{I_1}{I_0}, \quad (1)$$

де

$$I_1 = \int \sigma_E \left( -\frac{df}{dE} \right) (E - E_F) dE, \\ I_0 = \int \sigma_E \left( -\frac{df}{dE} \right) dE, \\ \chi_p(T) = \mu_B^2 \int g(E) \left( -\frac{df}{dE} \right) dE, \quad (2)$$

$$C_e(T) = \frac{d}{dT} \int (E - E_F) g(E) f(E - E_F) dE, \quad (3)$$

$$\sigma(T) = e^2 \int \sigma_E \left( -\frac{df}{dE} \right) dE, \quad (4)$$

де  $e$  — заряд електрона,  $k_B$  — постійна Больцмана,  $\mu_B$  — магнетон Бора,  $f(E - E_F)$  — функція розподілу Фермі,  $\sigma_E$  — провідність при  $T \rightarrow 0$ , чутлива до тонкої структури густини станів біля  $E_F$ .

У літературі існує багато спроб установити взаємозв'язок між експериментальними даними з нормальними властивостями ( $\alpha(T)$ ,  $\chi(T)$ ,  $C_e(T)$ ) ВТНП і модельними чи розрахунковими густинами станів  $g(E)$  в ділянці  $E_F$  [1–3]. Згідно з зонними розрахунками, рівень Фермі оксидів La–Ba–Cu–O, Y–Ba–Cu–O, Hg–Ba–Cu–O та інших знаходиться поблизу вузького піка густини станів, утворених перекріттям  $p$ - і  $d$ -зон. У праці [1] в рамках такої зонної схеми показано якісно інтерпретацію температурних залежностей термо-е.р.с.  $\alpha$ , питомого опору  $\rho$ , магнетної сприйнятливості  $\chi$  керамік La–Ba–Cu–O, La–Sr–Cu–O, Y–Ba–Cu–O. При варіації ширини піка і його положення щодо рівня Фермі авторам вдається пояснити різноманітний характер цих залежностей і деякі експериментальні особливості на дуже небагаточисельних і, можливо, неоднофазних зразках. У [2] поведінку кінетичних коефіцієнтів інтерпретують у спрощеній моделі, коли залежності  $g(E)$  апроксимуються прямокутниками різної ширини і записуються аналітичні вирази для  $\alpha(T)$  і  $\rho(T)$ . Однак при цьому не використовують конкретних зонних густин станів для оксидів. У [3] наведено розрахунок термо-е.р.с., магнетної сприйнятливості й електронної теплоємності надпровідника  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  у нормальному стані з урахуванням зонних густин станів. Використані дані з  $g(E)$  не дали зможи отримати одночасне узгодження залежностей  $\alpha(T)$ ,  $\chi(T)$  і  $C_e(T)$  з експериментально спостережуваними. Можна зробити висновок про можливу неадекватність кривих  $g(E)$  або досить великий вплив інших механізмів на

електронні властивості.

У контексті розв'язання згаданих вище проблем був проведений розрахунок термо-е.р.с., магнетної сприйнятливості, електронної теплоємності й електропровідності ВТНП  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  при  $T > T_C$  з використанням зонних густин станів, які ми отримали за методом ЛМТО, що в ділянці  $E_F$  добре узгоджується з результатами, наведеними в [4] (рис. 1).

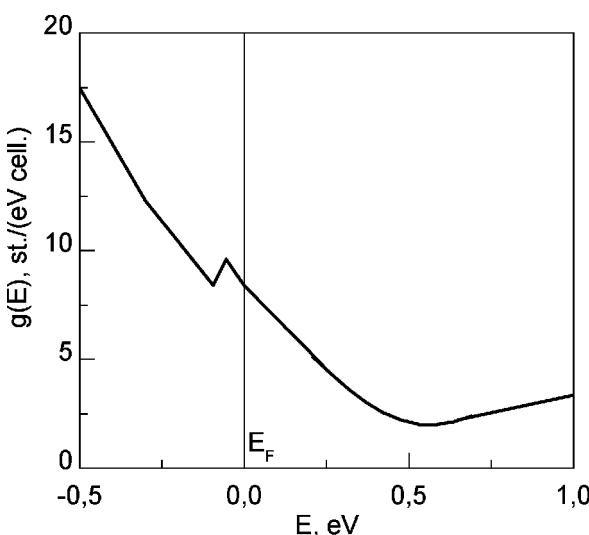


Рис. 1. Густина станів ВТНП  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  в ділянці  $E_F$  за даними [4].

Експериментальні температурні залежності коефіцієнта термо-е.р.с.  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  мають аномальний, відмінний від лінійного, характер: при збільшенні  $\Delta E$  величина  $\alpha$  зростає і на залежності  $\alpha(T)$  з'являється характерний максимум, який зсувається в ділянку нижчих температур. При  $\delta \rightarrow 0$  коефіцієнт термо-е.р.с. слабо змінюється з температурою [5]. Аналогічні аномалії властиві багатьом металам на основі  $3d$ - $4f$ -перехідних елементів [6,7], а також надпровідникам зі структурою A15 [8].

Обчислення  $\alpha(T)$  проводили за формулою (1) для двох випадків:  $\sigma_E \sim g^{-1}(E)$  (модель Мотта — достатньо слабке розсіювання, пов'язане, в основному, з переходами з  $p$ - в  $d$ -стані) і  $\sigma_E \sim g^2(E)$  (загальніший випадок сильного розсіювання). При цьому монотонний ріст коефіцієнта термо-е.р.с., від'ємного в першому випадку і додатного в другому, не корелює з експериментальними даними. Урахування неточності визначення в зонній теорії положення рівня Фермі його зміщенням до вершини піка  $g(E)$  в інтервалі  $\Delta E \sim 0.04$  eV також не приводить до узгодженості з експериментом. Швидке зростання абсолютних значень  $\alpha(T)$  зберігається до високих температур (рис. 2).

Можливим поясненням аномалій  $\alpha(T)$  може бути зміна механізму розсіювання з температурою. Близ-

ьку до експериментальної залежність коефіцієнта термо-е.р.с. можна отримати, прийнявши, що в ділянці високих температур основний внесок в  $\alpha$  зв'язаний з розсіюванням, при якому  $\sigma_E \sim g^{-1}(E)$ , а з переходом до низьких температур —  $\sigma_E \sim g^2(E)$ . Однак парамагнетна сприйнятливість  $\chi_p(T)$ , обчислена з використанням (2) при  $T > T_C$ , хоч і має слабку температурну залежність, як і на експерименті [9], за значеннями занижена (рис. 3а,1).

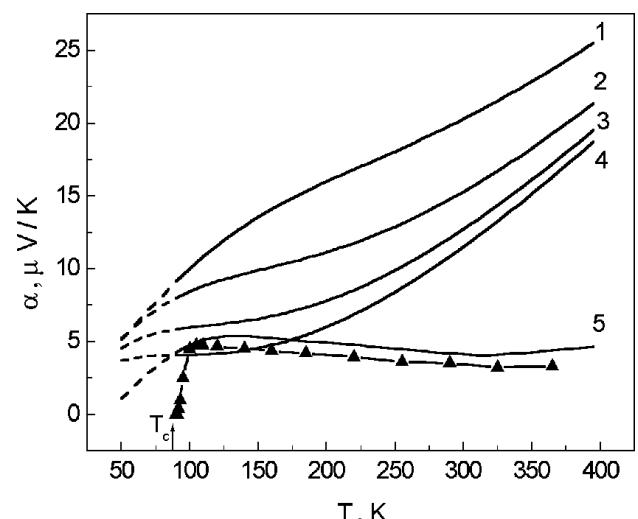


Рис. 2. Температурні залежності коефіцієнта термо-е.р.с.  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ , розраховані для  $\sigma_E \sim g^2(E)$  при зміні положення  $E_F$  в напрямку до вершини піка:  $\Delta E_F = 0$  (крива 1), 0.02 (крива 2), 0.03 (крива 3), 0.04 eV (крива 4) та при деякому його підсиленні (на 40%,  $\Delta E_F = 0.02$ ) (крива 5), ▲ — експеримент. Штрихом нижче  $T_c$  зображені результати розрахунку при відсутності надпровідності.

У праці [9] для зразка найближчого до стехіометричного складу при оцінці електронної складової теплоємності  $C_e$  за величиною стрибка  $\Delta C(T = T_C)$  було отримано значення коефіцієнта електронної теплоємності  $\gamma \approx 33$  мДж/(моль·К<sup>2</sup>). Розрахунок  $C_e$  за формулою (3) дає нижчі значення і для  $\gamma$  (рис. 3б,1).

Порівняння експериментальних даних для  $\chi_p(T)$ ,  $\gamma$  з розрахунковими підказує думку, що зонні густини станів  $g(E)$  біля  $E_F$  (рис. 1) дещо заниженні. При деякому підсиленні піка  $g(E)$  (на 40%) у вузькій приферміевській ділянці  $\Delta E < 0.1$  eV обчислені  $\alpha(T)$ ,  $\chi_p(T)$ ,  $\gamma$  для  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  в нормальному стані добре узгоджуються з даними, отриманими експериментально (рис. 2, рис. 3.). Таке підсилення може бути викликане кореляційними ефектами, яких не враховує зонна теорія в одноелектронному наближенні. При цьому для  $\sigma_E$  слід використовувати загальнішу залежність на основі формули Кубо-Грінвуда  $\sigma_E \sim g^2(E)$  (для матеріалів з низькою провідністю).

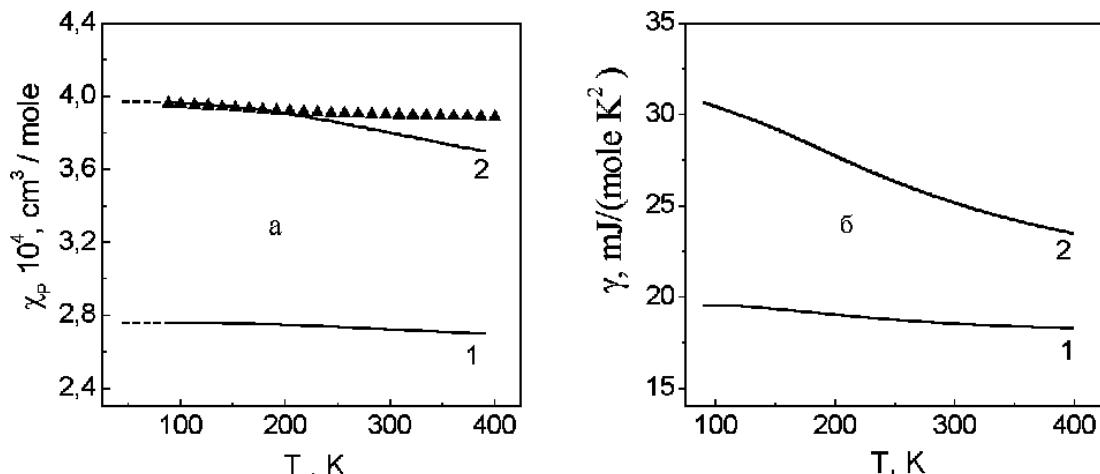


Рис. 3. Магнетна сприйнятливість (а) і коефіцієнт електронної теплоємності (б)  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ , розраховані за даними для зонної густини станів  $g(E)$  (крива 1) та дещо підсиленого піка в ділянці  $E_F$  (на 40%) (крива 2),  $\blacktriangle$  — експеримент.

Електропровідність розрахована з використанням (4) у такій моделі лінійно спадає при  $T > T_C$ , що корелює з експериментальними залежностями. Невідповідність чисельних значень може бути пов'язана зі суттєвим внеском тут, на відміну від термо-е.р.с., й

інших механізмів розсіювання.

Отже, використання експериментальних даних з температурних залежностей для  $\alpha$ ,  $\chi$ ,  $\gamma$  дає змогу встановлювати адекватність кривих  $g(E)$  і можливу їх корекцію в деякому інтервалі енергії поблизу  $E_F$ .

- 
- [1] В. Н. Цидильковский, Н. М. Цидильковский, Физ. мет. металлов. **65**, 83 (1988).
  - [2] С. А. Казьминн, В. И. Кайданов, Г. Лейсинг, Физ. тверд. тела **30**, 2655 (1988).
  - [3] А. А. Сивенцев, Ю. П. Ирхин, Е. В. Розенфельд, Физ. тверд. тела **31**, 133 (1989).
  - [4] L. F. Mattheiss, D. R. Hamann, Solid State Commun. **63**, 395 (1987).
  - [5] S. Yan, Li. Lu Qi, Solid State Commun. **65**, 355 (1988).
  - [6] В. А. Матвеев, Г. В. Федоров, Н. В. Волькенштейн, Журн. эксп. теор. физ. **85**, 561 (1983).
  - [7] М. Д. Котерлин, О. И. Бабич, Р. В. Луцив, препринт ИТФ-86-11Р (Киев, 1986).
  - [8] П. Тестарди, М. Вегер, И. Гольдберг, *Сверхпроводящие соединения со структурой β-вольфрама* (Мир, Москва, 1977).
  - [9] A. Junod, A. Bezingé, J. Muller, Physica C **152**, 50 (1988).

#### THE INFLUENCE OF NEAR FERMI LEVELS STRUCTURE OF STATES DENSITY ON NORMAL PROPERTIES OF THE $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ SUPERCONDUCTOR

O. J. Babych, R. V. Lutciv

*Ivan Franko National University of Lviv, Chair of Radioelectronic Materials Science,  
50 Dragomanov Str., Lviv, UA-79005, Ukraine*

The calculation of temperature dependence of thermopower, magnetic susceptibility, electron heat capacity and electroconductivity of a high-temperature  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  superconductor has been conducted using states density  $g(E)$  in compliance with the band theory and somewhat modified near  $E_F$ . We have received a good agreement between the calculated and experimental data at the temperatures  $T > T_C$ .