ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 5, № 1 (2001) с. 46–48

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 5, No. 1 (2001) p. 46–48

ВПЛИВ ПРИФЕРМІЇВСЬКОЇ СТРУКТУРИ ГУСТИНИ СТАНІВ НА НОРМАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ НАДПРОВІДНИКА $YBa_2Cu_3O_7$

О. Й. Бабич, Р. В. Луців
Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра радіоелектронного матеріялознавства,
вул. 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 сприйнятливости, електронної теплоємности й електропровідности високотемпературного надпровідника $YBa_2Cu_3O_7$ на основі густини станів $g(E)$, обчисленої в зонній теорії, а також дещо модифіковананої 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 кривих залежности густини станів від енерґії $g(E)$ для високотемпературних надпровідників (ВТНП) можуть відрізнятися в ділянці енерґії Фермі E_F величиною й енерґетичним положенням наявного там піка. Тому важливою є кількісна оцінка точности 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 прифермієвській ділянці енерґетичного спектра виникає тонка структура густини станів, то це особливо виявляється на таких низькоенерґетичних характеристиках, як термо-е.р.с., паулівська магнетна сприйнятливість, електронна теплоємність, електропровідність. Вирази для $\alpha(T)$, χ_p(T), $C_e(T)$, $\sigma(T)$ можна записати у вигляді:

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

де

$$I_1 = \int \sigma_E \left(-\frac{df}{dE}\right)(E - E_F)dE,$$

$$I_0 = \int \sigma_E \left(-\frac{df}{dE}\right)dE,$$

$$\chi_p(T) = \mu_B^2 \int g(E)\left(-\frac{df}{dE}\right)dE, \tag{2}$$

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

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

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

У літературі існує багато спроб установити взаємозв'язок між експериментальними даними з нормальних властивостей $(\alpha(T), \chi(T), C_e(T))$ 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 перекриттям p- і d-зон. У праці [1] в рамках такої зонної схеми показано якісно інтерпретацію температурних залежностей термо-е.р.с. α, питомого опору ρ, магнетної сприйнятливости χ керамік La–Ba–Cu–O, La–Sr–Cu–O, Y–Ba–Cu–O. При варіяції 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 сприйнятливости й електронної теплоємности надпровідника $YBa_2Cu_3O_7$ у нормальному стані з урахуванням зонних густин станів. Використані дані з $g(E)$ не дали змоги 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 сприйнятливости, електронної теплоємности й електропровідности ВТНП $YBa_2Cu_3O_7$ при $T > T_C$ з використанням зонних густин станів, які ми отримали за методом ЛМТО, що в ділянці E_F добре узгоджуються з результатами, наведеними в [4] (рис. 1).

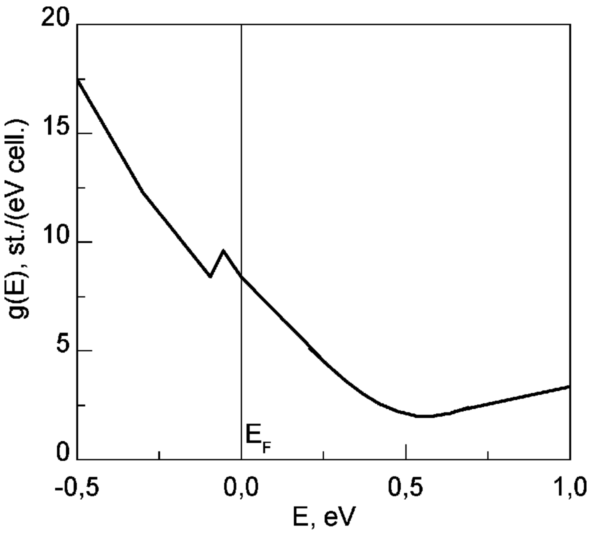

Рис. 1. Густина станів ВТНП $YBa_2Cu_3O_7$ в ділянці E_F за даними [4].

Експериментальні температурні залежності коефіцієнта термо-е.р.с. $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ мають аномальний, відмінний від лінійного, характер: при збільшенні δ величина α зростає і на залежності $\alpha(T)$ з'являється характерний максимум, який зсувається в ділянку нижчих температур. При $\delta \to 0$ 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- стани) 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 неточности 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. Близьку до експериментальної залежність коефіцієнта термо-е.р.с. можна отримати, прийнявши, що в ділянці високих температур основний внесок в α 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).

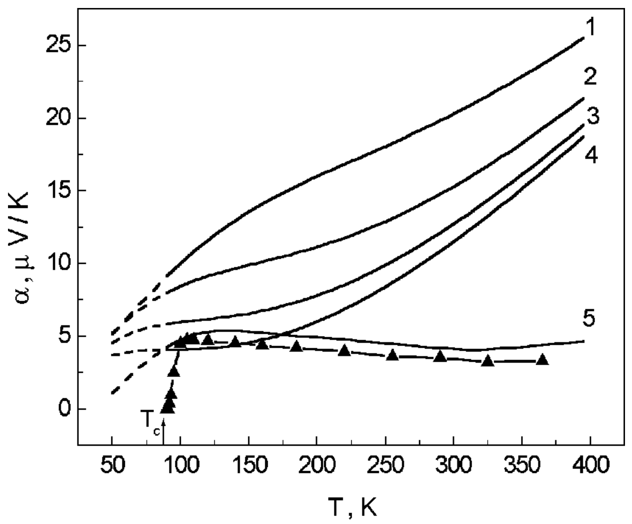

Рис. 2. Температурні залежності коефіцієнта термо-е.р.с. $YBa_2Cu_3O_7$, розраховані для $\sigma_E \sim g^2(E)$ при зміні положення E_F в напрямку до вершини піка: $\Delta E_F = 0$ (крива 1), 0.02 (крива 2), 0.03 (крива 3), 0.04 eV (крива 4) та при деякому його підсиленні (на 40%, ΔE_F=0.02) (крива 5), ▲ — експеримент. Штрихом нижче T_c зображені результати розрахунку при відсутності надпровідности.

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

Порівняння експериментальних даних для $\chi_p(T)$, γ з розрахунковими підказує думку, що зонні густини станів $g(E)$ біля E_F (рис. 1) дещо занижені. При деякому підсиленні піка $g(E)$ (на 40%) у вузькій прифермієвській ділянці $\Delta E < 0.1$еВ обчислені $\alpha(T)$, $\chi_p(T)$, γ для $YBa_2Cu_3O_7$ 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 σ_E слід використовувати загальнішу залежність на основі формули Кубо–Ґрінвуда $\sigma_E \sim g^2(E)$ (для матеріялів з низькою провідністю).

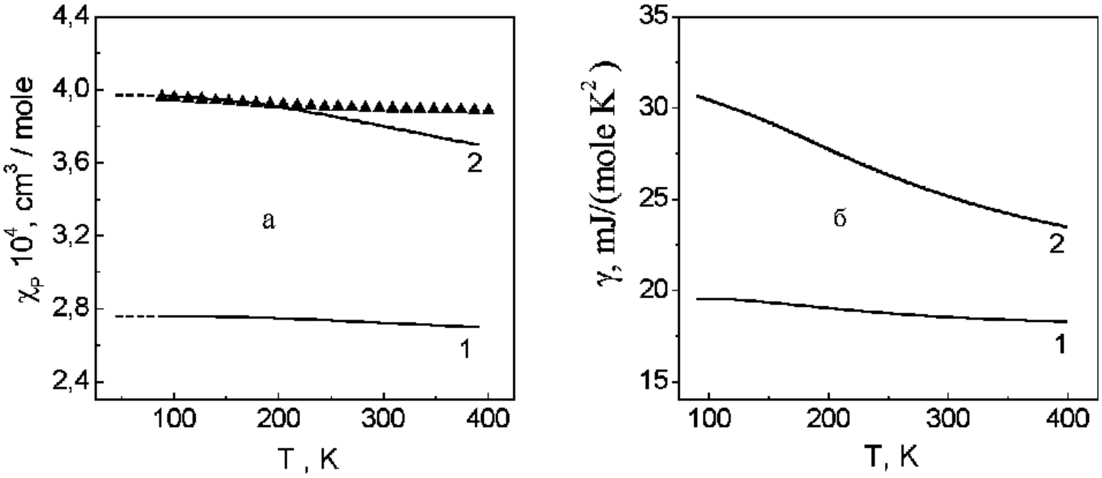

Рис. 3. Магнетна сприйнятливість (а) і коефіцієнт електронної теплоємности (б) $YBa_2Cu_3O_7$, розраховані за даними для зонної густини станів $g(E)$ (крива 1) та дещо підсиленого піка в ділянці E_F (на 40%) (крива 2), ▲ — експеримент.

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 α, χ, γ дає змогу встановлювати адекватність кривих $g(E)$ і можливу їх корекцію в деякому інтервалі енерґій 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. Bezinge, J. Muller, Physica C **152**, 50 (1988).

THE INFLUENCE OF NEAR FERMI LEVELS STRUCTURE OF STATES DENSITY ON NORMAL PROPERTIES OF THE $YBa_2Cu_3O_7$ 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 $YBa_2Cu_3O_7$ superconductor has been conducted using states density $g(E)$ in compliance with the band theory and somewhat modifed near E_F. We have received a good agreement between the calculated and experimental data at the temperatures $T > T_C$.