

05.4

Параметры модели U -минус центров для $YBa_2Cu_3O_x$ по данным эффекта Холла в нормальном состоянии

© И.А. Барыгин, А.И. Капустин, К.Д. Цэндин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
E-mail: conscious@mail.ru

Поступило в Редакцию 27 августа 2007 г.

Получено качественно и количественно правильное описание температурных зависимостей константы Холла в нормальной фазе системы $YBa_2Cu_3O_x$ в рамках модели U -минус центров.

PACS: 74.25.Fy, 74.72.Bk

В настоящей работе используется модель зонной структуры $YBa_2Cu_3O_x$, основанная на концепции U -минус центров. Эта концепция впервые была выдвинута Андерсоном в 1975 г. для описания некоторых свойств халькогенидных стеклообразных полупроводников [1]. В данной модели предполагается, что в атомной решетке материала существуют центры, обладающие особым свойством. Сильное электрон-решеточное взаимодействие приводит к тому, что энергия связи двух электронов превосходит их энергию кулоновского отталкивания, т.е. эффективная корреляционная энергия пары отрицательна. Такой эффект наблюдается и в нормальных условиях, т.е. электроны, связанные в пару, существуют уже и при комнатной температуре.

В настоящей работе будет показано, что статистическое взаимодействие электронов, связанных в пары на U -минус центрах, с дырками

валентной зоны ВТСП может объяснить данные, полученные при исследовании эффекта Холла ВТСП-состава $YBa_2Cu_3O_x$, и будут определены параметры модели U -минус центров для этой системы.

Модель U -минус центров основана на результатах работы о локализованных парах [2] и описывается гамильтонианом Хаббарда с отрицательной эффективной корреляционной энергией:

$$H = -U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k N_{k\sigma}. \quad (1)$$

Первые два слагаемых относятся к системе U -минус центров, третье — к валентной зоне; $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ — числа заполнения, $a_{i\sigma}^+$ и $a_{i\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона со спином σ на узле i , а t_{ij} — матричный элемент перехода между ближайшими центрами локализации (U -минус центрами); U — положительная величина, и считается, что $t_{ij} < U$; $N_{k\sigma}$ — числа заполнения зонных состояний с волновым вектором k , ε_k — соответствующие им энергии. Отрицательные значения $-U$ приводят к притяжению на одном узле электронов с противоположными спинами. Предполагается, что энергия такой связи превышает обычную кулоновскую корреляционную энергию Хаббарда, т.е. результирующее взаимодействие $-U$ в (1) — отрицательно. При достаточно низких температурах гамильтониан (1) приводит к возникновению сверхпроводящей корреляции между парами [2].

При температуре $T = 0$ и $t_{ij} = 0$ все электроны связаны в пары, локализованные на узлах. Отрицательная корреляционная энергия приводит к тому, что элементы кристаллической решетки (D), являющиеся U -минус центрами, приобретают различный заряд (D^- , D^+). Электрон с нейтрального центра D^0 переходит на соседний нейтральный центр, где образует со вторым электроном связанную пару. На первом центре остаются две дырки — состояние D^+ , а на втором — два связанных электрона, что соответствует состоянию D^- . Таким образом, уровень энергии, образованный элементами U -минус центров (находящимися первоначально в состояниях D^0), расщепляется на два состояния D^+ и D^- . Возмущение, связанное со вторым членом в (1), приводит к появлению делокализованных зонных состояний пар, и состояния D^+ и D^- расщепляются на зоны двухчастичного (бозонного) переноса — зоны U -минус центров (рис. 1).

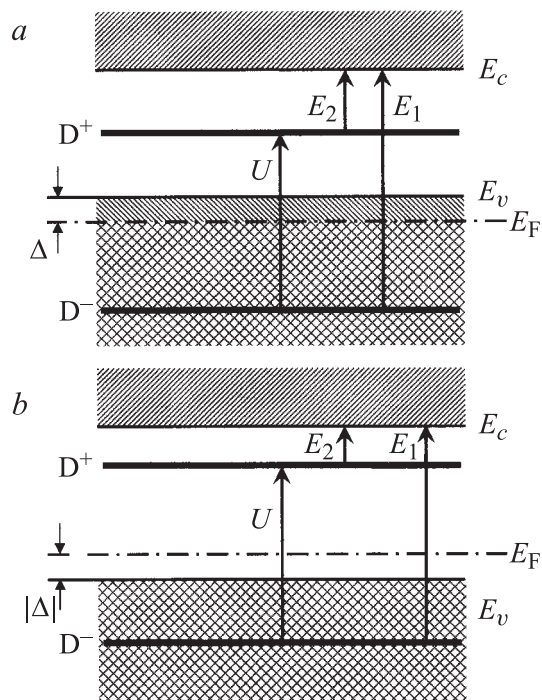


Рис. 1. Энергетический спектр модели U -минус центров [3,4] при $\Delta > 0$ (a) и $\Delta < 0$ (b).

При $T \neq 0$, $t_{ij} = 0$ состояние системы представляет совокупность пустых узлов, узлов, занятых одним электроном, и узлов, занятых двумя электронами. Число узлов, занятых одним электроном, пропорционально $n \exp(-U/2T)$ (n — концентрация в системе U -минус центров). При $T \ll U$ это число мало по сравнению с числом пар.

Рассматриваемая модель учитывает статистическое взаимодействие системы U -минус центров с системой зонных электронов [3]. Вследствие пиннинга уровень Ферми располагается посередине между уровнями D^+ и D^- (расщепление этих уровней в зоны не учитывается). Потолок валентной зоны находится вблизи уровня Ферми, на расстоянии Δ от него. Ситуация, когда уровень Ферми находится в валентной зоне, соответствует положительному знаку Δ (рис. 1, a), в

запрещенной зоне — отрицательному (рис. 1, *b*). Мы предполагаем, что как ширина запрещенной зоны E_g , так и U существенно больше, чем Δ , поэтому в рассматриваемом диапазоне температур ($T \ll U$, $T \ll E_g$) будем пренебрегать активацией электронов в зону проводимости и возникновением центров в состоянии D^0 . Закон дисперсии в валентной зоне считается квадратичным, задаваемым эффективной массой m^* . В дальнейшем потолок валентной зоны принят за нулевой уровень энергии.

Статистическая сумма системы равна [4]

$$Z = \left(1 + 2e^{\frac{-(E_g - E_2) + \mu}{T}} + e^{\frac{-2(E_g - E_2) + U + 2\mu}{T}} \right)^D \prod_{k, \sigma} \left(1 + e^{\frac{\varepsilon_k - \mu}{T}} \right), \quad (2)$$

где D — число U -минус центров, μ — химический потенциал, E_1 и E_2 — первая и вторая энергии ионизации U -минус центра, $-U = E_2 - E_1$. Первый множитель соответствует U -минус центрам, члены под знаком произведения — электронам в зоне с волновым вектором k и энергией ε_k . Полное число электронов в системе вычисляется как

$$N = -\frac{\partial}{\partial \mu} (-T \ln Z). \quad (3)$$

Таким образом, уравнение нейтральности принимает вид

$$\chi - \frac{1}{1 + e^{\frac{-2(\Delta + \mu)}{T}}} + A \int_{-\infty}^0 \frac{\sqrt{-\varepsilon} d\varepsilon}{1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{T}}} = 0, \quad (4)$$

где $\chi = \frac{N - N_0}{2D}$, $A = \frac{(m^*)^{3/2} V}{\sqrt{2} D \pi^2 \hbar^3}$, ε — энергия состояния в валентной зоне. В эти обозначения входят полное число состояний в валентной зоне N_0 и объем образца V . Безразмерный параметр χ характеризует полное число электронов в системе, его изменение отражает допирование сверхпроводника. Уравнение (4) позволяет определить зависимость $\mu(T)$. После этого концентрация дырок p определяется как

$$p = \frac{2AD}{V} \int_{-\infty}^0 \frac{\sqrt{-\varepsilon} d\varepsilon}{1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{T}}}. \quad (5)$$

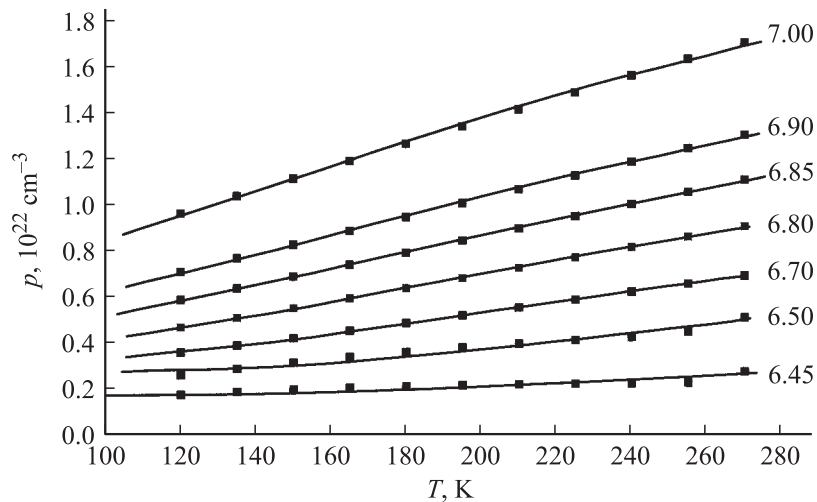


Рис. 2. Концентрация дырок в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$, вычисленная из коэффициента Холла [5] (сплошные линии) и из модели U -минус центров (квадраты). Содержание кислорода x указано под линиями.

Предполагается, что подвижность в зонах U -минус центров достаточно мала, так что эффект Холла обеспечивается дырками валентной зоны. Кроме того, мы не учитываем зависимость времени рассеяния дырок валентной зоны от энергии, таким образом, коэффициент Холла принимается равным $R_H = 1/pe$.

Мы интерпретировали результаты измерения коэффициента Холла, полученные в [5] для тонких пленок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ различных составов, при помощи изложенной модели. Были подобраны параметры, обеспечивающие совпадение модельных результатов с экспериментальными (рис. 2). В таблице приведены полученные значения m^* (в массах свободного электрона m_0), Δ (в кельвинах), χ , концентрации U -минус центров D/V , а также заполнения системы U -минус центров $\nu(T) = \chi + p(T)V/2D$.

Величина ν характеризует количество пар электронов, приходящихся на один U -минус центр. Она является определяющей для критической температуры сверхпроводимости, возникающей в системе U -минус центров [2].

Параметры модели U -минус центров для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$

x	m^*/m_0	Δ , К	χ	D/V , 10^{22} cm^{-3}	$\nu(0)$
6.45	98.2	-53.6	0.167	0.135	0.167
6.50	73.1	-22.3	0	0.257	0
6.70	43.0	158.7	0.391	2.64	0.429
6.80	49.9	153.0	0.317	2.83	0.359
6.85	55.2	158.2	0.255	2.81	0.307
6.90	60.0	157.6	0.165	2.54	0.230
7.00	69.1	159.6	0.058	2.60	0.138

Таким образом, главным результатом работы является адекватное описание данных по эффекту Холла в нормальной фазе системы $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ в рамках модели [3]. Это можно рассматривать как подтверждение справедливости этой модели. При этом удалось получить содержание кислорода x , при котором уровень Ферми входит в валентную зону. Анализ показывает, что при содержании кислорода $x \geq 6.7$ уровень Ферми лежит в валентной зоне, а при $x \leq 6.5$ находится выше ее. Концентрация U -минус центров оказывается сравнимой с концентрацией атомов вещества, что подтверждает предположение, что U -минус центры являются не дефектами, а одной из основных структурных единиц материала.

При анализе результатов, полученных для $x = 6.50$, возникают определенные трудности. Вещество такого состава является сверхпроводником, хотя для полученного нами значения $\nu = 0$ сверхпроводимость возникать не должна. Это может свидетельствовать о необходимости учета подвижности в зонах U -минус центров при расчете коэффициента Холла.

В заключение отметим следующее: в работе [2] было показано, что в случае наличия сильной корреляции в движении пар по узлам максимум температуры сверхпроводящего перехода T_c может быть расположен не при $\nu = 0.5$, а при ν , близком либо к 0.25, либо к 0.75. Результаты анализа, представленного в настоящей работе, свидетельствуют в пользу того, что корреляции действительно сильны, а максимум T_c достигается при $\nu = 0.25$ ($x = 7$).

Список литературы

- [1] *Anderson P.W.* // Phys. Rev. Lett. 1975. V. 109. N 15. P. 953.
- [2] *Кулик И.О., Педан А.Г.* // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. В. 4. С. 1469.
- [3] *Tsendin K.D., Popov B.P.* // Supercond. Technol. 1999. V. 12. N 5. P. 255.
- [4] *Tsendin K.D., Denisov D.V.* // Supercond. Sci. Technol. 2003. V. 16. N 1. P. 80.
- [5] *Jones E.C., Christen D.K., Thompson J.R. et al.* // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. N 14. P. 8986.