

Влияние цинка на зонный спектр $Y_{0.8}Ca_{0.2}Ba_2Cu_3O_y$ в нормальной фазе

О.А. Мартынова, Д.В. Потапов, М.В. Елизарова, В.Э. Гасумянц

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 195251 Россия

Л.П. Мезенцева

Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург 199155, Россия

Представлены результаты экспериментального исследования транспортных свойств соединения $Y_{0.8}Ca_{0.2}Ba_2Cu_3O_y$ при замещении меди цинком и их анализ в рамках модели узкой зоны. Проанализирован характер и возможный механизм влияния цинка на структуру зонного спектра в нормальной фазе.

Сильное подавление сверхпроводящих свойств системы $YBa_2Cu_3O_y$ при замещении плоскостной меди цинком неоднократно обсуждалось в литературе. Однако примесь цинка может оказывать специфическое воздействие и на зонный спектр $YBa_2Cu_3O_y$ в нормальной фазе. Вопрос о характере и механизме этого воздействия несомненно интересен, но остается до сих пор слабо изученным.

В работе исследована модификация транспортных и сверхпроводящих свойств $Y_{0.8}Ca_{0.2}Ba_2Cu_3O_y$ при легировании цинком. Объектами исследования являлись три серии керамических образцов состава $Y_{0.8}Ca_{0.2}Ba_2Cu_{3-x}Zn_xO_y$ ($x=0.00, 0.05, 0.075, 0.1, 0.125, 0.15$) с различным состоянием кислородной подсистемы. Последнее достигалось путем совместного отжига образцов стартовой серии в вакууме при $T=460$ и 470°C . Для всех образцов были измерены температурные зависимости удельного сопротивления, $\rho(T)$, и коэффициента термоэдс, $S(T)$, в диапазоне температур $T=T_c \pm 300\text{K}$.

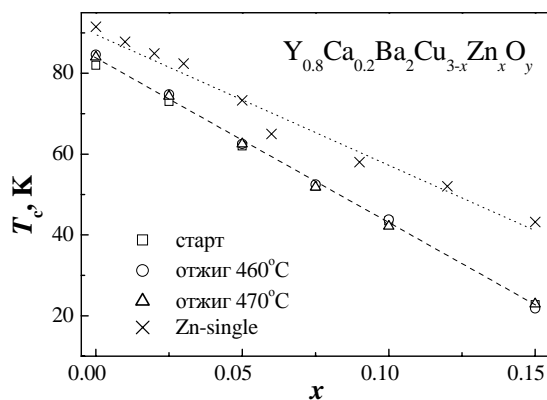


Рис. 1. Зависимость $T_c(x)$.

Кривые $\rho(T)$ демонстрируют типичную для всех ВТСП линейную зависимость в широком диапазоне температур. Зависимости критической температуры от содержания цинка показаны на рис. 1. Здесь же для сравнения приведена зависимость $T_c(x)$ для случая одиночного легирования $Zn \rightarrow Cu$ [1]. Видно, что зависимость $T_c(x)$ для исследованной системы, также как и для $YBa_2Cu_{3-x}Zn_xO_y$, близка к линейной, однако, подавление сверхпроводящих свойств при

этом происходит быстрее. Необходимо отметить, что уменьшающий содержание кислорода отжиг в целом не оказывает влияния на значение T_c .

Неизменность сверхпроводящих свойств при уменьшении содержания кислорода может быть объяснена на основании полученных ранее результатов [2]. Согласно [2], рост x в $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_y$ приводит к подавлению сверхпроводимости в случае содержания кислорода, близкого к стехиометрическому, но вызывает рост T_c для образцов с отклонением от кислородной стехиометрии. Однако, для случая 10-20% замещения иттрия кальцием отжиг практически не оказывает влияния на значение критической температуры. По этой причине для системы $Y_{0.8}Ca_{0.2}Ba_2Cu_{3-x}Zn_xO_y$ отжиг (и, соответственно, уменьшение содержания кислорода) практически не изменяет сверхпроводящих свойств.

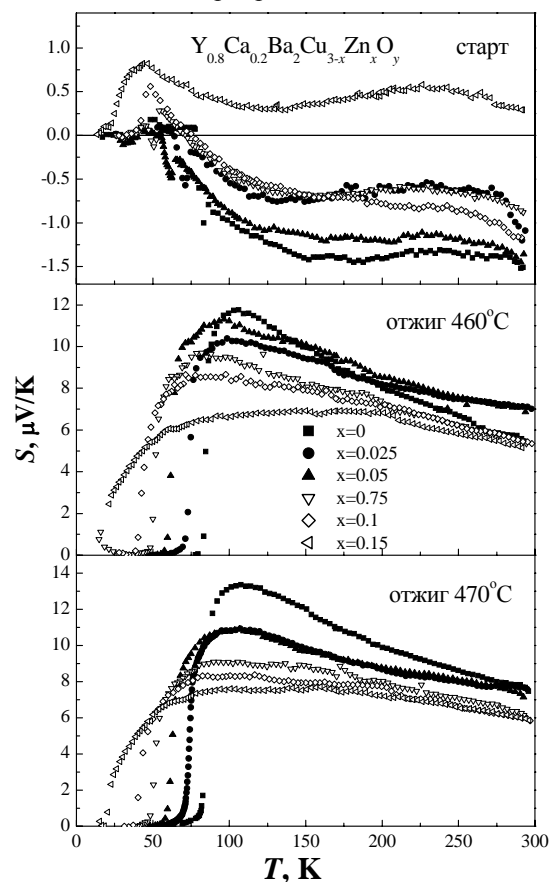


Рис. 2. Экспериментальные зависимости $S(T)$.

Полученные зависимости $S(T)$ приведены на рис. 2. Видно, что для всех трех серий отжиг в целом приводит к незначительному росту абсолютных значений S . Так, для стартовой серии значения

$S(T=300\text{K})$ с ростом x изменяются в пределах $-1.5 \div -0.5$ мкВ/К, тогда как для серий, отожженных при 460°C и 470°C , эти значения составляют $5 \div 7$ мкВ/К и $6 \div 8$ мкВ/К, соответственно. При этом увеличение x не приводит к какому-либо направленному изменению значения $S(T=300\text{K})$.

Однако легирование цинком оказывает существенное влияние на модификацию вида зависимостей $S(T)$. Коэффициент термоэдс демонстрирует близкое к линейному падение с ростом температуры при $T=150 \div 300\text{K}$ (за исключением стартовой серии, где значения S очень малы, вследствие чего существенное влияние на вид $S(T)$ оказывают мелкие детали строения зонного спектра). При этом с ростом x наклон кривых $S(T)$ последовательно уменьшается. Отметим, что аналогичные тенденции в модификации $S(T)$ с ростом содержания цинка наблюдались ранее для системы с одиночным легированием ($\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-x}\text{Zn}_x\text{O}_y$) при больших x [3].

Полученные результаты по зависимостям $S(T)$ для двух отожженных серий образцов были проанализированы в рамках феноменологической модели узкой зоны [4]. Данная модель позволяет оценить основные параметры зонного спектра и системы носителей заряда в нормальной фазе: полную эффективную ширину проводящей зоны, W_D , степень локализации состояний, C , степень заполнения зоны электронами, F , и степень ее асимметрии, b . Данные для стартовой серии в связи с малыми значениями S и большой, за счет этого, погрешностью расчетов обработке не подвергались.

Согласно нашим расчетам, замещение цинком плоскостной меди в системе $\text{Y}_{0.8}\text{Ca}_{0.2}\text{Ba}_2\text{Cu}_{3-x}\text{Zn}_x\text{O}_y$ приводит к незначительному сужению полной эффективной ширины зоны и росту степени заполнения. Степень локализации состояний для данной серии образцов испытывает незначительные колебания без какой-либо направленной тенденции.

Что касается степени асимметрии зоны, как было показано ранее [2,4], легирование кальцием приводит к возникновению и последовательному росту «отрицательной» асимметрии ($b < 0$), что вызвано внесением кальцием дополнительных состояний в проводящую зону. Вследствие этого, для образца $\text{Y}_{0.8}\text{Ca}_{0.2}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$, $b = -0.02$. Дополнительное легирование цинком приводит к уменьшению «отрицательной» асимметрии, и в результате $b = 0$ для образцов $\text{Y}_{0.8}\text{Ca}_{0.2}\text{Ba}_2\text{Cu}_{2.8}\text{Zn}_{0.2}\text{O}_y$. Эта динамика асимметрии зоны и приводит к наблюдаемому в эксперименте уменьшению наклона зависимостей $S(T)$ (см. рис. 2). Отметим, что для системы с одиночным замещением меди цинком наблюдались аналогичные тенденции в изменении всех модельных параметров. Это может быть объяснено только наличием непосредственного воздействия цинка на структуру зонного спектра в нормальной фазе.

При интерпретации полученных результатов необходимо учесть следующее. Известно, что проводящая зона в ВТСП формируется взаимодействием

d -орбиталей плоскостной меди, $\text{Cu}(2)$, с p -орбиталями кислорода. Авторы [5] высказали предположение, что уровни атома цинка в $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-x}\text{Zn}_x\text{O}_y$ попадают в область более низких энергий по сравнению с уровнями замещаемых им атомов $\text{Cu}(2)$. В результате кислородные орбитали, участвовавшие ранее в формировании проводящей зоны, выбрасываются в область энергий ниже уровня Ферми. Это приводит к разрушению проводящей зоны, которое, согласно нашим данным, выражается в уменьшении W_D . В свою очередь, динамика изменения $F = n/N$, где n -число электронов, N -число состояний в зоне, подтверждает предположение о разрушении зоны. Цинк является изовалентной примесью и не может приводить к изменению n , что подтверждается слабой зависимостью $S(T=300\text{K})$ от x . Наблюдаемый при этом рост параметра F можно объяснить только уменьшением числа состояний в зоне. Этим же выбросом состояний из зоны можно объяснить и уменьшение ее асимметрии. Таким образом, увеличение концентрации цинка ведет к возникновению асимметрии проводящей зоны, противоположной по знаку «кальциевой» асимметрии, а также ее разрушению вследствие выброса состояний.

Более низкие, относительно $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-x}\text{Zn}_x\text{O}_y$, значения T_c в исследованной системе могут быть объяснены суммированием двух механизмов подавления сверхпроводимости. Во-первых, цинк подавляет T_c главным образом за счет непосредственного разрушения пар. Во-вторых, кальций, как изовалентная примесь, уменьшает содержание кислорода, внося тем самым разупорядочение в кислородную подсистему, что, согласно механизму андерсоновской локализации, ведет к расширению проводящей зоны. Это вызывает уменьшение значения функции плотности состояний на уровне Ферми, $D(E_F)$, и, как следствие, падение T_c . В результате значения T_c в исследованной системе оказываются изначально ниже, чем в случае $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-x}\text{Zn}_x\text{O}_y$. При этом более высокая скорость подавления T_c в $\text{Y}_{0.8}\text{Ca}_{0.2}\text{Ba}_2\text{Cu}_{3-x}\text{Zn}_x\text{O}_y$ объясняется более сильным уменьшением $D(E_F)$ с ростом x за счет дополнительного воздействия цинка на структуру проводящей зоны в нормальной фазе на фоне уже существующего влияния кальция.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 02-02-16841-а), Министерства образования РФ (грант Е02-3.4-120) и Правительства Санкт-Петербурга (грант М04-2.4Д-426).

1. R. Liang et al., *Physica C* 170, 307 (1990).
2. В. Э. Гасумянц и др., *ФТТ* 40, 2145 (1998).
3. M. Sera et al. *J. Phys. Soc. Jap.* 62, 281 (1993)
4. V. E. Gasumyants. In: *Advances in Cond. Mat. and Materials Research* / ed. by F. Gerard, vol.1, Nova Science Publ., New York (2001), p.135.
5. R. Gupta, M. Gupta. *Phys. Rev. B* 59, 3381 (1999).