

## Псевдощелевые особенности проводимости в ВТСП и халькогенидах в модели U-минус центров

К.Д. Цэндин, Д.В. Денисов,

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН, 194021

Санкт-Петербург, Россия

Б.П. Попов

Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет, 195251

Санкт-Петербург, Россия

**Предложена модель U-минус центров, описывающая с единой точки зрения большую совокупность экспериментальных фактов. Отличительной чертой модели является наличие двух подсистем носителей заряда: электронов (дырок) валентной зоны, ответственных за проводимость выше  $T_c$ , и андерсоновских пар, принадлежащих U-минус центрам, бозе-конденсация которых приводит к сверхпроводимости. Большое внимание уделено проблеме псевдощели и объяснению сходства псевдощелевых особенностей проводимости в недо- и передопированных ВТСП и халькогенидных полупроводниках. Возможный механизм образования U-минус центров в ВТСП связан с искажением цепочек Cu-O-Cu, образывавших верх валентной зоны.**

Концепция U-минус центров была предложена Андерсоном [1] для объяснения большой совокупности экспериментальных данных относящихся к халькогенидным стеклообразным полупроводникам (ХСП), Впоследствии эта гипотеза была экспериментально подтверждена и в настоящее время общепринято, что в ХСП имеется большая концентрация U-минус центров [2]. На энергетической зонной диаграмме энергии первой и второй ионизации U-минус центров принято обозначать уровнями  $D^-$  и  $D^+$  (рис. 1а). Модель сверхпроводимости в системе U-минус центров [3] основана на результатах работы Кулика и Педана [4] и описывается гамильтонианом Хаббарда с отрицательной эффективной корреляционной энергией  $U$ , модуль которой равен разности энергий уровней  $D^-$  и  $D^+$ . В модели предполагалось, что при достаточно большой концентрации U-минус центров уровни  $D^-$  и  $D^+$  расплываются в соответствующие зоны (рис.1б). Поскольку величина  $U$  много больше ширины зоны, то одночастичным переносом можно пренебречь в системе U-минус центров и зоны  $D^-$  и  $D^+$  являются зонами переноса сильно связанных пар (бозонов) для которых возможна бозе-конденсация.

- Таким образом главными отличительными чертами модели являются наличие зон  $D^-$  и  $D^+$ , которые определяют положение уровня Ферми (он закреплен посередине между ними).
- В сверхпроводящем состоянии происходит конденсация уже существующих в зонах  $D^-$  и  $D^+$  пар, а возможным участием в сверхпроводимости

электронов из зоны проводимости (валентной) мы пренебрегаем.

- В нормальном состоянии перенос тока осуществляется нормальными электронами из широкой зоны проводимости (валентной), а вклад сильно связанных тяжелых пар из узких зон  $D^-$  и  $D^+$  пренебрежительно мал.

В работе [5] года модель была применена для объяснения сверхпроводимости в ВТСП, на рисунке 1в показана энергетическая диаграмма модели, предложенная в [6] для ВТСП. В отличие от ХСП предполагалось, что середина между  $D^-$  и  $D^+$ , совпадающая с уровнем Ферми, находится чуть выше верха валентной зоны для недоопированных образцов и немного входит в валентную зону в случае передопированных образцов.

Данная модель позволила объяснить следующие экспериментальные факты:

- Величины  $T_c$  для ХСП [3] и ВТСП [5].
- Куполообразную зависимость  $T_c$  от допирования в ВТСП. Возможность сверхпроводимости по зонам  $D^-$  и  $D^+$  позволила объяснить симметричную картину зависимости  $T_c$  от состава материала [5].
- Псевдощелевые особенности проводимости [6] и эффект дополнительной проводимости могут быть рассмотрены с единой точки зрения и объяснены взаимным положением уровня Ферми и верха валентной зоны [7].
- Объяснены экспериментальные данные об увеличении  $T_c$  в ВТСП при небольшом замещении кислорода на серу [8]. Предсказано поведение  $T_c$  при полном замещении кислорода на серу [9].

Мы предполагаем, что в рамках предлагаемой модели возможно объяснить аномалию знака эффекта Холла в сверхпроводящем состоянии и d-симметрию щели.

На наш взгляд близкое расположение уровня Ферми и верха валентной зоны неслучайно. Это можно объяснить на примере системы YBaCuO следующим образом. Известно, что верх валентной зоны формируется связями Cu-O-Cu. Можно предположить, что при искажении некоторых из этих связей формируются уровни, почти симметрично расположенные относительно верха валентной зоны, из которых образуются зоны  $D^-$  и  $D^+$ , что подтверждается экспериментальными данными

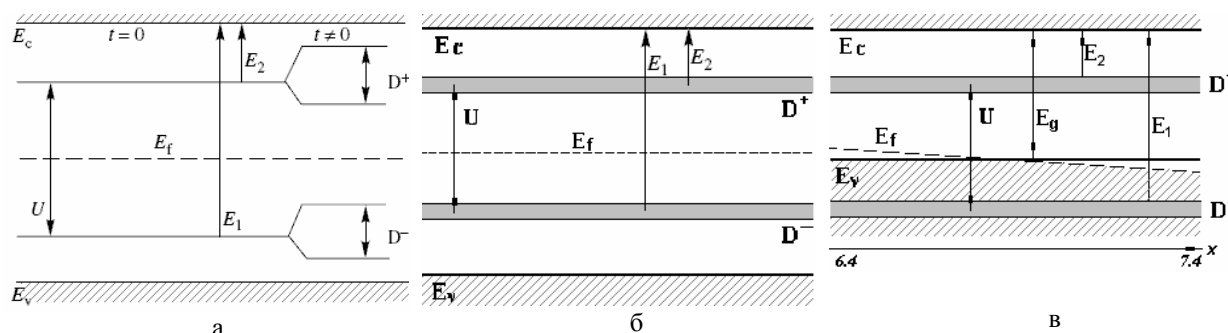


Рисунок 1.

Рисунок 1а. Диаграмма энергетических уровней соответствующих U-минус центрам: ( $t=0$ ) уровни U-минус центров не образуют зон и ( $t\neq 0$ ) образование энергетических зон  $D^+$  и  $D^-$ .  $E_{1,2}$  – первая и вторая энергии активации U-минус центров.

Рисунок 1б. Диаграмма энергетических зон ХСП. Вертикальными стрелками показан температурный переход электронов с U-минус центров. Затемненные области обозначают зоны нелокализованных электронных и дырочных пар ( $D^-$  и  $D^+$  зоны бозонов), бозе-конденсация в которых приводит к сверхпроводимости.

Рисунок 1в. Зонная диаграмма  $Y_1Ba_2Cu_3O_x$ .  $D^+$  и  $D^-$  – это зоны U-минус центров, и они показаны затемненным цветом.  $E_f$  при увеличении допирования материала кислородом переходит из положения слегка выше верха валентной зоны (около  $10\text{meV}$ , случай недодопированных образцов) в положение внутри валентной зоны (случай передопированных образцов).

по ЭПР [10]. Так как уровень Ферми закрепляется посередине между зонами  $D^-$  и  $D^+$ , в силу особых свойств этих зон [1, 2], то он будет лежать вблизи верха валентной зоны. Точное положение уровня Ферми (ниже или выше верха валентной зоны) определяется допированием материала кислородом и различие в положении уровни не превышает несколько десятков  $\text{meV}$ . Именно искажение связей Cu-O-Cu привело к появлению двух подсистем носителей заряда: нормальные носители заряда, принадлежащие к неискаженной подсистеме (валентная зона) и сильно связанные пары, принадлежащие к искаженной подсистеме (U-минус центры). Таким образом, в отличие от ХСП, где U-минус центрами являются собственные дефекты, в ВТСП U-минус центрами могут являться структурные единицы самой решетки с концентрацией до  $10^{22}\text{см}^{-3}$ .

8. S. Kamble, M. Kawai, Journal Applied Physics, **27**, L2342 (1988).
9. K.D. Tsendin, D.V. Denisov, Supercond. Sci. Technol., J. Optoelect. and Adv. Mat., **3**, 549 (2001); **5**, 80 (2003).
10. Б.П. Попов, ФТП **38**, №12 (2004).

1. P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1975).
2. *Electronic Phenomena In Chalcogenide Glassy Semiconductors*, edited by Tsendin K.D., Science, Moscow (1996).
3. К.Д. Цэндин, Б.П. Попов, Письма в ЖТФ, **24**, 45 (1998).
4. I.O. Kulik, A.G. Pedan, Zh. Eksp. Teor. Fiz., **79**, 1469 (1980).
5. K.D. Tsendin, B.P. Popov, Supercond. Sci. Technol., **12**, 255 (1999).
6. K.D. Tsendin, D.V. Denisov, Supercond. Sci. Technol., **16**, 80 (2003).
7. К.Д. Цэндин, Д.В. Денисов, Б.П. Попов, Письма в ЖЭТФ, **80**, 277 (2004).