

Едина модель псевдощелевых особенностей проводимости в ВТСП

К. Д. Цэндин¹⁾, Д. В. Денисов, Б. П. Попов⁺

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

⁺ Государственный политехнический университет, 195251 Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 6 апреля 2004 г.

После переработки 15 июня 2004 г.

В рамках модели U -минус центров с единых позиций объяснен феномен псевдощели в недодопированных и оптимально допированных кислородом образцах ВТСП системы $Y_1Ba_2Cu_3O_x$. Показано, что псевдощелевые особенности проводимости не связаны непосредственно со сверхпроводимостью, а возникают из-за существования статистического взаимодействия U -минус центров и дырок валентной зоны. Именно из-за этого взаимодействия концентрация дырок в валентной зоне не остается постоянной. Ее изменения с температурой отличаются для различных взаимных расположений уровня Ферми и верха валентной зоны. Эти отличия и приводят к разным температурным зависимостям проводимости в недодопированных и оптимально допированных образцах.

PACS: 71.30.+h, 74.20.-z

Введение. В литературе долгое время дискутируется проблема псевдощелевых особенностей в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) [1]. Эти особенности проявляются в целом ряде экспериментально наблюдаемых величин. В проводимости недодопированных по кислороду ВТСП эти особенности проявляются в том, что в температурном интервале непосредственно перед переходом в сверхпроводящее состояние температурный ход проводимости имеет не металлический, а полупроводниковый характер.

В ряде работ считается, что такая температурная зависимость проводимости в недодопированных образцах ВТСП связана с механизмами рассеяния носителей на флуктуациях спиновой или зарядовой плотности. При этом подразумевалось, что уровень Ферми находится внутри валентной зоны, то есть речь шла об интерпретации, в которой недодопированные ВТСП являются не полупроводниками, а металлами, но плохими из-за сильных механизмов рассеяния.

В оптимально допированных кислородом ВТСП псевдощелевые особенности проводимости тоже проявляются таким образом, что в температурном ходе сопротивления есть отклонение от линейной металлической зависимости, но в другую сторону по сравнению с недодопированными ВТСП. При понижении температуры сопротивление уменьшается быстрее, чем в области высоких температур, то есть при низких температурах появляется добавочная проводимость.

В литературе считается, что такая добавочная проводимость свидетельствует о наличии пар при температуре выше T_c , которые при температурах, близких к T_c , могут давать в проводимость вклад, связанный с флуктуационной когерентностью пар, описываемой теорией Асламазова–Ларкина [2]. Таким образом, псевдощелевые особенности проводимости в недодопированных и оптимально допированных образцах ВТСП объясняются различным образом.

В настоящей работе будет показано, что псевдощелевые особенности проводимости в недодопированных и оптимально допированных образцах ВТСП могут быть естественным образом объяснены с единой точки зрения в рамках модели U -минус центров.

Модель U -минус центров. Модель U -минус центров основана на результатах работы Кулика и Педана [3] и описывается гамильтонианом Хаббарда с отрицательной эффективной корреляционной энергией:

$$H = -U \cdot \sum n_{i\uparrow} \cdot n_{i\downarrow} + \sum t_{ij} \cdot a_{i\sigma}^+ \cdot a_{j\sigma}, \quad (1)$$

где $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ \cdot a_{i\sigma}$ – 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); $U > 0$ и считается, что $t_{ij} \ll U$. Отрицательные значения “ $-U$ ” приводят к притяжению на одном узле электронов с противоположными спинами. Предполагается, что энергия такой связи превышает обычную кулоновскую корреляционную энергию Хаббарда, то есть результирующее взаимо-

¹⁾e-mail: tsendin@mail.ioffe.ru

действие $-U$ в (1) отрицательно. При низких температурах гамильтониан (1) приводит к возникновению сверхпроводящей корреляции между парами.

В терминах делокализованных электронов второе слагаемое в гамильтониане (1) соответствует кинетической энергии зонного движения, а первое – притяжению между электронами с энергией $-U$. В модели БКШ ширина зоны велика, и поэтому взаимодействие между электронами рассматривается как возмущение. В модели U -минус центров энергия U настолько велика по сравнению с t_{ij} , что в (1) малым считается второе слагаемое по отношению к первому. В этом и заключается основное отличие изучаемой модели от теории БКШ. Из-за неравенства $U \gg t_{ij}$ приближение, использованное в [3], было названо приближением локализованных пар. Однако ясно, что учет второго члена в (1) принципиально важен для проявления транспортных свойств системы.

При $t_{ij} = 0$ состояние системы представляет совокупность пустых узлов, занятых одним электроном, и узлов, занятых двумя электронами (D^+ , D^0 , D^- -состояния U -минус центров, соответственно). Энергии ионизации D^- и D^0 обозначены на рис.1 энергиями E_1 и E_2 . Возмущение, связанное со вторым чле-

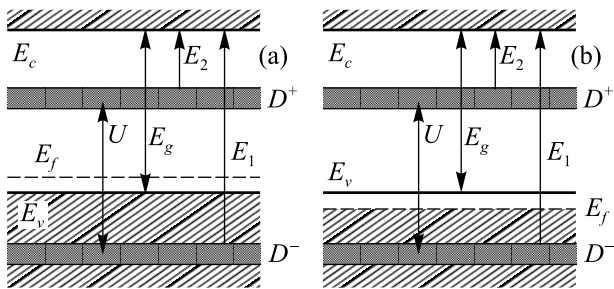


Рис.1. Зонная диаграмма $Y_1Ba_2Cu_3O_x$. Темным цветом отмечены зоны D^+ и D^- состояний U -минус центров: (а) случай недодопированных образцов, уровень Ферми лежит выше валентной зоны; (б) случай оптимально допированных и передопированных образцов, уровень Ферми лежит внутри валентной зоны

ном в (1), то есть ситуация с $t_{ij} \neq 0$ приводит к появлению делокализованных зонных состояний пар и состояния D^+ и D^- расщепляются на зоны двухчастичного (бозонного) переноса – зоны U -минус центров. При этом перенос заряда с одного U -минус центра на другой происходит с помощью двух виртуальных одноэлектронных переходов так, что энергия зонного движения пар равна t_{ij}^2/U [3].

Основное отличие данной модели от теории БКШ заключается в том, что в БКШ предполагается одновременное образование пар и переход их в конденса-

рованное состояние при температуре сверхпроводящего перехода. В рассматриваемой же модели связанные в пару электроны существуют при температурах, много выше комнатной, а при T_c происходит только их конденсация, приводящая к сверхпроводимости.

Применимость модели. Модель U -минус центров была первоначально разработана для объяснения сверхпроводимости в халькогенидных стеклообразных полупроводниках (ХСП), так как в них экспериментально подтверждено наличие большой концентрации U -минус центров. После успешного применения модели к этим материалам [4] она была применена для описания свойств ВТСП системы $YBaCuO$. С помощью рассматриваемой модели удалось объяснить с использованием реальных физических величин высокие значения температуры сверхпроводящего перехода (T_c). Оценка T_c производилась по формуле (2) из работы [3]:

$$T_c = W \cdot (1 - 2\nu) / \ln(\nu^{-1} - 1), \quad (2)$$

где W – ширина зоны двухчастичного переноса, равная в простой кубической решетке, состоящей из U -минус центров, $2zt_{ij}^2/U$, z – число ближайших соседей одного U -минус центра; ν – относительная концентрация пар, равная $n/2D$ (n – концентрация электронов в системе U -минус центров, а D – концентрация U -минус центров).

Согласно формуле (2), зависимость T_c от ν имеет куполообразную форму с максимумом при $\nu = 1/2$, при этом, когда ν больше $1/2$, сверхпроводимость возникает в зоне D^+ , а когда ν меньше $1/2$, – в зоне D^- . Поэтому, как было показано в работе [5], формула (2) совершенно естественно объясняет куполообразную зависимость температуры сверхпроводящего перехода от степени допирования, которая наблюдается экспериментально в целом ряде ВТСП систем. На рис.2, для примера, приведена куполообразная зависимость T_c от степени допирования кислородом x в системе $YBaCuO$.

В работе [5] предполагалось, что U -минус центрами являются некоторые атомы меди вместе со своим кислородным окружением, и предполагалось, что при структурном фазовом переходе в системе $YBaCuO$ по мере допирования кислородом в системе U -минус центров происходит переход от z , равного 4, к z , равному 6. Теоретические зависимости T_c от x нанесены штриховыми линиями для z , равного 4 и 6, а суммарная теоретическая зависимость T_c от x соответствующая переходу с одной пунктирной линии на другую, нанесена сплошной линией. Связь степени

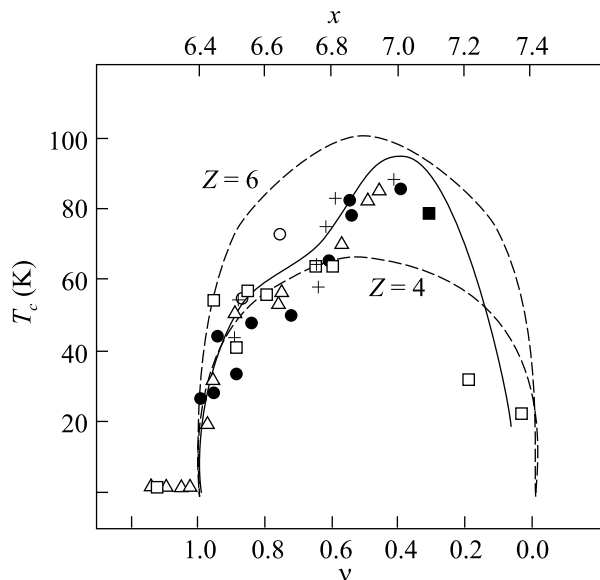


Рис.2. Зависимость T_c в $Y_1Ba_2Cu_3O_x$ от допирования кислородом. Параметр ν связан с допированием x по формуле $\nu = 7.4 - x$ [5]. Ссылки на экспериментальные работы приведены также в [5]

допирования x с параметром ν из формулы (2) определялась в [5] по формуле $\nu = 7.4 - x$.

По нашему мнению, отличие сверхпроводников на основе купратов от классических БКШ сверхпроводников заключается в том, что в теории БКШ электроны из зоны проводимости (или валентной), находящиеся рядом с уровнем Ферми, при сверхпроводящем переходе образуют пары, которые впоследствии являются сверхпроводящими носителями заряда. В модели же U -минус центров связанные пары, отвечающие за сверхпроводимость, существуют при температурах, гораздо больших температуры перехода. Однако эффективная масса связанной пары настолько велика, что в нормальном состоянии подвижность, а следовательно, и проводимость таких частиц ничтожна мала, таким образом за проводимость в нормальном состоянии отвечают простые дырки или электроны. В $YBaCuO$ U -минус центры забирают на себя из валентной зоны часть электронов, зависящую от температуры и степени допирования. Образовавшиеся в результате этого дырки валентной зоны и являются носителями заряда при температурах выше точки перехода. Поэтому в отличие от БКШ в модели U -минус центров существует два типа носителей: дырки (или электроны) для нормального тока и сильно связанные пары для сверхпроводящего тока.

Рассмотрим теперь подробней ситуацию с псевдощелевыми особенностями проводимости. В конце 90-х годов в некоторых ВТСП на основе оксидов

было замечено аномальное поведение энергетического спектра материала выше точки сверхпроводящего перехода. Известно, что при сверхпроводимости в спектре появляется щель, связанная с образованием пар и переходом их в конденсированное состояние. Однако в некоторых, в основном недодопированных, образцах оксидных ВТСП щель в спектре материала остается и выше точки перехода. Является ли наличие такой щели признаком остатков сверхпроводимости или нет, остается до конца нерешенным вопросом, и поэтому она названа псевдощелью. По этому поводу существуют несколько точек зрения.

Некоторые исследователи [1] полагают, что псевдощель в ВТСП аналогична псевдощели по подвижности в неупорядоченных полупроводниках, в частности в ХСП. Известно, что в ХСП материалах в запрещенной зоне имеются “хвосты” плотности состояний из валентной и проводящей зон. Благодаря этим хвостам ширина запрещенной зоны может сильно сужаться, а в некоторых случаях, когда эти плотности состояний перекрываются, вообще исчезнуть. Поскольку подвижность носителей заряда при нулевой температуре в этих хвостах равна нулю, а плотность состояния конечна, соответствующий энергетический интервал называют псевдощелью [6].

Существует и другая точка зрения, в которой предполагается, что в исследуемых ВТСП материалах какая-то часть пар существует в когерентном состоянии при температурах, превышающих сверхпроводящую на десятки и сотни градусов. Считается, что именно благодаря этим оставшимся парам в материале проявляется сверхпроводящая щель в спектре. К тому же сверхпроводимость, которой обладают эти пары, влияя на проводимость материала, эффективно уменьшает его удельное сопротивление (эффект добавочной проводимости) [7].

Как видно, оба приведенных здесь подхода для объяснения псевдощели противоположны по своей физической природе и могут каждый объяснить только полупроводниковое поведение или добавочную проводимость.

Подход к решению данной проблемы с точки зрения модели U -минус центров позволил дать единое объяснение псевдощелевых особенностей ВТСП.

Учтем для этого особое свойство U -минус центров, открытое в ХСП [8, 9] – их способность пинниговать уровень Ферми. Эффект пиннинга заключается в том, что пока концентрация примесей в ХСП не превышает концентрацию U -минус центров, уровень Ферми всегда остается посередине между зонами D^+ и D^- . Этот же эффект может присутствовать и в ВТСП, если там существуют U -минус центры.

В [10] предполагалось, что середина между зонами U -минус центров в недодопированных образцах лежит чуть выше верха валентной зоны (рис.1а). Это приводит к тому, что в рассматриваемых ВТСП на активацию одного электрона из полностью занятой валентной зоны надо затратить не энергию, сравнимую с величиной запрещенной зоны, а энергию, соответствующую нескольким мэВ, то есть равную щели между верхом валентной зоны и серединой между зонами U -минус центров. Ввиду малой величины эта щель будет проявляться только при температурах ниже 100–150 К, то есть при температурах порядка T_c . Расчеты, сделанные с применением метода действующих масс [10], показали хорошее согласие экспериментальных и теоретических данных (рис.3), и это позволило нам заключить, что небольшой зазор

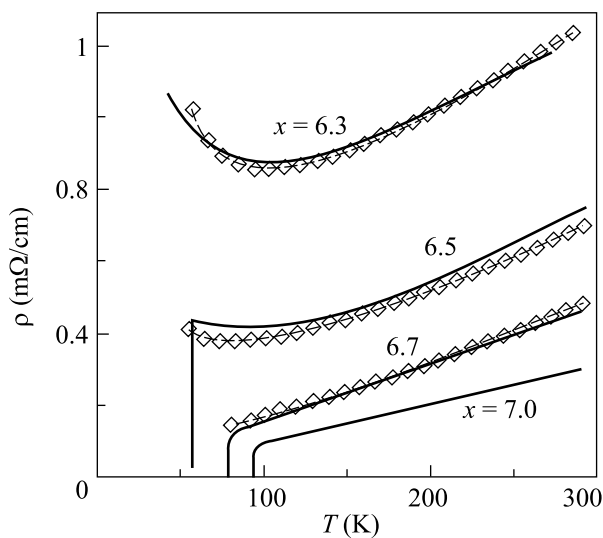


Рис.3. Зависимость удельного сопротивления от температуры. Сплошными линиями показаны экспериментальные данные при различном содержании кислорода [11]. Ромбиками показаны теоретически рассчитанные зависимости для недодопированных образцов [10]

между верхом валентной зоны и серединой между зонами U -минус центров и есть псевдощель. Отсюда ясно, что в нашей модели псевдощель в недодопированных $Y_1Ba_2Cu_3O_x$ не носит сверхпроводящего характера, а является реальной щелью и своим появлением полностью обязана свойству U -минус центров пинниговать уровень Ферми посередине между D^+ и D^- зонами (рис.1а).

Псевдощель в оптимально допированных образцах. Точные измерения удельного сопротивления материала в зависимости от температуры показали, что для образцов, близких по содержанию кис-

лорода к оптимальным, есть отклонение от металлического хода проводимости [7].

Если в недодопированных образцах отклонение было в сторону полупроводниковой зависимости и температурная зависимость сопротивления по мере уменьшения температуры загибалась вверх (рис.3), то в рассматриваемых образцах она загибается вниз, возникает так называемая добавочная проводимость. Такая аномалия часто также связывается с проявлением псевдощели.

Покажем, что “загибы вверх” и “загибы вниз” в модели U -минус центров имеют одну физическую природу и связаны с тем, что в первом случае уровень Ферми (E_f) находится над верхом валентной зоны, а во втором он находится внутри валентной зоны (рис 1). Гамильтониан (1) с учетом валентной зоны преобразуется в выражение, где последнее слагаемое описывает валентную зону:

$$H = E_2 \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} - U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_k \varepsilon_k a_{k\uparrow} a_{k\downarrow}. \quad (3)$$

В гамильтониане (3) мы пренебрегли членом $\sum t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}$, связанным с переходом электрона с узла на узел, так как для статистики заселения уровней он несуществен. Будем считать, что электроны валентной зоны и U -минус центров непосредственно не взаимодействуют, поэтому гамильтониан (3) описывает две независимые подсистемы. Тогда термодинамический потенциал системы можно рассматривать как сумму двух независимых потенциалов: для состояний U -минус центров и для состояний валентной зоны:

$$\Omega = \Omega_U + \Omega_v. \quad (4)$$

В следующем выражении суммирование проводится по состояниям U -минус центров, которые описываются набором n_1 и n_2 . Здесь n_1 соответствует заполнению U -минус центра одним электроном, а n_2 – связанной парой электронов. Возможные значения чисел заполнения для U -минус центра: отсутствие электрона ($g = 1, n_1 = 0, n_2 = 0$), один электрон на центре (уровень энергии E_2 дважды вырожден, $g = 2, n_1 = 1, n_2 = 0$), на центре находится связанная пара ($g = 1, n_1 = 2, n_2 = 1$). Поскольку для всех U -минус центров энергии одинаковы, а общее число центров – D , то получаем:

$$\Omega_U = -T \ln \left(\sum_{n_1, n_2} g(n_1, n_2) \times \exp \left(\frac{\mu n_1 - n_1 E_2 - n_2 U}{T} \right) \right)^D =$$

$$= -T \cdot D \ln \left(1 + 2 \exp \left(-\frac{E_2 - \mu}{T} \right) + \exp \left(-\frac{2E_2 - U - 2\mu}{T} \right) \right). \quad (5)$$

Вторая часть потенциала Ω_v соответствует валентной зоне, и суммирование в ней производится классически по двум состояниям 0 и 1. Суммирование в валентной зоне по состояниям, соответствующим разным волновым векторам \mathbf{k} , можно заменить интегралом:

$$\begin{aligned} \Omega_v &= \sum_k \Omega_k = \\ &= \sum_k -T \ln \left(\sum_{n_k=0,1} \exp \left(\frac{\mu n_k - \varepsilon_k n_k}{T} \right) \right) = \\ &= -T \sum_k \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{\varepsilon_k - \mu}{T} \right) \right) = \\ &= -T \int \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{\varepsilon_k - \mu}{T} \right) \right) d\mathbf{k}. \end{aligned} \quad (6)$$

Таким образом, конечное выражение для термодинамического потенциала (4) имеет вид

$$\begin{aligned} \Omega &= -T \cdot D \ln \left(1 + 2e^{(E_2 - \mu)/T} + e^{(2E_2 - U - 2\mu)/T} \right) - \\ &= -T \int \ln \left(1 + e^{(\varepsilon_k - \mu)/T} \right) d\mathbf{k}. \end{aligned} \quad (7)$$

Рассчитаем полную концентрацию электронов N в системе. Второе слагаемое в (8) дает ферми-распределение электронов в валентной зоне. Первое слагаемое в (8) соответствует числу электронов в системе U -минус центров:

$$\begin{aligned} N &= -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = D \frac{2e^{(E_2 - \mu)/T} + 2e^{(2E_2 - U - 2\mu)/T}}{1 + 2e^{(E_2 - \mu)/T} + e^{(2E_2 - U - 2\mu)/T}} + \\ &+ \int \frac{A\sqrt{E}}{1 + e^{(\mu - E)/T}} dE. \end{aligned} \quad (8)$$

Выражение (8) описывает распределение частиц для невзаимодействующих систем валентной зоны и U -минус центров.

Как говорилось выше, энергия U настолько велика, что можно не учитывать член $\exp(-(E_2 - \mu)/T)$, связанный с концентрацией одиночных электронов. Перейдем также к относительной концентрации, разделив все выражение (8) на удвоенную концентрацию U -минус центров $2D$. Учтем, что рассматриваемая нами система замкнутая, то есть общая концентрация электронов N – константа.

Так как мы пренебрегли одиночными электронами в системе U -минус центров, то изменение относительной концентрации связанных пар ν может происходить только за счет изменения относительной концентрации электронов в валентной зоне. Можно сказать, что каждые два ушедших из валентной зоны электрона образуют связанную пару на центре. Или, другими словами, количество появившихся дырок, которые будут участвовать в проводимости, равно удвоенному количеству пар, образовавшихся на U -минус центрах (9):

$$\Delta\nu \cdot 2D = \Delta p. \quad (9)$$

Рассмотрим подробнее величину $\Delta\nu$. Полная концентрация пар ν определяется по формуле (10). Изменение концентрации пар $\Delta\nu$ будем отсчитывать от параметра ν_0 , который определяет концентрацию пар, заданную химическим строением материала. В случае $Y_1Ba_2Cu_3O_x$ этот параметр определяется количеством кислорода, и мы считаем его известным. Если не учитывать валентную зону, то ν совпадал бы с ν_0 :

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{n}{2D} = \frac{e^{(2E_2 - U - 2\mu)/T}}{1 + e^{(2E_2 - U - 2\mu)/T}} = \\ &= \frac{1}{1 + e^{2((E_2 - U/2) - \mu)/T}}, \quad \Delta\nu = \nu - \nu_0. \end{aligned} \quad (10)$$

Количество дырок рассчитаем, проинтегрировав по всей валентной зоне (E_v – верх зоны, E_{vb} – дно зоны) (11). Для простоты считаем, что дырки в валентной зоне появляются только из-за ухода электронов в систему U -минус центров. Поэтому, если бы не было U -минус центров, то и не было бы дырок в валентной зоне:

$$p = \int_{E_{vb}}^{E_v} \frac{A\sqrt{E_v - E}}{1 + e^{\frac{\mu - E}{T}}} dE, \quad \Delta p = p. \quad (11)$$

Сведя воедино выражения (9)–(11), получим уравнение для химического потенциала μ :

$$\begin{aligned} \nu - \nu_0 - p/2D = 0 &\Leftrightarrow \left(\frac{1}{1 + e^{2((E_2 - U/2) - \mu)/T}} \right) - \\ &- \left(\frac{A}{2D} \int_{E_{vb}}^{E_v} \frac{\sqrt{E_v - E}}{1 + e^{(\mu - E)/T}} dE \right) - \nu_0 = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Найдя химический потенциал μ из уравнения (12), можно, используя формулу (11), рассчитать для заданной температуры количество дырок p в валентной зоне. Зная концентрацию дырок, нетрудно вычислить и удельное сопротивление материала (13) в за-

висимости от температуры для различных значений параметра ν_0 :

$$\rho(T, \nu_0) = \frac{m \cdot T^s}{p(T, \nu_0)}, \quad (13)$$

где m – константа, не зависящая от температуры, s – параметр, зависящий от механизма рассеяния дырок и описывающий температурную зависимость подвижности.

При обработке результатов варьировались два параметра: A/D и $E_2 - U/2$. Параметр A/D определяет отношение полной концентрации состояний в валентной зоне к концентрации U -минус центров. Величина энергетического интервала $E_2 - U/2$ определяет взаимное расположение середины между уровнями D^+ и D^- и верхом валентной зоны (E_v). На рис.4 показаны результаты, полученные для следующих данных: полное количество состояний в валентной зоне – около $2 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$, ее ширина – 2 эВ (дальнейшее увеличение ширины не влияет на расчеты), параметр s равен 1.7, концентрация U -минус центров – $5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, ширина псевдощели $E_2 - U/2$ изменялась от 5.5 до –8 мэВ. Отрицательные значения псевдощели соответствуют тому, что уровень Ферми находится внутри валентной зоны (таким образом верх валентной зоны принят за ноль). Концентрация носителей заряда (дырок) в валентной зоне изменялась как от температуры, так и от степени допирования. Например, для $x = 6.55$ ($E_2 - U/2 = 5.5$ мэВ) при температуре 0 К валентная зона полностью заполнена, а при температуре 300 К концентрация дырок равна $1.3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, для $x = 7.0$ ($E_2 - U/2 = -8$ мэВ) концентрация при 0 К равна $4.77 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, а при 300 К – $4.69 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

При расположении уровней U -минус центров так, что их середина лежит выше валентной зоны более чем на 1 мэВ, материал при температурах, близких к сверхпроводящему переходу, ведет себя как полупроводник (псевдощелевой “загиб вверх”, рис.4 – сплошные линии).

При расположении уровней U -минус центров так, что их середина находится внутри валентной зоны, неглубоко от ее верха, можно наблюдать “загибы вниз” кривой удельного сопротивления на рис.4.

Эффект, возникающий в последнем случае, можно объяснить следующим образом. Когда середина уровней U -минус центров (а следовательно, и уровень Ферми при нуле градусов) входит в валентную зону, то при нулевой температуре все электроны выше уровня Ферми переходят на U -минус центры, образуя количество дырок p_0 . При низких температурах наклон кривой удельного сопротивления будет определяться в основном отношением $1/p_0$.

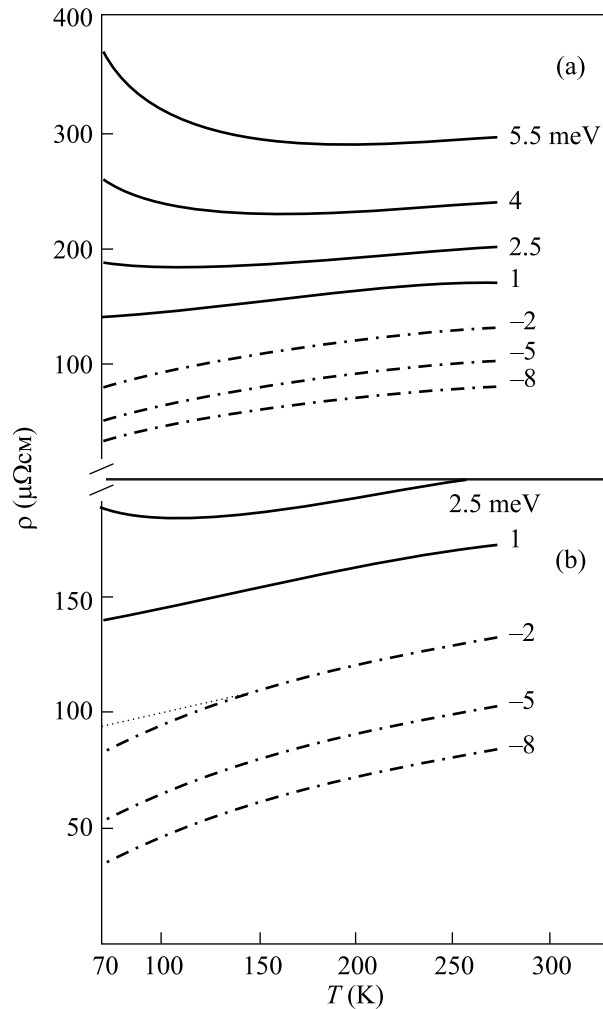


Рис.4. Удельное сопротивление материала в зависимости от допирования кислородом. Справа от кривых показаны значения ширины псевдощели. Отрицательные значения энергии означают, что уровень Ферми лежит внутри валентной зоны (штрихпунктирные кривые). На рис.4б появление “добавочной проводимости” показано в увеличенном масштабе. Для наглядности на одной кривой (–2 мэВ) пунктирной линией показан металлический ход без добавочной проводимости

При более высоких температурах количество электронов, ушедших из валентной зоны на U -минус центры, увеличивается, то есть p растет, и наклон зависимости $\rho(T)$, приближенно определяемый отношением $1/p$, уменьшается (13). Разница между двумя наклонами тем нагляднее, чем меньше первоначальное количество дырок p_0 . Поэтому anomalous ситуация с “загибами вниз” лучше всего видна в образцах, где уровень Ферми еще не очень глубоко вошел в валентную зону (рис.4б). С другой стороны, при очень малых значениях p_0 более крутой наклон кривой удельного сопротивления

$1/\rho_0$ не проявляется, поскольку он должен был бы возникать при температурах, более низких, чем температура сверхпроводящего перехода. То есть эффект “дополнительной проводимости” в этом случае будет практически ненаблюдаем.

Проанализировав всю ситуацию с полупроводниковым поведением ВТСП системы $YBaCuO$ при малом допировании кислородом и с добавочной проводимостью при оптимальном допировании, мы получили изменение положения уровня Ферми при $T = 0$ К в зависимости от степени допирования кислородом (рис.5). Такое движение уровня Ферми подтверждается возрастанием проводимости материала

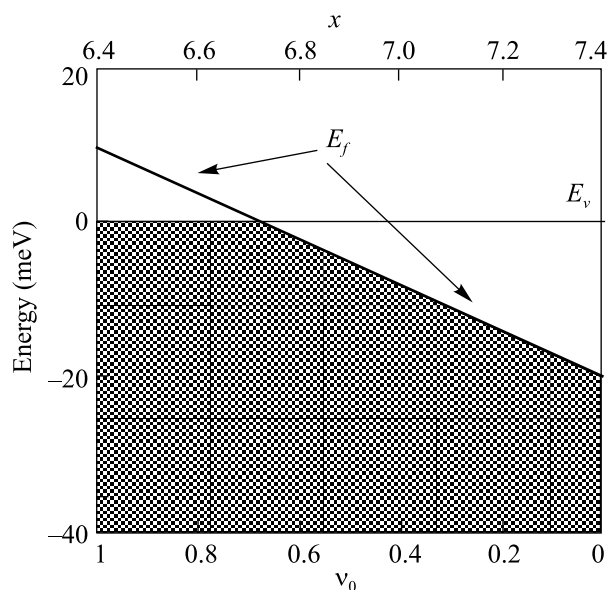


Рис.5. Положение уровня Ферми в зависимости от степени допирования кислородом материала $Y_1Ba_2Cu_3O_x$. Параметр ν_0 связан с x по формуле $\nu_0 = 7.4 - x$ [5]. Серым цветом показано заполнение электронами валентной зоны. По мере того, как уровень Ферми проникает в валентную зону, электроны, лежащие выше него, уходят на U -минус центры

с допированием, так как при больших концентрациях кислорода уровень Ферми все больше входит в валентную зону, тем самым увеличивая в ней количество дырок, отвечающих за проводимость. На рис.2 на оси абсцисс была построена зависимость от ν , а не от ν_0 , как на рис.5. Это обосновано тем, что на момент получения приведенных на рис.2 данных еще не было учтено влияние валентной зоны, а в этом случае ν и ν_0 совпадают.

Выводы. В рамках модели U -минус центров с единых позиций объяснен феномен псевдощели в недодопированных и оптимально допированных кислородом образцах ВТСП системы $Y_1Ba_2Cu_3O_x$. В модели U -минус центров за сверхпроводимость отвечают зоны D^+ и D^- состояний U -минус центров, а за проводящие свойства в нормальном состоянии – дырки валентной зоны.

Показано, что псевдощелевые особенности проводимости не связаны непосредственно со сверхпроводимостью, а возникают из-за существования статистического взаимодействия U -минус центров и дырок валентной зоны. Именно из-за этого взаимодействия концентрация дырок в валентной зоне не остается постоянной. Ее изменения с температурой отличаются для различных взаимных расположений уровня Ферми и верха валентной зоны. Эти отличия и приводят к различию в температурных зависимостях проводимости в недодопированных и оптимально допированных образцах. Таким образом, предположение, сделанное в модели U -минус центров, о том, что в ВТСП при температурах выше температуры сверхпроводящего перехода существуют два типа носителей заряда: связанные пары электронов (дырок) и просто одиночные дырки, подтвердилось при расчетах проводимости материала в нормальном состоянии.

1. M. V. Sadovskii, Usp. Fiz. Nauk **171**, 539 (2001).
2. L. G. Aslamazov and A. I. Larkin, Phys. Lett. **A26**, 238 (1978).
3. I. O. Kulik and A. G. Pedan, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **79**, 1469 (1980).
4. К. Д. Цэндин, Б. П. Попов, Письма в ЖТФ **24**, 45 (1998).
5. K. D. Tsendin and B. P. Popov, Supercond. Sci. Technol. **12**, 255 (1999).
6. Н. Ф. Мотт, Э. Дэвис, *Электронные процессы в некристаллических веществах*, М.: Мир, 1974 (N. F. Mott and E. A. Davis, *Electron Processes in Non-Crystalline Materials*, Oxford, Clarendon Press, 1979).
7. Д. Д. Прокофьев, М. П. Волков, Ю. А. Бойков, ФТТ **45**, 1168 (2003).
8. D. Adler and E. F. Yoffa, Phys. Rev. Lett. **36**, 1293 (1975).
9. P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1975).
10. K. D. Tsendin and D. V. Denisov, Supercond. Sci. Technol. **16**, 80 (2003).
11. S. Tanaka, S. Uchida, H. Takagi et al., Int. J. Mod. Phys. **B1**, 755 (1987).