

ИССЛЕДОВАНИЕ 3d-ЗОНЫ МЕДИ В  $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-x}$ 

В.Г.Бабаев, В.В.Хвостов, П.В.Шибает

Приведены результаты исследования структуры 3d-зоны меди сверхпроводящей пленки при двух температурах (300 и 80 К). Обнаружено уменьшение перекрытия орбиталей Cu–O связей и эффективного потенциала отталкивания дырок при низкой температуре.

Характерной особенностью новых высокотемпературных сверхпроводников является близость к переходу металл-диэлектрик. Исследования сложных окислов со структурой перовскита позволили построить обобщенную фазовую диаграмму, из которой следует, что существуют критические значения интеграла перекрытия металл-кислород, при которых происходит скачкообразный переход от диэлектрика к антиферромагнетику, а затем к металлу или сверхпроводнику. Это связано с усилением спин-спинового взаимодействия, описываемого константой  $j = 4t^2/U$ , а также увеличением степени делокализации электронов d-оболочки. Эти тенденции играют решающую роль в теории резонансных валентных связей<sup>2</sup> и спин-спинового спаривания<sup>3</sup>.

Как известно, в переходных d-металлах из-за сильного дырочно-дырочного взаимодействия возникает резонанс в оже-спектре. Плотность состояний в этом случае сложным образом входит в оже-спектр и профиль оже-линии описывается следующим выражением<sup>4</sup>

$$A(E) = \frac{N(E)}{(1 - UI(E))^2 + (U\pi N(E))^2}, \quad (1)$$

где  $N(E)$  – самосвертка плотности состояний,  $U$  – эффективный потенциал взаимодействия дырок и  $I(E) = \int \frac{N(E')dE'}{(E - E')}$ . Из оже-спектра можно получить самосвертку плотности состояний после представления формулы (1) в виде

$$F(E) = U\pi A(E) = \text{Im} \left( \frac{1}{1 - G(E)} \right), \quad (2)$$

где  $G(E) = UI(E) + iU\pi N(E)$ .

Используя соотношение между реальной и мнимой частями функции  $1/[1 - G(E)]$ , можно получить

$$F'(E) = \text{Re} \left( \frac{1}{1 - G(E)} \right) = 1 - \frac{1}{\pi} \int \frac{F(E')dE'}{E - E'}.$$

Зная  $F(E)$  и  $F'(E)$ , легко вычислить самосвертку плотности состояний

$$U\pi N(E) = \text{Im} G(E) = \frac{F(E)}{F(E)^2 + F'(E)^2}.$$

Поскольку из эксперимента величина  $F(E)$  известна с точностью до постоянного множителя, определяемого прибором, исходный оже-спектр нормировался так, чтобы полученное значение  $N(E)$  при подстановке в (1) давало точное значение функции  $F(E)$  для любых энергий  $E$ .

Эксперименты проводились на спектрометре "ESCALAB-5" с полусферическим анализатором с абсолютным разрешением 0,2 эВ. В качестве образца использовалась сверхпроводящая пленка с  $T_K = 82$  К. Для уменьшения воздействия рентгеновского излучения на поверхность пленки измерения проводились только при двух температурах.

На рис. 1 представлены экспериментальные  $L_3VV$  оже-спектры меди, полученные при 300 (а) и 80 К (б). Точками показаны исходные спектры, а сплошной линией после удаления фона неупругих потерь. Видно, что профиль линий для разных температур существ-

венно отличается друг от друга. Максимум спектра при 80 К сдвинут в сторону больших энергий на 2,4 эВ. На рис. 2 сплошными линиями показаны результаты расчетов по этим спектрам самосвертки плотности состояний  $U\pi N(E)$  и функции  $1 - UI(E)$ . Точками приведены восстановленные по формуле (1) спектры, которые с точностью до 2% совпадают с экспериментальными, что свидетельствует о правильной нормировке. Энергия здесь и далее отсчитывается от уровня Ферми. Рассчитанные величины  $U\pi N(E)$  и  $1 - UI(E)$  для  $T = 80$  К указывают на резкое изменение  $3d$ -зоны меди. Точка резонанса (где  $1 - UI(E) = 0$ ) сдвигается в сторону меньших энергий, что приводит к меньшему значению энергии максимума оже-спектра.

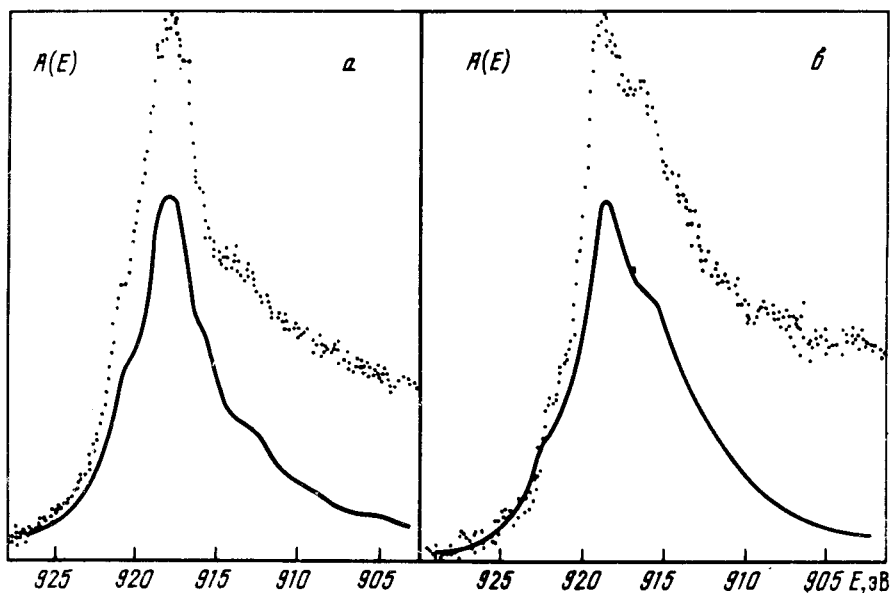


Рис. 1. Профили оже-линии меди при 300 (а) и 80 К (б)

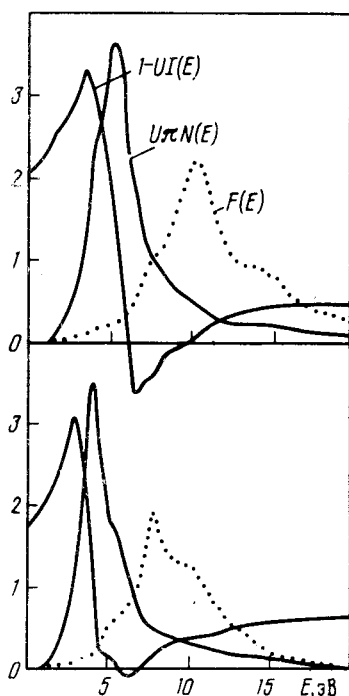


Рис. 2. Рассчитанные по оже-спектрам функции  $U\pi N(E)$  и  $1 - UI(E)$

На рис. 3 сплошной линией представлены результаты обращения самосвертки плотности состояний для 300 К (а) и 80 К (б). Для сравнения на этом же рисунке приведены теоретические кривые локальной плотности состояний на атомах меди в двумерном слое  $\text{CuO}_2$  (пунктир) и в цепочках вдоль оси  $c$  (точки) <sup>5</sup>. Видно, что основной максимум плотности состояний находится при энергии 2,5 эВ. Энергетическое положение всех особенностей экспериментальной кривой (рис. 3а) точно совпадает с приведенными теоретическими данными. Из расчетов локальной плотности состояний  $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  <sup>5</sup> и экспериментальных данных для чистой меди <sup>6</sup> следует, что основной максимум (2,5 эВ) соответствует дважды вырожденным  $3d_{\pi}$ -орбиталям меди, слабо перекрывающимся с  $2p$ -орбиталями кислорода, а остальные особенности спектра плотности состояний соответствуют гибридным  $3d_{\sigma}\text{Cu}-2p\text{O}$ -орбиталям.

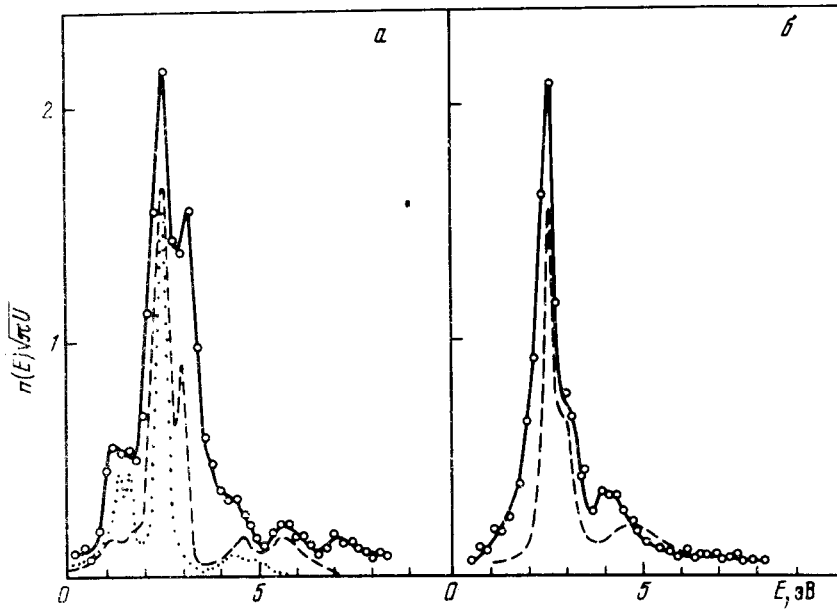


Рис. 3. Экспериментальные кривые плотности состояний меди в  $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  — сплошные линии; теоретические данные по локальной плотности состояний <sup>5</sup> — пунктир и точки (а); экспериментальная плотность состояний чистой меди <sup>6</sup> — пунктир (б)

При низкой температуре в плотности состояний имеется лишь один пик при 2,5 эВ и наплыв при 4,5 эВ. Кривая плотности состояний в этом случае близка к плотности состояний чистой меди (пунктир), полученной методом фотоэлектронной спектроскопии <sup>6</sup>, у которой  $3d$ -зона локализована. Наличие широкой зоны при 300 К свидетельствует о достаточно сильном перекрытии  $\text{Cu}-\text{O}$ -орбиталей, приводящим к делокализации  $3d$ -электронов в  $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  и металлической проводимости. Обнаруженное сужение  $3d$ -зоны при низкой температуре означает наличие такого структурного искажения в плоскости  $\text{CuO}_2$ , при котором ослабевает  $\text{Cu}-\text{O}$  взаимодействие. Таким образом, прослеживается тенденция к локализации  $3d$ -электронов с образованием узкой зоны с кулоновским корреляционным взаимодействием. Подобный эффект наблюдается в перовскитах на основе  $\text{Ti}$ ,  $\text{V}$ ,  $\text{Cr}$ , где резкое сужение  $d$ -зоны происходит также из-за уменьшения перекрытия  $d$ -орбиталей этих металлов с  $2p$ -орбиталями кислорода <sup>1</sup>, что при некотором критическом значении интеграла перекрытия приводит к переходу в антиферромагнитное состояние. Структурное искажение плоскости  $\text{CuO}_2$  в  $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  объясняется смещением атомов кисло-

рода, вызванного их попарным притяжением и отталкиванием во взаимно перпендикулярных направлениях<sup>2</sup> или димеризацией Cu—O—Cu-цепочек в той же плоскости<sup>7</sup>.

Интегрируя кривую  $\sqrt{U\pi n(E)}$  на рис. 3 и нормируя  $\int n(E)dE = 1$ , можно оценить величину потенциала  $U_{\text{эфф}}$ . При 300 К  $U_{\text{эфф}}$  равен 4,5 эВ. Эта величина близка к известному значению для меди (5 эВ). При низкой температуре  $U_{\text{эфф}} = 2,5$  эВ. Этот результат чрезвычайно интересен, поскольку  $U_{\text{эфф}}$  входит в знаменатель константы  $j$ , которая прямо связана с критической температурой сверхпроводимости.

#### Литература

1. Базуев Г.В., Швейкин Г.Р. Сложные оксиды элементов с достраиваемыми  $d$ - и  $f$ -оболочками. М.: Наука, 1985, с. 238.
2. Anderson P.W., Baskarad G. et al. Phys. Rev. Lett., 1987, 58, 2790.
3. Emery V.J. Phys. Rev. Lett., 1987, 58, 2794.
4. Balsarotti A. et al. Phys. Rev. B, 1987, 36, 8285.
5. Temmerman W.M. et al. J. Phys. C, 1988, 21, L867.
6. Tobin J.C. Phys. Rev. B, 1986, 33, 2270.
7. Sarma D.D. Phys. Rev. B, 1988, 37, 7948.

Московский государственный университет  
им. М.В.Ломоносова

Поступила в редакцию  
29 декабря 1988 г.