

УДК 538.945

Н. КРИСТОФЕЛЬ, В. ХИЖНЯКОВ

О ПЕРКОЛЯЦИОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

N. KRISTOFFEL, V. HIZNYAKOV. KÕRGETEMPERATUURILISTE ÜLIJUHTIDE PERKOLATSIOON-
SEST JUHTIVUSEST

N. KRISTOFFEL and V. HIZHNYAKOV. ON PERCOLATIVE CONDUCTIVITY OF HIGH-
TEMPERATURE SUPERCONDUCTORS

Высокотемпературные сверхпроводники $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{5+x}$ переходят с уменьшающейся «активацией» (x) в непроводящее антиферромагнитное (АФ) состояние с высокой температурой Нееля (при $x=0$ T_N равно соответственно 295 и 500 К).

В [1] выдвинуто предположение, что в сверхпроводниках этого типа фазовый переход из непроводящего в проводящее состояние с ростом x приобретает перколяционную природу. При введении Sr в La_2CuO_4 или кислорода в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ создаются дырки. По крайней мере часть из них попадает в плоскость CuO_2 , где разыгрывается сверхпроводимость. Эти дырки меняют АФ-порядок своего ближайшего окружения на ферромагнитный. В результате вокруг дырки создается ферромагнитный кластер, в пределах которого она свободно движется. При этом получается выигрыш в энергии, благодаря превалированию энергии делокализации дырки (на кислородах) над энергией переупорядочения спинов ионов меди. Положение здесь в известной мере аналогично случаю электронных ферромагнитных кластеров (ферронам) в АФ-полупроводниках EuTe и EuSe [2]. Различие заключается в двухмерности и в гораздо меньших размерах рассматриваемых кластеров вследствие более сильных магнитных взаимодействий. Феррон (для EuTe $T_N=4,6$ К) содержит магнитные ионы порядка 10^2-10^3 , а в сверхпроводниках дырочный кластер включает магнитные ионы Cu порядка 10 [1]. С ростом x число таких небольших дырочных кластеров в высокотемпературных сверхпроводниках возрастает. Они приходят в контакт, образуя фрактальные структуры. При некоторой критической концентрации дырок (x_c) возникает кластер протекания макроскопического размера и кристалл переходит в проводящее состояние.

Сама сверхпроводимость связывается в [1] с низкой размерностью движения носителей тока (дырок) в условиях перколяции. Представляет очевидный интерес провести оценки предела перколяции (x_c), необходимого для образования распространяющихся состояний для дырок в высокотемпературных сверхпроводниках, с целью проверки совместимости перколяционной гипотезы с имеющимися экспериментальными данными. Полученные нами результаты свидетельствуют в пользу перколяционной гипотезы работы [1].

Идея оценки x_c заключается в следующем. Перколяционный кластер имеет фрактальный характер и, кроме того, известно среднее координационное число Z_c в нем, отвечающее протеканию [3]. В двухмерном случае при полном вероятном объединении частиц при контакте $Z_c=2,2$ (это число лишь незначительно зависит от деталей реализации

физической ситуации). Оценив эффективное координационное число Z_e как функцию активирующей концентрации x , находим x_c из условия $Z_e(x_c) = Z_c$. Такой прием использовался в [4] для выяснения характера (локализованные или распространяющиеся) электронных состояний на системе подвижных ионов суперионных проводников.

Рассмотрим сначала систему $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Легирование добавляет здесь x дырок на формульную единицу, т. е. $2x$ дырок на ячейку. Предположим, что все дополнительные дырки садятся только на ионы $\text{O}(1)$ -типа в CuO_2 -плоскостях. Тогда концентрация дырок, приходящаяся на один ион кислорода в Cu -плоскости равна $x/2$. Эффективное координационное число затравочной дырки будет определяться всеми кислородами $\text{O}(1)$, входящими в исходный кластер с параллельно ориентированными спинами ионов Cu , так как дырка движется по ним практически свободно. Согласно [1] размер кластера L определяется энергетическими параметрами задачи: $L \sim (U/T)^{3/4}a$, где U — энергия отталкивания Хаббарда $\text{Cu}(d_{x^2-y^2})$ -электронов с антипараллельными спинами, T — резонансный интеграл переноса их на соседний ион кислорода, a — расстояние $\text{O}(1)$ — Cu . Для La -системы ($U/T \sim 5$) это квадрат со стороной $5d$ (d — расстояние $\text{O}(1)$ — $\text{O}(1)$), содержащий 13 ионов Cu и 36 $\text{O}(1)$. Из последних 16 центральных соединены с кластером двойными связями O — Cu , а 20 внешних — одинарными. На внешние $\text{O}(1)$ вероятность попадания дырки в 2 раза меньше. Поэтому активный кластер будет содержать 26 ионов $\text{O}(1)$.

Такой кластер с затравочной дыркой фиксированного спина в условиях протекания должен соприкасаться с аналогичным кластером другой дырки того же спина, что расширяет круг эффективных соседей. Сторону квадрата следует удвоить, причем число $\text{O}(1)$ возрастает

в 8 раз. В итоге, $Z_e = \frac{8 \cdot 26}{2} \cdot \frac{x}{2}$ (множитель $1/2$ добавляется в связи с требованием согласования спинов), так что условие $Z_e = Z_c$ дает $x_c = 0,042$. Такая оценка x_c согласуется с экспериментальным значением $x_c = 0,05$ для $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ [5], а также с $x_c = 0,06$, найденным для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ [6]. Если активирующие дырки распределялись бы равномерно по всем кислородам, значение x_c получалось бы вдвое большим.

Обратимся теперь к $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, где обогащение кислородом добавляет $2x$ дырки на ячейку. Сушестввенно, что в системе с $x=0$ ионы $\text{Cu}(1)$ однозарядны [7, 8]. Логично предположить, что введение кислорода, который, как известно, занимает «цепочечные» $\text{O}(1)$ -позиции в этой системе, будет дотраивать структуру соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Поэтому следует считать, что половина из добавочных дырок идет на $\text{Cu}(1)$, а другая распределяется по всем ионам кислорода (имеем $\text{Y}^{3+}\text{Ba}_2^{2+}\text{Cu}_{1-x}^{1+}\text{Cu}_{2+x}^{2+}\text{O}_6^{2-}\text{O}_x^{-1}$). При равномерном распределении дырок между 2 $\text{O}(4)$ и 4 $\text{O}(2; 3)$ на один кислород приходится $x/6$ дырок.

В $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ можно принять $U/T \sim 4$, так как согласно [1] энергия магнитного взаимодействия спинов и, тем самым, T_N , пропорциональна $(U/T)^3$ и U/T примерно в 1,2 раза меньше, чем в La -системе. Соответственно оценка дает меньшую величину ($3d$) размера активного кластера. Он содержит 5 $\text{Cu}(2)$ и 16 $\text{O}(2; 3)$, расположенных в CuO_2 -слое. Граничных $\text{O}(2; 3)$ здесь 12 и активный кластер содержит

10 $\text{O}(2; 3)$. Аналогичная La -системе оценка дает здесь $Z_e = \frac{8 \cdot 10}{2} \cdot \frac{x}{6}$

и $x_c = 0,33$. Если дырки распределяются только между $\text{Cu}(1)$ и $\text{O}(2; 3)$ и не попадают на $\text{O}(4)$, то $x_c = 0,22$. Значение $x_c = 0,33$ согласуется с экспериментальными данными $x_c = 0,4$ [10], $x_c = 0,35$ [9] в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, а также $y = 0,6$ в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ [11].

Таким образом, по крайней мере можно утверждать, что появление сверхпроводящих свойств в модели работы [1] у типичных систем с высокими T_c , связываемое с образованием ферромагнитного типа кластера протекания возможно при разумных значениях параметров задачи.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Hizhnyakov, V., Sigmund, E.* // *Physica*, 1988, **156**, № 5.
2. *Нагаев Э. Л.* // *УФН*, 1975, **117**, № 3, 437—492.
3. *Смирнов Б. М.* // *УФН*, 1986, **149**, № 2, 177—219.
4. *Кристофель Н. Н.* // *ФТТ*, 1987, **29**, № 8, 742—744.
5. *Kitaoka, Y. et al.* // *J. Phys. Soc. Japan*, 1988, **57**, № 3, 734—736.
6. *Shafer, M. W., Penney, T., Olson, B. L.* // *Phys. Rev.*, 1987, **36B**, № 7, 4047—4049.
7. *Freeman, A. J. et al.* // *Physica*, 1987, **148B**, № 2, 212—217.
8. *Sarma, D. D., Rao, C. N. R.* // *Solid State Commun.*, 1988, **65**, № 1, 47—49.
9. *Brewer, J. H. et al.* // *Phys. Rev. Lett.*, 1988, **60**, № 11, 1073—1076.
10. *Tranquada, J. M. et al.* // *Phys. Rev.*, 1988, **38B**, № 4, 2477—2485.
11. *Kitaoka, Y. et al.* // *J. Phys. Soc. Japan*, 1988, **57**, № 3, 737—740.

Институт физики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
23/1 1989