

## ЭЛЕКТРОННАЯ ПЛОТНОСТЬ ПРЕДЕЛЬНО СЛОИСТЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ *p*- И *n*-ТИПОВ

*В.В.Бабенко, В.Г.Бутько, В.А.Волошин, И.М.Резник, Е.В.Фоскаринo*

*Донецкий физико-технический институт АН Украины  
340114 Донецк, Украина*

Поступила в редакцию 2 марта 1995 г.

Проведен расчет и построены карты распределения электронной плотности предельно слоистых сверхпроводников *p*- и *n*-типов. Показано, что максимальные различия этих двух типов регистрируются в плоскости (0;0;0,5). Высказано предположение, что замена трехвалентного редкоземельного иона на четырехвалентный (например, Pr<sup>4+</sup> или Tb<sup>4+</sup>) может повысить значение  $T_c$ .

Известно, что имеется некоторая корреляция между числом близко расположенных медноокислородных плоскостей и температурой перехода в сверхпроводящее состояние  $T_c$ . Поэтому понятны надежды (частично уже оправдавшиеся), связанные с синтезом предельно слоистых сверхпроводников (the infinite layer superconductors). Эти сверхпроводники могут быть двух типов – с дырочной и электронной проводимостью. Примером первого типа является сверхпроводник Sr<sub>0,7</sub>Ca<sub>0,3</sub>CuO<sub>2</sub> с  $T_c = 110$  К [1]. Примером второго, по утверждению авторов [2], является Sr<sub>1-x</sub>Nd<sub>x</sub>CuO<sub>2</sub> с рекордной для сверхпроводников *n*-типов  $T_c = 44$  К. Причем температура перехода в сверхпроводящее состояние не зависит от концентрации Nd (от  $x = 0,05$  до  $x = 0,10$ ).

В работе [3] рассматривались данные по электронной плотности (ЭП) Sr<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub>CuO<sub>2</sub>, причем расчет велся для отдельных тетрагональных ячеек CaCuO<sub>2</sub> ( $a = 3,86$  Å и  $c = 3,20$  Å) и SrCuO<sub>2</sub> ( $a = 3,926$  Å и  $c = 3,432$  Å). В частности, приводится карта для плоскости (001), из которой можно заключить о сильном Cu–O–взаимодействии, карта для плоскости (010), свидетельствующая о двумерном характере распределения ЭП в *c*-направлении, и карта диагональной плоскости (110), показывающая очень низкую ЭП вокруг узла Ca.

Самосогласованное распределение ЭП нами получено в результате неэмпирических расчетов модифицированным методом Томаса–Ферми [4]. Ранее этим методом исследовались высокотемпературные сверхпроводники YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+x</sub> [5] и La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub> [6].

В настоящей работе расчет распределения ЭП проводится для "четырёх" ячеек, как для дырочного сверхпроводника, так и для электронного, то есть для Sr<sub>3</sub>Ca(CuO<sub>2</sub>)<sub>4</sub> ( $a = 7,814$  Å,  $c = 3,363$  Å, число электронов  $n = 64$ ) и для Sr<sub>3</sub>Nd(CuO<sub>2</sub>)<sub>4</sub> ( $a = 7,90$  Å,  $c = 3,39$  Å,  $n = 65$ ). Структура и ее параметры приводятся на рис.1. Реальный состав сверхпроводника *n*-типа приблизительно Sr<sub>9</sub>Nd(CuO<sub>2</sub>)<sub>10</sub>. Из-за сложности расчета принималась ячейка Sr<sub>3</sub>Nd(CuO<sub>2</sub>)<sub>4</sub>, в которой концентрация неодима выше. Однако принимается, что распределение ЭП вблизи Nd и его ближайших соседей значительно не изменится. Поэтому на картах распределения ЭП приводятся "тройные" ячейки.

Карты распределения ЭП в плоскостях (001) и (010) как для соединения Sr<sub>3</sub>Ca(CuO<sub>2</sub>)<sub>4</sub>, так и для соединения Sr<sub>3</sub>Nd(CuO<sub>2</sub>)<sub>4</sub> очень близки к данным

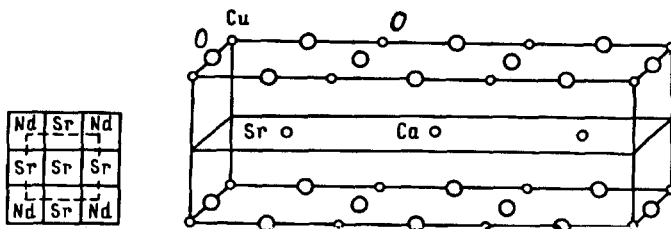


Рис.1. а - Одна из моделей кристалла  $Sr_3Nd(CuO_2)_4$ . Выделена рассчитываемая ячейка.  
 б - Строение ячейки  $Sr_2Ca(CuO_2)_3$

для этих плоскостей, приведенных в работе [3], и поэтому в настоящем сообщении не приводятся. Влияние иона неодима, находящегося на расстоянии  $\sim 1,5 \text{ \AA}$  от этих плоскостей, весьма незначительное (некоторое уменьшение ЭП в центре карты). Наиболее незначительное (некоторое уменьшение ЭП в центре карты). Наиболее резко различие между двумя видами сверхпроводников видно на рис.2, верх которого представляет собой карту плоскости  $(0;0;0,5)$ , расположенной между базовыми плоскостями сверхпроводника  $p$ -типа, а низ - ту же плоскость сверхпроводника  $n$ -типа. Середину рисунка занимает сравнение кривых изменения ЭП по продольным осям карт. Видно, что ЭП сверхпроводника  $p$ -типа изменяется регулярно от нуля в области кора ионов Sr и Ca и до  $\sim 14e$ /ячейку в промежуточной области.

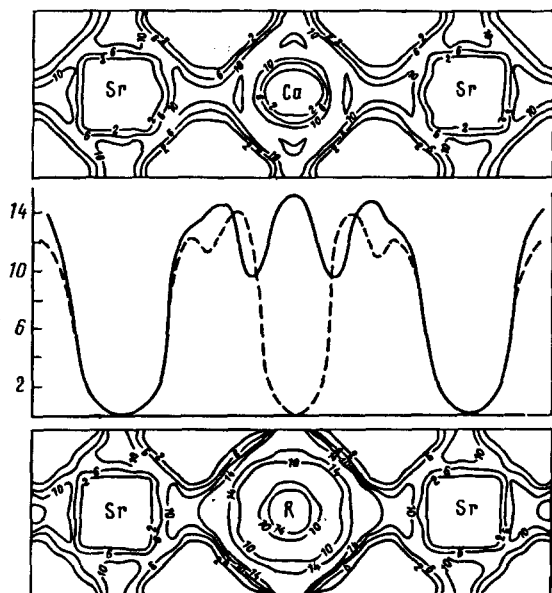


Рис.2. Сравнение ЭП в плоскости  $(0;0;0,5)$   $Sr_3Ca(CuO_2)_4$  (верх) и  $Sr_3Nd(CuO_2)_4$  (низ), в середине сравнение кривых изменения ЭП по продольным осям карт: сплошная линия для  $Sr_3Ca(CuO_2)_4$ , штриховая - для  $Sr_3Nd(CuO_2)_4$ . ЭП выражена в числе электронов на ячейку

В сверхпроводниках  $n$ -типа эта регулярность нарушается в области центрального иона, где ЭП становится максимальной. Разумеется, ясно, что эта

максимальная ЭП обязана трехвалентности редкоземельного атома. Если характер сверхпроводимости  $n$ -типа с его рекордной  $T_c$  определяется повышенной ЭП вблизи центрального редкоземельного атома, то можно предположить, что увеличение этой плотности еще повысит температуру перехода в сверхпроводящее состояние.

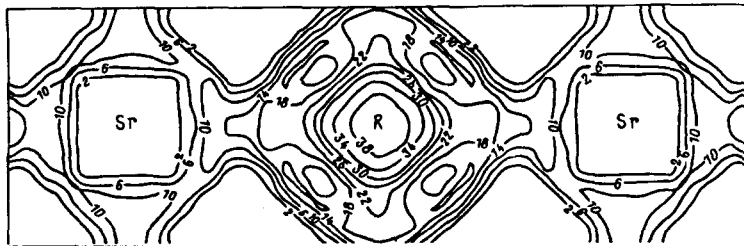


Рис.3. Карта ЭП (0;0;0,5) для  $Sr_3RE^{4+}(CuO_2)_4$

На рис.3 показана карта распределения ЭП плоскости (0;0;0,5) в том случае, если в центре ячейки будет находиться четырехвалентный редкоземельный атом. Наиболее вероятная возможность синтеза такого сверхпроводника представляется в случае замены  $Nd^{3+}$  празеодимом или тербием.

Работа выполнена в рамках темы ГКНТ Украины "NUT" (09.01.01/034-94) при поддержке Международного научного фонда (грант UI G000).

1. M.Azuma, Z.Hiroi, M.Takano et al., *Nature* **356**, 775 (1992).
2. N.Ikeda, Z.Hiroi, M.Azuma et al., *Phys. C* **210**, 367 (1993).
3. D.I.Novikov, V.A.Gubanov and A.J.Freeman, *Phys. C* **210**, 301 (1993).
4. И.М.Резник, *ФТТ* **30**, 3496 (1988).
5. В.В.Бабенко, В.Г.Бутько, И.М.Резник, *СФХТ* **2**, 3, 14 (1989).
6. В.В.Бабенко, В.Г.Бутько, А.А.Буш и др., *ФТТ* **36**, 241 (1994).