

Трансформация зонного спектра ртутных ВТСП и особенности температурной зависимости коэффициента термоэдс

О.И. Бабич, Я.В. Бойко

*Львовский национальный университет им. Ивана Франко
ул. Драгоманова, 50, г. Львов, 79005, Украина
E-mail: orestbabych@gmail.com*

Статья поступила в редакцию 6 августа 2013 г.

На основе модели узкой проводящей зоны проведен анализ температурных зависимостей коэффициента термоэдс ртутных высокотемпературных сверхпроводников $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2+\delta}$ ($n = 1, 2, 3$) при легировании кислородом и катионных замещениях. Определены значения параметров зонного спектра в области уровня Ферми и рассмотрен характер их трансформации. Выявлена корреляция между эффективной шириной зоны и температурой сверхпроводящего перехода T_c .

На основі моделі вузької провідної зони проведено аналіз температурних залежностей коефіцієнта термоерс ртутних високотемпературних надпровідників $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2+\delta}$ ($n = 1, 2, 3$) при легуванні киснем та катіонних заміщеннях. Визначено значення параметрів зонного спектра у області рівня Фермі та розглянуто характер їхньої трансформації. Виявлено кореляцію між ефективною шириною зони та температурою надпровідного переходу T_c .

PACS: 74.25.Fy Транспортные свойства (электрическая и тепловая проводимость, термоэлектрические эффекты и др.);
74.62.Dh Влияние дефектов кристаллической решетки, легирования и замещения;
74.20.-z Теории и модели сверхпроводящего состояния;
74.25.-q Свойства сверхпроводников.

Ключевые слова: высокотемпературная сверхпроводимость, температура сверхпроводящего перехода, коэффициент термоэдс, узкая проводящая зона, пик плотности состояний, уровень Ферми.

1. Введение

Значительный интерес к изучению и практическому использованию ртутных высокотемпературных сверхпроводников (Hg-ВТСП) обусловлен их высокими критическими параметрами.

Информацию об электронном спектре ВТСП можно получить на основе исследования их транспортных свойств. Сверхпроводящие оксиды имеют особенности, нехарактерные для простых металлов, полуметаллов и полупроводников, которые трудно объяснить в рамках классической теории электронного транспорта. Для учета этих специфических зависимостей используют модель, в которой присутствует узкая полоса проводимости на уровне Ферми (пик в плотности состояний $D(E)$ шириной $W \sim 0,1$ эВ). Данные зонно-структурных расчетов свидетельствуют, что узкая полоса существует на фоне более широкой зоны. Од-

нако, если уровень Ферми расположен внутри этого узкого энергетического интервала шириной порядка $k_B T$, то данный пик плотности состояний играет основную роль в нормальных ($T > T_c$) и, возможно, сверхпроводящих свойствах.

При исследовании транспортных свойств сверхпроводников установлено, что абсолютные значения, наклон кривых температурных зависимостей коэффициента Холла $R_H(T)$, особенно сопротивления $\rho(T)$, изменяются в зависимости от дефектов структуры, микротрещин, гранулярности среды. Вклад несовершенств в «тепловое сопротивление» (термоэдс S) значительно меньше, чем в электрическое, и различия в значениях и температурных зависимостях $S(T)$ должны объясняться особенностями электронной структуры материала. Поэтому экспериментальные значения коэффициента Зеебека служат характеристиками исследуемого материала, а не образцов с несовершенствами. Более того, исполь-

зую теоретические выражения, имеем возможность рассчитать абсолютные значения коэффициента термоэдс, тогда как сопротивление и коэффициент Холла вследствие отсутствия необходимых сведений о параметрах материала можно вычислить только с точностью до константы. В связи с отмеченными особенностями анализ проведен на основе температурных зависимостей коэффициента термоэдс.

2. Анализ экспериментальных данных

Объектами исследования выбраны соединения из ртутного гомологического ряда $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2+\delta}$, для которых наблюдается самая высокая из известных в настоящее время температура перехода в сверхпроводящее состояние T_c (для $n = 3$) — порядка 130 и 160 К при атмосферном [1] и повышенном давлении [2,3] соответственно. Для ртутных сверхпроводящих керамик в литературе имеется достаточно большой объем экспериментальных данных по температурным зависимостям коэффициента термоэдс при проведении катионных замещений и анионного легирования.

В настоящей работе были использованы результаты работы [4] по измерению $S(T)$ системы $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ при изменении кислородного индекса δ и при замещении 3 ат.% Cu на Zn (элемент, находящийся рядом в периодической таблице) в плоскости CuO_2 , ответст-

венной за сверхпроводимость. Валентность меди в образцах определяли методом йодометрического титрования, а содержание кислорода устанавливали исходя из валентности меди в приближении стехиометрии металлов. На температурных зависимостях коэффициента термоэдс наблюдается хорошо выраженный максимум при температурах выше температуры сверхпроводящего перехода, а также менее или более протяженный участок практически линейного убывания $S(T)$ при увеличении температуры до 290 К (рис. 1).

В работах [5–9] приведены экспериментальные зависимости для $S(T)$ ВТСП $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ (рис. 2), $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ (рис. 3) и $\text{Hg}_{0,84}\text{Re}_{0,16}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ (рис. 4). Изменение кислородного содержания в полученных образцах задавалось парциальным давлением кислорода внутри отожженной кварцевой трубки, но значения δ не определялись. Авторами настоящей работы были синтезированы образцы и проведены измерения $\rho(T)$ и $S(T)$ при замещении Hg на Pb (рис. 3, вставка). Введение Re, Pb и некоторых других элементов приводит к улучшению химической стабильности без существенных потерь начального значения T_c . При росте содержания кислорода как в чистых, так и в легированных образцах, значения коэффициента термоэдс уменьшаются до возможной инверсии знака для некоторых составов.

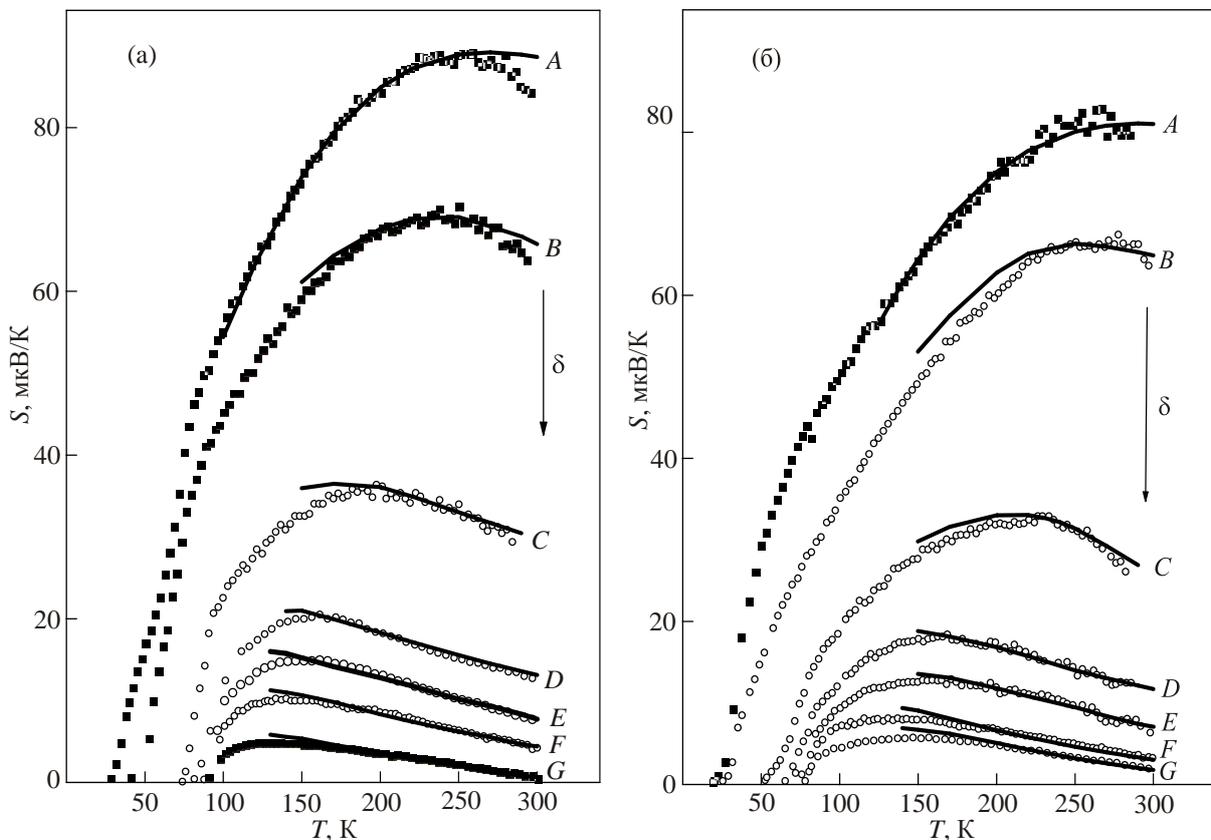


Рис. 1. Температурные зависимости коэффициента термоэдс отожженных $\text{HgBa}_2\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_{4+\delta}$ ($x = 0$) (а) и $\text{HgBa}_2\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_{4+\delta}$ ($x = 0,03$) (б) при различных условиях, приведенных в табл. 1 [4]; сплошные линии — результаты расчета.

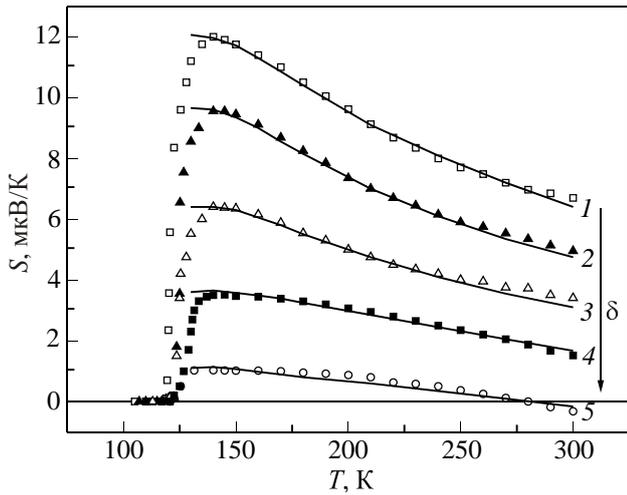


Рис. 2. Температурные зависимости коэффициента термоэдса $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ при изменении кислородного индекса δ [5,6]; сплошные линии — результаты расчета. $E_0 = -7,05$ мэВ; $W = 52,0$ мэВ; $W_1/W_2 = 0,70$; $D(E_F) = 19,07$ эВ $^{-1}$; $F = 0,473$; $T_c = 120,0$ К (1); $E_0 = -4,86$ мэВ; $W = 49,3$ мэВ; $W_1/W_2 = 0,79$; $D(E_F) = 20,09$ эВ $^{-1}$; $F = 0,484$; $T_c = 124,0$ К (2); $E_0 = -3,50$ мэВ; $W = 48,5$ мэВ; $W_1/W_2 = 0,83$; $D(E_F) = 20,51$ эВ $^{-1}$; $F = 0,487$; $T_c = 125,0$ К (3); $E_0 = -2,20$ мэВ; $W = 47,6$ мэВ; $W_1/W_2 = 0,88$; $D(E_F) = 20,97$ эВ $^{-1}$; $F = 0,489$; $T_c = 127,0$ К (4); $E_0 = -2,35$ мэВ; $W = 51,6$ мэВ; $W_1/W_2 = 0,83$; $D(E_F) = 19,44$ эВ $^{-1}$; $F = 0,479$; $T_c = 121,0$ К (5);

3. Методика расчетов

Использование зонных плотностей состояний не всегда дает возможность объяснить транспортные свойства ВТСП. Это может быть связано с неучетом в зонной теории в одноэлектронном приближении корреляционных эффектов. Кроме того, часто отсутствует информация об электронной структуре соединений при отклонении состава от стехиометрии. Поэтому нами использовано модельное представление пика плотности состояний в лоренцевой форме:

$$D(E) = \frac{W}{\pi(E - E_0)^2 + W^2}, \quad (1)$$

где E_0 — расстояние пика от уровня Ферми, W — его ширина.

Температурные зависимости коэффициента термоэдса в феноменологической модели узкой проводящей зоны могут быть представлены в виде [10]:

$$S(T) = -\frac{1}{|e|T} \frac{I_1}{I_0}, \quad (2)$$

где

$$I_1 = \int \sigma_E \left(-\frac{df}{dE} \right) (E - E_F) dE, \quad (3)$$

$$I_0 = \int \sigma_E \left(-\frac{df}{dE} \right) dE, \quad (4)$$

σ_E — проводимость при $T \rightarrow 0$, чувствительная к тонкой структуре плотности состояний на E_F , $f(E - E_F)$ — функция распределения Ферми.

В целях анализа полученных результатов оценивалась также степень заполнения узкой зоны электронами:

$$F(T) = \frac{\int f(E - E_F) D(E) dE}{\int D(E) dE}. \quad (5)$$

Выбирая характер рассеяния носителей, следует принять во внимание, что при интерпретации аналогичных зависимостей $S(T)$ в интерметаллических системах с промежуточной валентностью и тяжелыми фермионами на основе $4f$ -, $3d$ -переходных элементов, логические результаты можно получить, полагая $\sigma_E \sim D^{-1}(E)$ (модель Мотта — достаточно слабое рассеяние, связанное в основном с переходами с p - в d -состояния) [11,12]. Значения подвижности носителей и проводимости для образцов Hg -ВТСП сравнительно малы [3,13], в результате чего в выражениях (3), (4) для σ_E использована зависимость на основе формулы Кубо–Гринвуда $\sigma_E \sim D^2(E)$ (более общий случай сильного рассеяния).

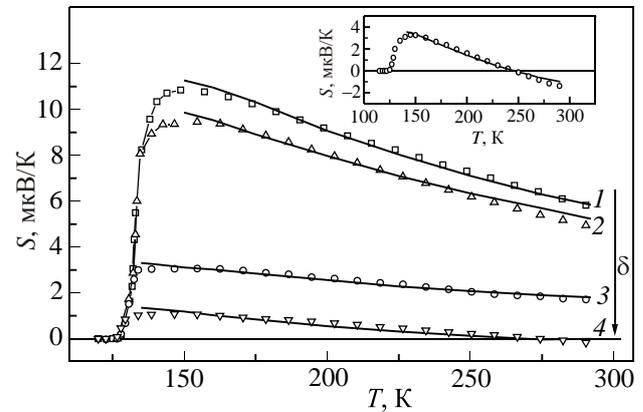


Рис. 3. Температурные зависимости коэффициента термоэдса $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ при изменении кислородного индекса δ [7]; сплошные линии — результаты расчета. $E_0 = -6,40$ мэВ; $W = 45,9$ мэВ; $W_1/W_2 = 0,70$; $D(E_F) = 21,58$ эВ $^{-1}$; $F = 0,474$; $T_c = 128,7$ К (1); $E_0 = -4,60$ мэВ; $W = 45,0$ мэВ; $W_1/W_2 = 0,80$; $D(E_F) = 21,96$ эВ $^{-1}$; $F = 0,488$; $T_c = 130,0$ К (2); $E_0 = -1,18$ мэВ; $W = 43,0$ мэВ; $W_1/W_2 = 0,96$; $D(E_F) = 23,23$ эВ $^{-1}$; $F = 0,499$; $T_c = 133,0$ К (3); $E_0 = -1,61$ мэВ; $W = 44,1$ мэВ; $W_1/W_2 = 0,87$; $D(E_F) = 22,72$ эВ $^{-1}$; $F = 0,484$; $T_c = 131,6$ К (4). На вставке: экспериментальные (о) и расчетные (сплошная линия) данные для термоэдса $\text{Hg}_{0,8}\text{Pb}_{0,2}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$. $E_0 = -4,7$ мэВ; $W = 47,5$ мэВ; $W_1/W_2 = 0,67$; $D(E_F) = 21,50$ эВ $^{-1}$; $F = 0,453$; $T_c = 126,5$ К.

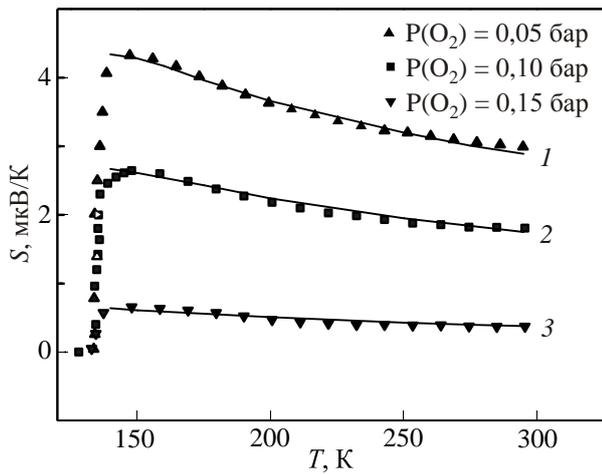


Рис. 4. Температурные зависимости коэффициента термоэдс $\text{Hg}_{0,88}\text{Re}_{0,12}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ при изменении кислородного индекса δ [9]; сплошными линиями показаны результаты расчета. $E_0 = -1,08$ мэВ; $W = 43,3$ мэВ; $W_1/W_2 = 0,99$; $D(E_F) = 23,06$ эВ $^{-1}$; $F = 0,506$; $T_c = 132,6$ К (1); $E_0 = -0,63$ мэВ; $W = 42,8$ мэВ; $W_1/W_2 = 1,00$; $D(E_F) = 23,36$ эВ $^{-1}$; $F = 0,504$; $T_c = 133,2$ К (2); $E_0 = -0,20$ мэВ; $W = 43,2$ мэВ; $W_1/W_2 = 0,99$; $D(E_F) = 23,16$ эВ $^{-1}$; $F = 0,500$; $T_c = 132,7$ К (3).

4. Результаты и их обсуждение

Анализируя температурные зависимости коэффициента термоэдс в модели узкой зоны и добиваясь количественного согласования расчетных и экспериментальных данных, можно оценить параметры зонного спектра и проследить за их трансформацией при изменении состава образцов.

Представление пика на плотности состояний в виде симметричного лоренциана (1) не дает удовлетворительных результатов. Хорошее согласование расчета с экспериментальными зависимостями при $T > T_c$, в частности инверсию знака коэффициента термоэдс, можно получить, если использовать асимметричный пик плотности состояний, который задается положением максимума E_0 относительно уровня Ферми и двумя полуширинами: W_1 при $E < E_0$ и W_2 при $E > E_0$. В работе (на рисунках и в таблице) приведено усредненное значение $W = (W_1 + W_2)/2$. Отметим следующее обстоятельство: если степень заполнения зоны $F > 1/2$, то симметричный лоренциан находится ниже E_F и $S > 0$; если $F < 1/2$ — выше E_F и $S < 0$; при $F = 1/2$ $S = 0$. В случае асимметричной зоны положительные значения S могут наблюдаться и при $F \leq 1/2$.

Температурные зависимости коэффициента термоэдс при изменении состава от области недолегирования к оптимальному легированию кислородом для системы $\text{HgBa}_2\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_{4+\delta}$ ($x = 0$ и $0,03$) приведены на рис. 1. Как показывают результаты расчетов, рост содержания кислорода в чистых Hg-1201 и легированных Zn образцах приводит к уменьшению степени заполне-

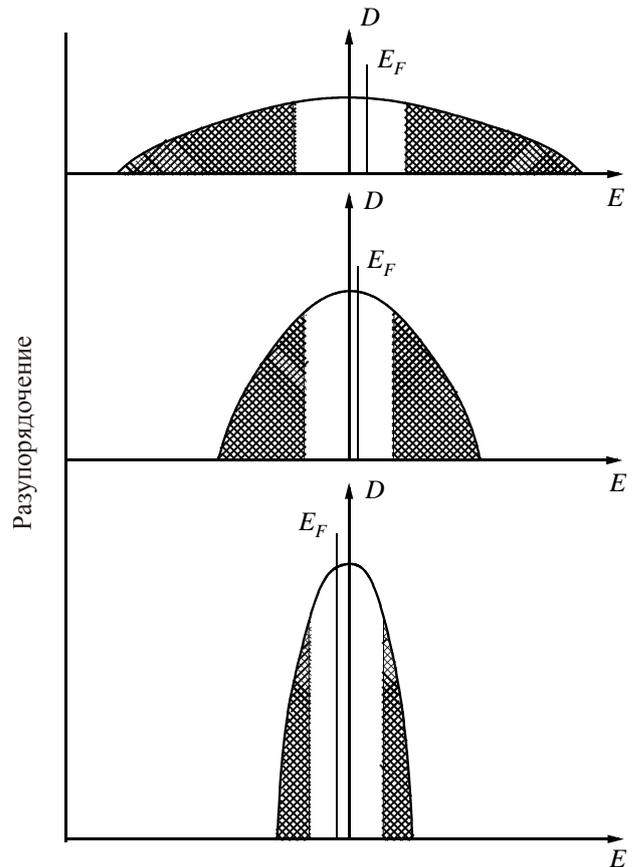


Рис. 5. Расширение зоны и уменьшение пика на плотности состояний с ростом степени разупорядочения (увеличение степени дефектности структуры).

ния зоны электронами. При этом уровень Ферми сдвигается из области меньших величин и более резкой зависимости плотности состояний $D(E)$ ближе к середине зоны (большие значения и менее резкая зависимость $D(E)$), а ширина W и асимметрия (W_1/W_2) узкой проводящей зоны уменьшается (табл. 1). Такое движение E_F можно связать с акцепторным эффектом кислорода — способностью захватывать электроны. Это влияет на поведение коэффициента термоэдс: значения S уменьшаются, а максимум на температурной зависимости смещается в область более низких температур (рис. 1(a)). Увеличение плотности состояний на уровне Ферми коррелирует с ростом температуры перехода в сверхпроводящее состояние T_c [4] (табл. 1). Полученные зависимости соответствуют модели Андерсона: при увеличении содержания кислорода степень упорядочения в системе возрастает, в результате сужения зоны и спада локализованных состояний на ее краях значения функции плотности состояний на уровне Ферми увеличиваются (рис. 5) и улучшаются сверхпроводящие свойства.

Такие же закономерности при возрастании содержания кислорода справедливы и для системы $\text{HgBa}_2\text{Cu}_2\text{O}_{6+\delta}$ (рис. 2). Максимальное значение T_c и

Таблица 1. Данные из [4] для $\text{HgBa}_2\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_{4+\delta}$ ($x = 0$ и $x = 0,03$) и расчетные параметры зонного спектра

$x = 0$	T_c , К	Содержание кислорода	p	E_0 , мэВ	W , мэВ	W_1/W_2	F , при 290 К	$D(E_F)$, эВ ⁻¹
A	36	4,032	0,052	-73,60	112	0,49	0,609	5,76
B	48	4,033	0,062	-53,30	105	0,50	0,556	7,38
C	72	4,043	0,082	-26,80	93	0,55	0,487	10,17
D	82	4,052	0,103	-16,10	87,5	0,59	0,459	11,48
E	89	4,058	0,123	-12,20	82,5	0,63	0,457	12,26
F	95	4,073	0,132	-9,70	79	0,65	0,454	12,87
G	98	4,081	0,168	-7,00	77	0,67	0,450	13,27
$x = 0,03$	T_c , К	Содержание кислорода	p	E_0 , мэВ	W , мэВ	W_1/W_2	F , при 290 К	$D(E_F)$, эВ ⁻¹
A	>2	4,032	0,052	-75,90	125	0,47	0,588	5,66
B	28	4,027	0,061	-56,00	115	0,49	0,550	6,95
C	53	4,043	0,086	-27,40	102	0,53	0,475	9,54
D	69	4,052	0,107	-16,80	96	0,57	0,450	10,62
E	75	4,063	0,118	-13,10	92,5	0,61	0,449	11,05
F	82	4,073	0,141	-10,00	88	0,63	0,447	11,68
G	83	4,081	0,153	-8,90	86,2	0,64	0,445	11,91

соответственно наименьшая ширина проводящей зоны W наблюдается для образца 4 (оптимальный уровень легирования).

Замещение Cu на Zn в $\text{HgBa}_2\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_{4+\delta}$ при фиксированных значениях δ приводит к увеличению структурной дефектности и, согласно модели Андерсона, к расширению зоны, росту доли локализованных состояний на ее краях, падению $D(E_F)$, чему соответствует полученный в результате расчета характер трансформации зонного спектра и температуры сверхпроводящего перехода. Расширение зоны происходит также вследствие эффекта ее разрушения при замещении цинком позиций меди в слое CuO_2 , ответственном за сверхпроводимость. При этом степень заполнения зоны электронами F при одинаковых значениях δ в чистых и легированных образцах остается приблизительно такой же, а характер ее изменения при росте δ соответствует изменению концентрации дырок p на каждый атом Cu (табл. 1), определенной из эмпирического соотношения в [4].

Результаты расчета с использованием описанного выше подхода для $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ в области оптимального кислородного легирования представлены на рис. 3. При росте кислородного индекса δ степень заполнения зоны электронами почти не изменяется. При увеличении ширины зоны в окрестности области оптимального легирования (кривые 2, 4 на рис. 3) плотность состояний на уровне Ферми $D(E_F)$ падает, что коррелирует с уменьшением T_c [8]. Это может быть связано с разупорядочением решетки (увеличение дефектности структуры) при отклонении содержания кислорода от оптимального (кривая 3) как в сторону уменьшения (кривая 2), так и в сторону увеличения (кривая 4). Подтверждением этого служит рост асимметрии зоны

для составов 2, 4 по сравнению с составом 3. Как следствие, образцу 3 соответствует наибольшая T_c (максимальная степень упорядочения). Полученные соотношения также согласуются с моделью Андерсона.

Аналогичный характер трансформации зонного спектра был получен при анализе температурных зависимостей термоэдс системы $\text{Hg}_{0,88}\text{Re}_{0,12}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ при изменении кислородного индекса δ (рис. 4). Здесь также наблюдается корреляция между шириной проводящей зоны (соответственно плотностью состояний на E_F) и температурой перехода в сверхпроводящее состояние: большее значение T_c для состава 2 по сравнению с составами 1 и 3.

При сравнении зависимости $S(T)$ для чистого оптимально легированного кислородом Hg-1223 (рис. 3) и полученных нами экспериментальных данных для $\text{Hg}_{0,8}\text{Pb}_{0,2}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ (вставка на рис. 3) установлено, что для одного уровня $\alpha_{\text{max}} \cong 3$ мкВ/К в окрестности $T = 150$ К при повышении температуры наблюдается инверсия только для (Hg, Pb)-1223 образцов, что свидетельствует о дополнительном введении дырок вследствие катионного замещения. Это подтверждается результатами расчета: при таком замещении ртути свинцом уменьшается заполнение зоны электронами, растет ее асимметрия и ширина и уменьшается $D(E_F)$, что соответствует изменению T_c (рис. 3).

Анализ полученных результатов позволил оценить степень влияния различных катионных и анионных замещений в Hg-ВТСП не только на параметры зонного спектра, но и на критическую температуру, и проследить взаимосвязь между ними. На рис. 6 графически изображена обнаруженная корреляция между T_c и шириной проводящей зоны W . Причиной падения T_c

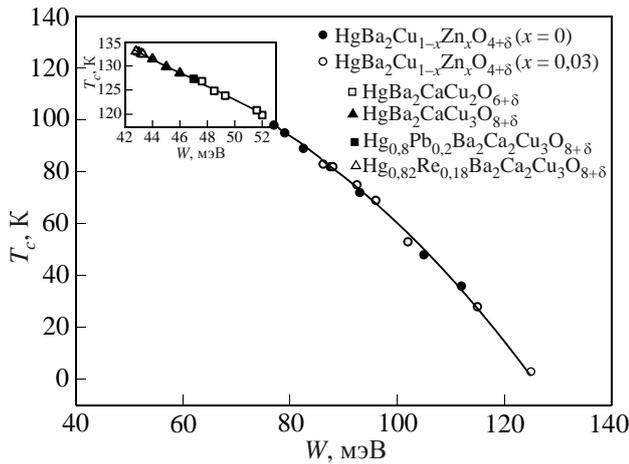


Рис. 6. Корреляционная зависимость значения критической температуры T_c от эффективной ширины проводящей зоны для $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2+\delta}$ ($n = 1, 2, 3$) при проведении катионных замещений и анионного легирования.

может быть уменьшение значения плотности состояний на уровне Ферми вследствие расширения зоны.

5. Заключение

Используя представление пика плотности состояний в области уровня Ферми в виде асимметричного лоренциана, получено хорошее согласование расчетных температурных зависимостей коэффициента термоэдс с экспериментальными данными при $T > T_c$. Характер поведения коэффициента термоэдс исследуемых ртутных высокотемпературных сверхпроводников при проведении катионных замещений и анионного легирования определяется такими параметрами узкой проводящей зоны в области уровня Ферми, как ее ширина W , степень заполнения электронами F и значение плотности состояний $D(E_F)$. Полученная из расчета трансформация зонного спектра соответствует модели Андерсона. При установлении взаимосвязи между свойствами нормального состояния и сверхпроводящими характеристиками показано существование корреляции между эффективной шириной проводящей зоны и температурой сверхпроводящего перехода.

1. A. Schilling, M. Cantoni, J.D.H.R. Guo, and H.R. Ott, *Nature* **363**, 56 (1993).
2. C.W. Chu, L. Gao, F. Chen, Z.J. Huang, R.L. Meng, and Y.Y. Xue, *Nature* **365**, 323 (1993).
3. L. Gao, Y.Y. Xue, F. Chen, and Q. Xiong, *Phys. Rev. B* **50**, 4260 (1994).

4. A. Yamamoto, K. Minami, W.-Z. Hu, A. Miyakita, M. Izumi, and S. Tajima, *Phys. Rev. B* **65**, 104505 (2002).
5. Y.T. Ren, J. Clayhold, and Z.J. Chen, *Physica C* **217**, 6 (1993).
6. F. Chen, Q. Xiong and Y.Y. Xue, *Phys. Rev. B* **53**, 1 (1996).
7. C.K. Subramaniam, M. Paranthaman, and A.B. Kaiser, *Phys. Rev. B* **51**, 1330 (1995).
8. F. Chen, Q. Xiong, Y.Y. Xue, Z.J. Huang, Z.H. He, Q.M. Lin, J.A. Clauhold, and C.W. Chu, *Preprint TCSUN 96:006* (1996).
9. C.A.C. Passos, M.T.D. Orlando, J.L. Passamai, and E.V. de Mello, *Preprint arXiv:cond-mat/0506387*, **15**, 1 (2005).
10. N.F. Mott and E.A. Davis, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, Oxford Univ. Press., Oxford (1979).
11. M.D. Koterlyn, O.I. Babych, and G.M. Koterlyn, *J. Alloys Compounds* **325** 6 (2001).
12. M.D. Koterlin, O.I. Babich, and R.I. Yasnitskii, *Phys. Solid State* **44**, 823 (2002).
13. J.T. Chen, C.J. McEwan, L.E. Wenger, and E.M. Logothetis, *Phys. Rev. B* **35**, 7124 (1987).

Transformation of band spectrum of Hg-based HTSC and features of temperature dependences of thermoelectric power coefficient

O.Y. Babych and Ya.V. Boyko

Based on the model of a narrow conductive band, the temperature dependence of thermoelectric power of high-temperature $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2+\delta}$ ($n = 1, 2, 3$) superconductors under oxygen doping and cationic substitutions was analyzed. The values of the parameters of the band spectrum in the vicinity of the Fermi level were determined and the nature of their transformation was considered. The correlation between the effective width of the band and the superconducting transition temperature T_c was established.

PACS: 74.25.Fy Transport properties (electric and thermal conductivity, thermoelectric effects, etc.);

74.62.Dh Effects of crystal defects, doping and substitution.

74.20.-z Theories and models of superconducting state

74.25.-q Properties of superconductors

Keywords: high-temperature superconductivity, superconductive transition temperature, thermoelectric power, narrow conduction band, peak density of states, Fermi level.