Физика низких температур, 1995, т. 21, № 2, с. 208–218 УДК 538.945

Двухмасштабная электронная структура медно-оксидных сверхпроводников и механизм притяжения дырок

А. М. Ратнер

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины, Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47

Статья поступила в редакцию 29 июля 1994 г., после переработки 20 сентября 1994 г.

Акцепторная примесь, распределяющаяся в кристаллографической плоскости, параллельной проводящей плоскости CuO_2, создает в ней кулоновский потенциал с большим характерным расстоянием. Дно дырочной зоны, искривленное этим потенциалом, играет роль вторичного потенциального рельефа, проявляющегося в анизотропии проводимости и аномалиях комбинационного рассеяния. Между дырками, локализованными в минимумах вторичного рельефа, действует ван-дер-ваальсовское притяжение, достаточное для образования сверхпроводящей щели шириной в десятки миллиэлектронвольт. Перечисленные явления рассмотрены на примере сверхпроводника $YBa_2Cu_3O_{6+x}$. Приведены экспериментальные данные, подтверждающие связь между механизмом сверхпроводимости и вторичным потенциальным рельефом.

Акцепторна домішка, що розміщується у кристалографічній площині, паралельній провідній площині CuO_2, створює в ній кулонівський потенціал з великою характерною відстанню. Дно дірочної зони, скривлене цим потенціалом, грає роль вторинного потенціального рельєфу, що виявляється в анізотропії електропровідності та в аномаліях комбінаційного розсіювання. Між дірками, локалізованими в мінімумах вторинного рельєфу, діють ван-дер-ваальсові сили, достатні для створення надпровідної щілини шириною в десятки міліелектронвольт. Перелічені явища розглянуто на прикладі надпровідника $YBa_2Cu_3O_{6+x}$. Наведено експериментальні дані, що підтверджують зв'язок між механізмом надпровідності та вторинним потенціальним рельєфом.

В последние годы интенсивно развиваются исследования резистивных и оптических свойств высокотемпературных сверхпроводников в зависимости от химического состава, температуры, приложенных полей, дозы фотооблучения и т.п. Изучаемые электронные свойства сверхпроводников с проводящей плоскостью CuO_2 в большой степени связаны со структурой дырочной зоны, принадлежащей этой плоскости. Однако в опубликованных исследованиях эта связь не была в полной мере раскрыта, поскольку зонные расчеты медно-оксидных сверхпроводников проводились лишь для кристаллов со строго периодической структурой. В частности, зоны сверхпроводника $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ были рассчитаны лишь в крайних точках интервала значений x, т.е. при $x = 0$ и 1 (стехиометрические диэлектрик и металл) [1,2]. Вне рамок такой теории остался ряд эффектов, связанных с рассматриваемым ниже апериодическим потенциальным рельефом, создаваемым кислородной примесью промежуточной концентрации ($0 < x < 1$).

В настоящей работе исследована кислородная дырочная зона, искривленная апериодическим потенциалом, и ряд физических проявлений такой электронной структуры. Эти явления рассмотрены на примере сверхпроводника $YBa_2Cu_3O_{6+x}$.

При допировании кристалла $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ избыточный кислород (x атомов на ячейку) апериодически распределяется в плоскости CuO_x, образуя фрагменты медно-кислородной цепочки. Они создают в плоскости CuO_2 апериодический кулоновский потенциал с характерным расстоянием, значительно превышающим межатомное расстояние. Если учесть периодический потенциал в плоскости CuO_2 в терминах эффективной массы дырки, то дно дырочной зоны, искривленное апериодическим потенциалом, играет роль вторичного потенциального рельефа для дырок, движущихся вблизи дна зоны. Характерная глубина вторичного рельефа (около 1 эВ) мала по сравнению с полной шириной дырочной зоны (6–7 эВ), но превышает фермиевскую энергию дырочных квазичастиц, слабо заполняющих зону ($\varepsilon_F \approx 0{,}2$ эВ [3]). При таком соотношении характерных энергий искривление зоны существенно сказывается на свойствах дырочных состояний (рассматриваемых в разд. 1, 2), а следовательно, и на оптических и резистивных характеристиках (разд. 3).

© А. М. Ратнер, 1995

В разд. 4 рассматривается ван-дер-ваальсовское притяжение дырок, локализованных в минимумах вторичного потенциального рельефа. Мы покажем, что притяжение двух дырок (в отличие от кулоновского отталкивания) не ослабляется экранирующим действием остальных дырок. Это справедливо не только для диэлектрической фазы, но и для металлической в окрестности перехода диэлектрик—металл. По крайней мере в этой окрестности ван-дер-ваальсовское притяжение преобладает над экранированным кулоновским отталкиванием, что должно приводить к сверхпроводящему спариванию дырок. Такой механизм спаривания косвенно подтверждается экспериментальными данными.

Ниже во всех случаях, кроме специально оговоренных, соотношения и формулы записаны в атомных единицах.

1. Кислородная дырочная зона в периодическом потенциале (первичная электронная структура)

Рассмотрим сначала дырочную зону, принадлежащую плоскости CuO_2, в строго периодическом диэлектрическом кристалле $YBa_2Cu_3O_6$. В следующем разделе покажем, что и в примесной металлической фазе такая зона составляет основу электронной структуры (первичную структуру), модулируемую примесной апериодической добавкой к потенциалу дырки. Искривляя дно первичной зоны, она создает для дырок вторичный потенциальный рельеф.

Плоскость CuO_2 содержит ионы O^{2-} с неоноподобной конфигурацией $2s^22p^6$ и ионы Cu^{2+} с конфигурацией $3s^23p^63d^9$ (рис. 1,*а*). В диэлектрике с полностью заполненной валентной зоной и пустой зоной проводимости электронными возбуждениями являются электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне. Нас интересует дырочная ветвь энергетического спектра, заполняемая дырочными квазичастицами в процессе допирования.

Обычно электронные свойства кристалла в основном связывают с кислородной дырочной зоной плоскости CuO_2. Большая ширина* этой зоны и соответственно малая эффективная масса обусловлены значительным перекрытием кислородных $2p$-состояний, центрированных на соседних узлах A и B (рис. 1,*а*) (интеграл перекрытия составляет около 0,1). Оценки показывают, что $2p$-состояние кислорода столь же сильно перекрывается с $3d$-

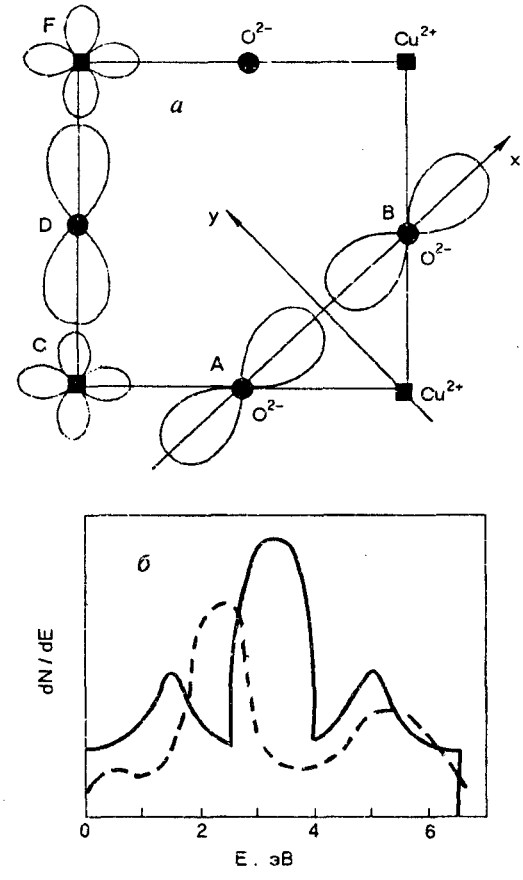

Рис. 1. Формирование первичной электронной структуры плоскости CuO_2. Валентные $2p$-состояния кислорода и $3d$-состояния меди в плоской ячейке. Кислородная дырочная зона сформирована перекрытием $2p$-состояний, центрированных на узлах A, B, ..., а медно-кислородная — перекрытием $3d$- и $2p$-состояний между узлами C, D, F, ... (*а*). Энергетическая плотность дырочных состояний, соответствующая закону дисперсии (1) (сплошная линия) и сглаженная плотность состояний кислородной зоны, рассчитанная в рамках схемы самосогласованного потенциала [1] (штрихи) (*б*).

состоянием соседнего атома меди (рис.1,*а*), что приводит к существованию широкой медно–кислородной зоны. По расчетным данным [1] кислородная и медно–кислородная зоны близки по энергетическому положению и ширине. Однако погрешность таких расчетов, превышающая величину дырочной энергии Ферми $\varepsilon_F \lesssim 0{,}2$ эВ, не позволяет судить о том, которая из этих двух зон (а возможно, и обе одновременно) заполняется при допировании дырочными квазичастицами и участвует в формировании металлических свойств. Впрочем, для проводимого ниже рассмотрения выбор между двумя указанными зонами с близкими эффективными массами не имеет существенного значения.

* По мере допирования эта зона слабо заселяется дырочными квазичастицами. Они заполняют узкую энергетическую область шириной $\varepsilon_F \lesssim 0{,}2$ эВ (иногда называемую дырочной зоной), которую не следует смешивать с энергетической протяженностью дисперсионной ветви, составляющей 6–7 эВ.

Для определенности и краткости будем связывать металлические свойства с кислородной дырочной зоной.

Чтобы дать представление об основной (первичной) электронной структуре диэлектрика $YBa_2Cu_3O_6$, построим кислородную дырочную зону в простейшем приближении сильной связи, линейном по межузельным интегралам перекрытия. Такая процедура может быть осуществлена по аналогии с дырочной зоной неона [4] с тем лишь отличием, что неоноподобные ионы кислорода образуют в плоскости CuO_2 квадратную решетку.

Выберем декартовы оси x, y в плоскости CuO_2, а ось x проведем через центры соседних ионов кислорода (рис. 1,*а*). Дырочный закон дисперсии содержит три ветви, соответствующие x-, y- и z-поляризациям $2p$-состояния. Последняя ветвь узка и расположена посередине кислородной зоны. Ветви с x- и y-поляризациями физически эквивалентны. Для x-поляризации закон дисперсии дырок имеет вид

$$\varepsilon_x(\mathbf{k}) = -E_1 \cos\left(k_x l\right) + E_2 \cos\left(k_y l\right) + E_1 + E_2 , \tag{1}$$

$$E_1 = 2{,}5 \text{ эВ}, \quad E_2 = 0{,}75 \text{ эВ}, \quad \mathbf{k} = \left(k_x , k_y\right)$$

(l = 2,8 Å — расстояние между соседними кислородными узлами в плоскости CuO_2). Энергия дырки (1) отсчитывается от вершины валентной зоны. Постоянные E_1, E_2, связанные с межузельным взаимодействием электронов, в основном пропорциональны интегралам перекрытия кислородных $2p$-состояний [4]. Приведенные значения E_1, E_2 получены пересчетом соответствующих данных для кристаллического неона [4] с учетом различия между межатомными расстояниями двух решеток и между радиусами $2p$-состояний атомов Ne и O^{2-}.

Для x-поляризации минимум энергии достигается, согласно (1), в точке

$$\mathbf{k}_1 = \left(0, \pm \pi/l\right) , \tag{2}$$

а максимум — в точке $\mathbf{k}_2(\pm\pi/l, 0)$. Для y-поляризации точки $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ меняются местами. Анизотропия закона дисперсии (1) влечет за собой анизотропию эффективной массы m:

$$m_{xx} = \frac{1}{E_1 l^2} = 0{,}4 ; \quad m_{yy} = \frac{1}{E_2 l^2} = 1{,}3 . \tag{3}$$

На рис. 1,*б* представлена плотность состояний, соответствующая закону дисперсии (1). Для сопоставления штрихами показана плотность состояний, полученная в работе [1] совершенно другим способом (вместо дырок рассматривались электроны в самосогласованном потенциале). Несмотря на существенное различие подходов, результаты оказались достаточно близкими: в обоих случаях кислородные дырочные ветви заполняют энергетический интервал шириной около 7 эВ. В этот интервал попадают и остальные дырочные ветви, так что в нем сосредоточена суммарная плотность состояний в рассматриваемом диапазоне энергий. Ширина этого интервала подтверждена данными по электронной фотоэмиссии [1].

2. Искривление дырочной зоны примесным потенциалом (вторичный потенциальный рельеф)

Чтобы превратить диэлектрик $YBa_2Cu_3O_6$ в металл, в него вводят добавочный кислород (x атомов на ячейку), играющий роль акцепторной примеси. Но примесные ионы кислорода располагаются не в самой проводящей плоскости CuO_2, а в плоскости CuO_x, на расстоянии h = 4,15 Å от проводящей плоскости. Поэтому точечный примесный заряд ζ создает в проводящей плоскости широкую потенциальную яму

$$U(r) = -\frac{\zeta}{\varepsilon(h^2 + r^2)^{1/2}} , \tag{4}$$

показанную на рис. 2 (ε — диэлектрическая проницаемость вещества). Как видно из рисунка, в пределах такой аксиально-симметричной потенциальной ямы умещается около сотни атомов кислорода. Это позволяет говорить (в рамках приближения эффективной массы) об искривлении дырочной зоны примесным потенциалом. Если учесть первичный периодический потенциал в терминах эффективной массы, то дырки вблизи дна зоны движутся во вторичном потенциальном рельефе, образованном искривленным дном.

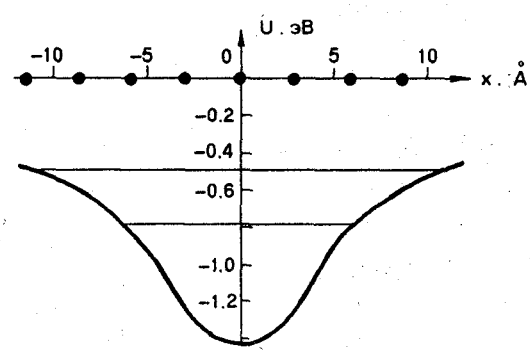

Рис. 2. Форма потенциальной ямы (4), создаваемой в плоскости CuO_2 единичным отрицательным зарядом плоскости CuO_x при ε = 5, ζ = 1 (ν = 2). Точками показано расположение ионов кислорода в плоскости CuO_2 вдоль оси x, проведенной на рис. 1,*а*. Горизонтальные линии дают положения двух наинизших уровней дырки с единичной эффективной массой.

$\nu = 0$	Cu^+		Cu^+		Cu^+		Cu^+		Cu^+
	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\nu = 1$	Cu^+		Cu^{2+}	O^{2-}	Cu^{2+}		Cu^+		Cu^+
	0	0	1	−2	1	0	0	0	0
$\nu = 3$	Cu^+		Cu^{2+}	O^{2-}	Cu^{2+}	O^{2-}	Cu^{2+}	O^{2-}	Cu^{2+}
	0	0	1	−2	1	−2	1	−2	1
$\nu = 4$	Cu^{2+}	O^{2-}	Cu^{2+}	O^{2-}	Cu^{2+}	O^{2-}	Cu^{2+}	O^{2-}	Cu^{2+}
	1	−2	1	−2	1	−2	1	−2	1

Рис. 3. Структура медно-кислородных цепочек в зависимости от числа содержащихся в цепочке кислородных ионов ν. Для каждого ν верхняя строка схемы дает расположение ионов (пустыми клеточками обозначены кислородные вакансии), а нижняя строка — распределение примесных зарядов. Рамками выделены скомпенсированные группы зарядов.

По мере допирования потенциальные ямы вторичного рельефа становятся шире показанной на рис. 2, поскольку примесные ионы кислорода объединяются в медно-кислородные цепочки, длина которых возрастает с концентрацией кислорода. Используя литературные данные [5–7], проследим за распределением примесных зарядов в цепочке в зависимости от ее длины.

В отсутствие примесного кислорода ($x = 0$) ионы Cu^+ чередуются с вакансиями, как показано в верхней строке схемы на рис. 3 (ν обозначает число ионов кислорода в цепочке). Когда в плоскость CuO_x вводится кислород и образуется медно-кислородная цепочка, принадлежащие ей ионы меди получают дополнительный положительный заряд, т.е. Cu^+ превращается в Cu^{2+}. С учетом этого образованию цепочки сопутствует появление в ее пределах примесных зарядов: в медных узлах появляются заряды (+1), а в кислородных — (−2). На схеме рис. 3 при каждом значении ν показана структура цепочки (верхняя строка) и распределение в ней примесных зарядов (нижняя строка). Рамкой обведены скомпенсированные группы зарядов, квадрупольный момент которых создает в плоскости CuO_2 пренебрежимо слабый потенциал. Остальные (нескомпенсированные) примесные заряды при $\nu \le 3$ сконцентрированы на одном узле, а при $\nu \ge 4$ образуют цепочку длиной λ. Как видно из схемы, длина цепочки нескомпенсированных зарядов и ее суммарный заряд ζ зависят от числа кислородных ионов ν следующим образом:

$$\lambda(\nu) = \begin{cases} 0, & \nu \le 3, \\ (2\nu - 5)a, & \nu \ge 4; \end{cases} \qquad (5)$$

$$\zeta(\nu) = \nu - 1 \qquad (6)$$

(a — межатомное расстояние).

При $\nu = 2, \zeta = 1$ (рис. 2) и $\nu = 3, \zeta = 2$ точечный заряд цепочки создает в плоскости CuO_2 аксиально-симметричные потенциальные ямы. Такой вторичный потенциальный рельеф характерен для случая слабого допирования, когда преобладают короткие цепочки. По мере возрастания кислородного индекса цепочки удлиняются, и при $\nu \ge 4$ ($\lambda \ge 3$) потенциальные ямы теряют осевую симметрию. Глубина их возрастает вместе с суммарным зарядом цепочки $\zeta = \nu - 1$, а ширина — с увеличением $\lambda = (2\nu - 5)a$. Однако глубина перестает возрастать с допированием вследствие перекрытия соседних ям, которое приводит к размытию вторичного потенциального рельефа, перекрытию локализованных дырочных состояний и переходу диэлектрик—металл.

При приближении кислородного индекса $6 + x$ к максимальному значению 7 плоскость CuO_x заполняется сплошными медно-кислородными цепочками. Казалось бы, при $x = 1$, как и в противоположном предельном случае $x = 0$, потенциальный рельеф плоскости CuO_2 обладает периодичностью первичной структуры (периодом $2a$). В действительности, однако, даже в бесконечных медно-кислородных цепочках заряд распределен апериодически. Заметная доля принадлежащих цепочке ионов кислорода (около 30% по данным работы [8]) имеет заряд (−1), а при приближении x к единице в цепочках появляются также и нейтральные атомы кислорода. Неоднородно распределенный заряд цепочек искривляет дырочную зону плоскости CuO_2 при любом значении $x > 0$, включая точку $x = 1$. Существование хорошо выраженного вторичного потенциального рельефа при $x = 1$ подтверждается данными комбинационного рассеяния (разд. 3.2).

3. Физические следствия искривления дырочной зоны

3.1. Анизотропия проводимости в плоскости ab

Как уже говорилось, при возрастании кислородного индекса медно-кислородные цепочки удлиняются, а при $\nu \ge 4$, когда нескомпенсированные заряды цепочки имеют конечную линейную протяженность (5), потенциальные ямы вторичного рельефа теряют осевую симметрию, вытягиваясь вдоль оси b (оси a, b параллельны плоскостям CuO_2 и CuO_x, а ось b параллельна цепочкам). Дырочные состояния, локализованные в таких потенциальных ямах, сильнее перекрываются в направлении b, чем вдоль оси a. Это должно привести к анизотропии электропроводности σ в плоскости ab ($\sigma_{bb} > \sigma_{aa}$), причем отношение σ_{bb}/σ_{aa} должно

возрастать с кислородным индексом вследствие увеличения длины цепочек.

По экспериментальным данным работы [9] для металлической фазы кристалла $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ в нормальном состоянии отношение σ_{bb}/σ_{aa} заметно превышает единицу и возрастает с кислородным индексом. Так, при $x = 0{,}68$ отношение $\sigma_{bb}/\sigma_{aa} \approx \approx 1{,}15$, а при $x = 0{,}9$ оно достигает 1,8.

Анизотропию проводимости в плоскости *ab* справедливо связывают с цепочками, однако вряд ли ее можно приписать прямому вкладу проводимости цепочек в проводимость образца. Поскольку и кислородные, и медные дырки локализованы в цепочках (см. рис. 3), проводимость плоскости CuO_x должна иметь прыжковый характер, проявляющийся в отклонении температурного хода σ_{bb} от температурной зависимости чисто металлической проводимости σ_{aa}. Но эксперимент [9] устанавливает одинаковый температурный ход σ_{bb} и σ_{aa} при обоих значениях x (0,68 и 0,9) в интервале от точки сверхпроводящего перехода T_c до комнатной температуры.

Таким образом, наблюдаемая анизотропия проводимости в плоскости *ab* объясняется, по-видимому, не прямым вкладом цепочек в проводимость, а анизотропией потенциального рельефа, создаваемого ими в проводящей плоскости CuO_2.

3.2. Аномалии в комбинационном рассеянии

Вторичный потенциальный рельеф выразительно проявляется в спектрах комбинационного рассеяния, изученных в [10] для кристалла $YBa_2Cu_3O_7$. На рис. 4, взятом из работы [10], показан спектр комбинационного рассеяния света на колебаниях иона меди (Cu2), принадлежащего плоскости CuO_2, и иона бария, лежащего вне ее на расстоянии 2,3 Å; векторы смещений того и другого иона перпендикулярны плоскости CuO_2. Во всех трех случаях, представленных на рис. 4, падающий и рассеянный (наблюдаемый) свет имеет одну и ту же поляризацию. Две верхние кривые относятся к случаю, когда свет поляризован в плоскости *xy* (в направлении *x*, перпендикулярном цепочкам, либо в направлении *y* вдоль цепочек), а следовательно, перпендикулярно вектору смещения ионов. Нижняя кривая относится к случаю *z*-поляризации света (вектор электрического поля параллелен вектору смещения ионов).

Обычно колебания решетки намного слабее взаимодействуют со светом перпендикулярной им поляризации, чем с параллельно поляризованным светом. Как видно из рисунка, это правило прекрасно соблюдается для колебаний иона меди, принадлежащего плоскости CuO_2. Но для колебаний лежащего вне ее бария эта закономерность резко нарушается: колебания иона Ba^{2+} взаимодействуют со светом перпендикулярной (*x*- или *y*-) поляризации сильнее, чем со светом *z*-поляризации. (Это видно из сопоставления площадей под соответствующими максимумами рамановского спектра.) Полосы рамановского спектра, соответствующие взаимодействию колебаний бария со светом перпендикулярной поляризации, обнаруживают и другую аномалию — сильное асимметричное уширение в сторону низких частот.

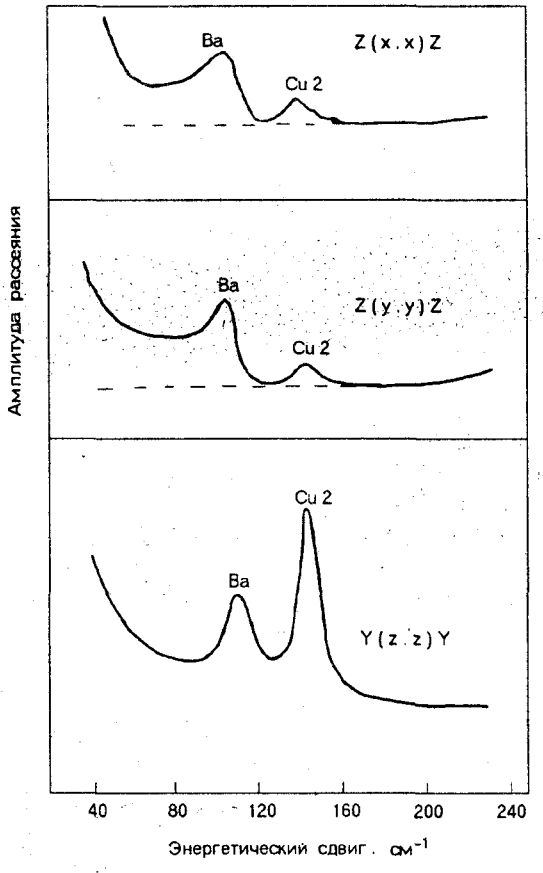

Рис. 4. Спектры комбинационного рассеяния света на монокристалле $YBa_2Cu_3O_7$ по данным работы [10]. Максимумы рассеяния соответствуют взаимодействию света, поляризованного по оси *x*, *y* или *z*, с колебаниями ионов Ba^{2+} и $Cu2^{2+}$, поляризованными по оси *z* (оси *x*, *y* параллельны плоскости CuO_2, причем ось *y* параллельна медно-кислородным цепочкам). Приведены сглаженные спектры, экстраполированный уровень фона указан штриховыми линиями.

Обе аномалии естественно объясняются вторичным потенциальным рельефом. Для света *x*- или *y*-поляризации амплитуда комбинационного рассеяния пропорциональна производной поляризуемости α_{xx} или α_{yy} по расстоянию иона бария от плоскости CuO_2. Дырки, локализованные в широких минимумах искривленного дна зоны, облада-

ют большой поляризуемостью α_{xx}, α_{yy}, пропорциональной четвертой степени радиуса локализации. Колебания иона Ba^{2+} относительно плоскости CuO_2 изменяют форму потенциальной ямы, в которой локализована дырка, а вместе с нею радиус локализации и поляризуемость. Даже при малых относительных изменениях поляризуемости α_{xx}, α_{yy} ее абсолютные изменения из-за колебаний иона достаточно велики для сильного проявления в комбинационном рассеянии.

Судя по асимметричной форме соответствующей полосы в рамановском спектре, ее уширение имеет неоднородный характер. Неоднородность связана с разными положениями ионов бария относительно минимумов вторичного потенциального рельефа. От положения иона Ba^{2+} зависит взаимодействие его колебания с локализованной дыркой, а через ее пространственную плотность и с соседними ионами плоскости CuO_2. Дополнительные ионы, вовлеченные в колебание, увеличивают суммарную массу и уменьшают частоту колебания в достаточно широком (как видно из рис. 4) диапазоне.

3.3. Малый масштаб поляронных явлений, обусловленный первичной зонной структурой

Покажем, что наряду с вторичным потенциальным рельефом в некоторых случаях может своеобразно проявляться и первичная электронная структура.

Если забыть об основной (первичной) структуре дырочной зоны, то вторичная структура (движение дырки вблизи дна зоны, искривленного потенциальными ямами) весьма напоминает примесную зону обычных полупроводников. В обоих случаях повышение концентрации примеси приводит к перекрытию локализованных дырочных состояний и к возникновению металлической проводимости.

В действительности, между дырочной зоной плоскости CuO_2 и примесной зоной полупроводника существует принципиальное различие, обусловленное существованием первичной зонной структуры в первом случае и отсутствием таковой во втором. Ширина обычной примесной зоны определяется перекрытием примесных состояний, т.е. концентрацией примеси. Она же задает и число квазичастиц в зоне, так что зона всегда заполнена примерно наполовину. Ввиду слабого перекрытия зона обычно узка, и поэтому в ней возможны хорошо выраженные поляронные явления.

Дырочная дисперсионная ветвь плоскости CuO_2 обладает значительной шириной (около 7 эВ) независимо от концентрации примеси и степени перекрытия состояний, локализованных в минимумах вторичного рельефа. Малым энергетическим параметром является лишь энергия Ферми ($\varepsilon_F \lesssim$ $\lesssim 0{,}2$ эВ), характеризующая слабое (на 2–3 %) заполнение дырочной зоны квазичастицами. В столь широкой зоне практически исключены поляронные явления. Действительно, образование дырочного полярона, т.е. автолокализация дырки на одном кислородном узле, энергетически выгодно, если оно сопровождается достаточно сильным понижением узельного уровня δ, компенсирующим потерю отрицательного резонансного вклада в энергию дырки. Для состояний вблизи дна зоны этот резонансный вклад, в соответствии с (1), близок к $-(E_1 + E_2) = -3{,}3$ эВ. Для реальных кристаллов отрицательная величина δ (включающая в себя положительную энергию деформации решетки поляроном) заведомо не может быть столь значительна. Это исключает автолокализацию дырки на одном узле. (Сказанное можно перефразировать в терминах первичной эффективной массы: легкая дырка не может быть локализована, поскольку сопутствующее возрастание кинетической энергии не компенсируется понижением потенциальной.)

Этот вывод в основном сохраняет силу и при учете искривления зоны вторичным потенциальным рельефом. Даже в том случае, когда дырка локализована в одном из его минимумов, она распределена между большим числом ($N_L \sim 100$) кислородных узлов и сохраняет отрицательный резонансный вклад в энергию, препятствующий локализации на одном узле. Заряд дырки, распределенный между N_L кислородными узлами, может вызвать лишь слабую деформацию решетки, в процессе которой отрицательные ионы будут смещаться в сторону дырки на малую величину d, а положительные — в противоположную сторону. При этом энергия деформации, пропорциональная $N_L d^2$, должна компенсироваться поляризационной энергией дырки, пропорциональной d. Отсюда следует, что $d \propto 1/N_L$, а энергетический эффект образования полярона пропорционален $d \propto 1/N_L$ или, что то же, величине $N_L d^2 \propto 1/N_L$.

4. Вторичный потенциальный рельеф и ван-дер-ваальсовское притяжение дырок как причина сверхпроводящего спаривания

4.1. Физическая причина взаимного притяжения дырок

В диэлектрическом кристалле $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ ($0 < x < 0{,}4$) дырки локализованы в минимумах вторичного потенциального рельефа. Большому радиусу локализованных состояний соответствует высокая поляризуемость и значительное ван-дер-ваальсовское (ВВ) притяжение дырок, локализо-

ванных в соседних потенциальных ямах. В разд. 4.2 покажем, что ВВ притяжение двух соседних дырок не только не ослабляется экранирующим действием остальных, но даже усиливается примерно в полтора раза. Кулоновское же отталкивание двух дырок экранируется средой, в первую очередь остальными локализованными дырками, обладающими высокой поляризуемостью. Такое преимущество ВВ притяжения, еще недостаточное для компенсации кулоновского отталкивания в диэлектрической фазе, приобретает решающую роль при переходе диэлектрик—металл (разд. 4.3).

Чтобы показать это с наибольшей ясностью, рассмотрим металлическую фазу вблизи границы подвижности, где выполняется неравенство

$$\Omega\tau >> \pi \ . \qquad (7)$$

Здесь τ — время пребывания дырки в одной потенциальной яме вторичного рельефа (т.е. промежуток между последовательными прыжками дырки), а Ω — частота движения дырки по орбите внутри ямы (π/Ω — полупериод колебаний).

При выполнении условия (7) металлическое экранирование не затрагивает ВВ притяжения дырок. Действительно, корреляция между орбитальным движением двух дырок, приводящая к их притяжению, устанавливается за время Ω^{-1}, малое по сравнению со временем τ перераспределения зарядов между потенциальными ямами. Кулоновское же отталкивание между дырочными носителями экранируется практически полностью, поскольку при малой их концентрации расстояние между ними превышает радиус металлического экранирования.

Таким образом, по крайней мере вблизи перехода диэлектрик—металл, где для металлической фазы выполняется условие (7), ВВ притяжение дырочных носителей преобладает над кулоновским отталкиванием и возникают условия для их сверхпроводящего спаривания.

Итак, главная физическая предпосылка рассматриваемого механизма спаривания состоит в том, что ВВ притяжение двух дырок не экранируется остальными ни в диэлектрической фазе, где дырки локализованы, ни в металлической (при условии (7)), где они приобретают подвижность. Далее дается математическая реализация этой физической картины.

4.2. Ван-дер-ваальсовское притяжение локализованных дырок (диэлектрическая фаза)

Рассмотрим ван-дер-ваальсовское взаимодействие дырок, локализованных в минимумах вторичного потенциального рельефа. Пренебрежем его анизотропией, не играющей здесь принципиальной роли, и будем считать потенциальные ямы аксиально-симметричными. Расположим центры ям в узлах квадратной решетки и обозначим через R расстояние между соседними узлами. Каждая яма заселена одной дыркой.

Для удобства рассуждений поместим в центр каждой ямы два точечных единичных заряда противоположных знаков. Положительные заряды играют роль точечных дырок, между которыми действуют силы кулоновского отталкивания. Точечный отрицательный заряд образует с локализованной дыркой нейтральный псевдоатом. Между нейтральными псевдоатомами действуют силы ВВ притяжения (существенную роль играет лишь притяжение соседних псевдоатомов). Незначительное перекрытие соседних псевдоатомов приводит к слабой ковалентной связи, энергия которой минимальна при противоположной ориентации спинов. Пренебрегая энергетическим вкладом ковалентной связи, мы примем во внимание обусловленную ею ориентацию спинов и учтем для дальнейшего, что при не слишком высоких температурах парное ВВ взаимодействие в основном осуществляется между локализованными дырками с противоположно направленными спинами*.

Рассмотрим ВВ взаимодействие псевдоатомов. Наряду с взаимодействием двух дырок (псевдоатомов) учтем многочастичный вклад, который описывает экранирующее влияние остальных дырок на взаимодействие каждой пары. С этой целью воспользуемся моделью, в рамках которой электрон изолированного атома движется в параболическом потенциале [11,12]. Несмотря на предельную простоту, модель описывает с хорошей точностью как парное, так и многочастичное взаимодействие атомов [12].

Применительно к системе двумерных одноэлектронных псевдоатомов параболическая модель реализуется следующим образом. Пронумеруем одинаковые аксиально-симметричные псевдоатомы индексом n, а их центры поместим в точки $\mathbf{R}_n$, на расположение которых пока не налагается никаких ограничений. Запишем потенциал диполь-дипольного взаимодействия двумерной системы N псевдоатомов:

* Возможно, спиновое упорядочение в решетке псевдоатомов (узлы которой в действительности расположены случайным образом) способствует разрушению антиферромагнитного порядка в медной подрешетке кристалла с возрастанием кислородного индекса.

$$u = \frac{\omega_0^2}{2}\sum_{n=1}^{N} \mathbf{r}_n^2 + \frac{1}{2}\sum_{n\neq m=1}^{N}\left[R_{nm}^{-3}\,\mathbf{r}_n\mathbf{r}_m - 3R_{nm}^{-5}\left(\mathbf{r}_n\mathbf{R}_{nm}\right)\left(\mathbf{r}_m\mathbf{R}_{nm}\right)\right], \qquad \left(\mathbf{R}_{nm} = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m\right). \quad (8)$$

Здесь ω_0 — частота колебаний дырки в отдельном псевдоатоме; двумерная координата дырки $\mathbf{r}_n$ отсчитывается от центра n-го псевдоатома. Волновая функция системы с квадратичным потенциалом (8) сводится к произведению волновых функций $2N$ независимых линейных осцилляторов. Их частоты ω_j совпадают с частотами нормальных колебаний классической системы, потенциальная энергия которой имеет вид (8), а кинетическая энергия

$$T = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{d\mathbf{r}_n}{dt}\right)^2. \quad (9)$$

Полная энергия ВВ взаимодействия N псевдоатомов V_N запишется как разность между энергией ее основного состояния и суммой энергий изолированных псевдоатомов:

$$V_N = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{2N}\omega_j - N\omega_0. \quad (10)$$

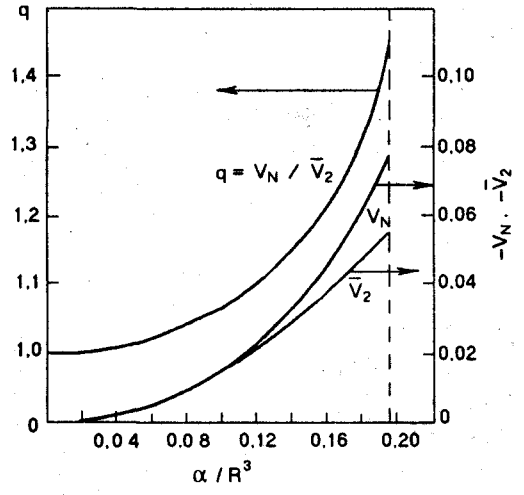

Рис. 5. Ван-дер-ваальсовская энергия системы дырок, локализованных в узлах квадратной решетки вторичной структуры с периодом R, как функция приведенной поляризуемости дырки $\alpha R^{-3} = \omega_0^{-2}R^{-3}$ (правая шкала). V_N — точная энергия системы (10), $\bar{V}_2$ — сумма парных потенциалов вида (11). Энергия выражена в единицах $N\omega_0$. Отношение $q = V_N/\bar{V}_2$ дает коэффициент экранирования (левая шкала). Вертикальная штриховая линия указывает границу устойчивости диэлектрической фазы.

Для системы двух псевдоатомов, разделенных расстоянием R, несложные вычисления по приведенной схеме приводят к следующему результату:

$$V_2(R) = -\frac{5}{8}\left(\frac{\bar{r}}{R}\right)^6, \quad \bar{r} = \langle r^2\rangle^{1/2} = \omega_0^{-1/2}. \quad (11)$$

В системе N_h псевдоатомов, размещенных в узлах квадратной решетки в плоскости CuO_2, ВВ взаимодействие каждой пары атомов испытывает экранирующее влияние со стороны остальных. Это экранирование описывается параметром q, определяемым отношением полной ВВ энергии решетки V_{N_h} к суммарной энергии всех парных взаимодействий:

$$V_{N_h} = q\sum_{n>m=1}^{N_h} V_2\left(|\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m|\right). \quad (12)$$

Расчет V_{N_h} формально сводится к нахождению нормальных координат классической решетки дырок с потенциалом (8). Результат представлен на рис. 5 как функция параметра $\beta = \alpha/R^3 = \omega_0^{-2}R^{-3}$ ($\alpha = \omega_0^{-2}$ — поляризуемость псевдоатома) в интервале $0 \le \beta \le 0{,}196$, где частоты ω_j вещественны. Появление комплексных частот в области $\beta > 0{,}196$ означает в рамках используемой модели делокализацию дырок и переход диэлектрик—металл.

Как видно из рис. 5, экранирующий множитель q возрастает с уменьшением межатомного расстояния R от 1 (при $R = \infty$) до значения 1,46, достигаемого вблизи перехода диэлектрик—металл. Это означает, что ВВ притяжение каждой пары локализованных дырок не ослабляется, а, напротив, усиливается при учете остальных.

4.3. Ван-дер-ваальсовское притяжение дырок в металлической фазе

Ограничимся окрестностью перехода диэлектрик—металл, где выполняется условие (7), т.е. промежуток τ между последовательными прыжками дырки превышает время установления ее стационарного состояния в потенциальной яме. Как и выше, поместим центры одинаковых осесимметричных потенциальных ям в узлы квадратной решетки с постоянной R. Запишем зонное состояние дырки в приближении эффективной массы:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_R^{1/2}} \exp(i\mathbf{k}_1\mathbf{r}) \sum_{n=1}^{N_R} \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_n) . \quad (13)$$

Здесь N_R — число потенциальных ям в плоскости CuO_2 ; $\mathbf{k}_1$ — положение дна первичной зоны в k-пространстве, согласно (2). Сомножитель $\exp(i\mathbf{k}_1\mathbf{r})$ описывает первичную структуру дырочной зоны, не зависящую от ее искривления. Остальные сомножители в (13) связаны со вторичным потенциальным рельефом: $\psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ описывает движение дырки в n-ой потенциальной яме, а линейная комбинация локализованных состояний, взятых с весами $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_n)$, образует из них в приближении сильной связи блоховскую волну. Запись (13), основанная на приближении сильной связи, оправдана для дырок с энергией ниже ε_F , поскольку энергия Ферми мала по сравнению с глубиной потенциальной ямы.

Теория сверхпроводимости связывает спаривание дырочных квазичастиц с матричным элементом потенциала взаимодействия u_{int} :

$$w_{\mathbf{kp}} = \int\int \Psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})\, \Psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}')\, u_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\, \Psi_{\mathbf{p}\uparrow}(\mathbf{r})\, \Psi_{-\mathbf{p}\downarrow}(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}' . \quad (14)$$

(стрелки указывают направление спина).

В потенциал взаимодействия u_{int} входят ВВ притяжение дырок и их кулоновское отталкивание, при оценке которых необходимо учесть металлическое экранирование. При условии (7) оно не затрагивает ВВ взаимодействия дырок, обусловленного корреляцией между их движением в разных потенциальных ямах [12], поскольку за время установления корреляции π/Ω дырки не успевают перераспределяться между ямами*. Кулоновское же отталкивание дырок существенно ослаблено металлическим экранированием ввиду большого расстояния R между соседними ямами. Действительно, для вырожденной ферми-системы ($\varepsilon_F >> k_B T$) радиус экранирования, выраженный в атомных единицах, близок к $v^{1/6}$, где v — объем, приходящийся на долю одного носителя [13]. Даже при очень малой концентрации дырок (0,05 на объемную ячейку) v составляет $3 \cdot 10^4$ и радиус экранирования близок к 6 ат. ед. $\approx$ 3 Å, что намного меньше расстояния между минимумами вторичного рельефа.

Сказанное позволяет пренебречь в u_{int} кулоновским отталкиванием дырок и учесть при подстановке (13) в (14) взаимодействие только между соседними псевдоатомами. Как было отмечено в разд. 4.2, их спины имеют противоположную ориентацию. Подставляя (13) в (14), ограничимся членами наинизшего порядка по малым интегралам перекрытия псевдоатомов. В результате (14) принимает вид

$$w_{\mathbf{kp}} = \frac{1}{N_R} \sum_{|\mathbf{R}_n| = R} \exp\left(i(\mathbf{k} - \mathbf{p})\mathbf{R}_n\right) \int \psi_{\uparrow}(\mathbf{r})^2\, u_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\, \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_n)^2 d\mathbf{r} d\mathbf{r}' . \quad (15)$$

Здесь опущено слагаемое с $\mathbf{R}_n = 0$, соответствующее пребыванию двух дырок в одной потенциальной яме. Пребывание двух дырок на одном узле вторичной структуры исключается при учете корреляции между дырками. Если исключить из суммы (13), формирующей зонное состояние дырки, один узел, занятый второй дыркой, то энергия первой дырки изменится на величину $\delta E_h \sim B/N_R$, где $B \sim 1/M^* R^2$ — полуширина вторичной зоны (M^* — эффективная масса вторичной структуры), а сопутствующее уменьшение энергии кулоновского отталкивания дырок составит величину $\delta E_c \sim 1/\bar{r} N_R$. Малость отношения $\delta E_h / \delta E_c \sim \bar{r}/M^* R^2 \lesssim 10^{-2}$ обусловливает существование корреляции рассматриваемого типа.

Оценим (15) вблизи перехода диэлектрик—металл, где вторичная зона заселена слабо и k, p близки к положению ее дна $\mathbf{k}_0$. Если $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| R < \pi/4$, $|\mathbf{p} - \mathbf{k}_0| R < \pi/4$, то экспоненциальный множи-

* Однако ВВ взаимодействие дырок экранируется диэлектрической средой без участия самих дырок. Действительно, электроны атомов решетки адиабатически подстраиваются к орбитальному движению дырок в потенциальных ямах, частота которого Ω мала по сравнению с атомным потенциалом ионизации I. Далее экранирование ВВ притяжения дырок учитывается диэлектрической проницаемостью диэлектрической фазы $\varepsilon(\Omega) = \varepsilon_\infty$.

тель в (15) не влияет на знак и порядок величины $w_{\text{кр}}$, и при оценке может быть опущен. Подставим в (15) вместо u_{int} парный ВВ потенциал (11), учитывая экранирование его диэлектрической средой без участия дырок:

$$wN_R \cong 4u_{\text{int}}(R) \cong \frac{4V_2(R)}{\varepsilon_\infty^2} = -\frac{5}{2\varepsilon_\infty^2}\left(\frac{\bar{r}}{R}\right)^6. \qquad (16)$$

Оценка (16) справедлива для всех дырочных носителей в энергетическом слое шириной $\delta E = \varepsilon_F$ (энергия Ферми отсчитывается от границы подвижности дырок).

Теория сверхпроводимости дает простейшую оценку ширины сверхпроводящей щели в виде

$$\Delta \sim \delta E \exp\left(\frac{1}{wN_R\rho(\varepsilon_F)}\right) \sim \varepsilon_F \exp\left(-\frac{4\pi R^4\varepsilon_\infty^2}{5M^*\bar{r}^6}\right). \qquad (17)$$

Здесь

$$\rho(\varepsilon_F) = M^*R^2/2\pi \qquad (18)$$

— плотность состояний, нормированная на плоскую ячейку вторичной структуры (в двумерном случае не зависящая от энергии).

Подставим в (17) среднее расстояние между центрами цепочек в виде $R = 2a(\nu/x)^{1/2}$ (как и раньше a — межатомное расстояние, ν — среднее число атомов кислорода в цепочке), а радиус локализованного состояния $\bar{r}$ оценим по полуширине потенциальной ямы (4): $\bar{r} \cong 2a\sqrt{3}$. Тогда при $a = 4$, $\varepsilon_\infty = 5$ оценка (17) примет вид

$$\Delta \sim \varepsilon_F \exp\left(\frac{-0{,}04\nu^2}{M^*x^2}\right). \qquad (19)$$

При $M^* \gtrsim 3$, $\nu \lesssim 5$ ширина щели меньше ε_F всего лишь в несколько раз и измеряется, в согласии с экспериментом, десятками миллиэлектронвольт.

Учитывая, в соответствии с (6), что $\varepsilon_F \propto n_h \propto (\nu - 1)$, находим, что при фиксированном x выражение (19) достигает максимума в точке $\nu = \nu_{\max}$, где

$$\nu_{\max} \cong \left(7x\sqrt{M^*} + 1\right)/2. \qquad (20)$$

Таким образом, при заданном содержании кислорода Δ сначала возрастает со средней длиной цепочек (пропорционально числу носителей), а затем, начиная примерно с $\nu = 5$, начинает уменьшаться.

При возрастании x и сопутствующем удлинении цепочек величина $R \propto (\nu/x)^{1/2}$ изменяется слабо, а $\bar{r}$ возрастает вместе с длиной цепочек. Поэтому из (17) следует, что Δ должно возрастать с концентрацией кислорода быстрее, чем пропорционально числу носителей. Этого не происходит, поскольку, как показано ниже, с возрастанием концентрации перестает выполняться предпосылка настоящего рассмотрения — неравенство (7).

Чтобы раскрыть смысл условия (7), оценим Ω как частоту колебаний частицы в потенциальной яме (4):

$$\frac{\pi}{\Omega} = \frac{2\nu a}{(U(0)/2)^{1/2}} = 4\nu\left(\frac{\varepsilon a^3}{\zeta}\right)^{1/2} \approx 4(\varepsilon a^3\nu)^{1/2} \qquad (21)$$

(в числителе промежуточного выражения стоит длина потенциальной ямы, в знаменателе — средняя скорость дырки; ее первичную эффективную массу полагаем равной единице). Время перехода дырки между соседними потенциальными ямами, разделенными расстоянием R, оценим как

$$\tau = \frac{R}{k_F/M^*} = \frac{a(4\nu/x)^{1/2}}{(2\varepsilon_F/M^*)^{1/2}} = \sqrt{2}\,a\left(\frac{\nu M^*}{x\varepsilon_F}\right)^{1/2}, \qquad (22)$$

где k_F — значение волнового вектора, соответствующее ε_F. Используя (21), (22), перепишем условие (7) в виде

$$\frac{\Omega\tau}{\pi} = \left(\frac{M^*}{8\varepsilon_F\, ax\varepsilon}\right)^{1/2} \gg 1. \qquad (23)$$

При слабом допировании ($x = 0{,}5$, $\varepsilon_F \cong 0{,}1$ эВ, $M^* = 3$, $\varepsilon = 5$) левая часть неравенства (23) равна 3,3, и оно удовлетворительно выполняется. Однако с возрастанием кислородного индекса x числитель в (23) уменьшается, а знаменатель возрастает, и неравенство (23) перестает выполняться. Это означает, что движение дырки по орбите потенциальной ямы с частотой Ω сопровождается заметным перераспределением дырок по ямам, приводящим к частичному металлическому экранированию ВВ взаимодействия дырок. Этим, вероятно, и объясняется тот экспериментальный факт, что в области $x > 0{,}7$ концентрационный рост T_c замедляется по сравнению с продолжающимся концентрационным возрастанием n_h и ε_F.

4.4. Об экспериментальных свидетельствах связи между механизмом спаривания и вторичным потенциальным рельефом

Связь между механизмом спаривания и каким-либо параметром электронной структуры может быть экспериментально установлена по наблюдаемой корреляции между критической температурой сверхпроводимости T_c и изменениями этого параметра. В экспериментальных работах, за исключением [14], отсутствуют какие-либо указания на корреляцию между T_c и изменениями потенциаль-

ного рельефа проводящей плоскости CuO_2. Обычно изменение T_c в разных процессах (при повышении уровня допирования, при отжиге образца [7] и т.д.) связывают с изменением числа дырочных носителей n_h. С такой же точки зрения интерпретировалось персистентное (долгоживущее) повышение T_c, достигаемое увеличением n_h при постоянном содержании кислорода в результате фотооблучения образцов $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ [15,16]. (Повышение концентрации носителей обусловлено фотостимулированным упорядочением кислорода в плоскости CuO_x, приводящим к удлинению медно-кислородных цепочек, к сокращению их числа и, как следствие, к увеличению суммарного отрицательного заряда плоскости CuO_x в соответствии с (6).)

В рамки таких представлений не укладывается, однако, временная зависимость T_c, измеренная в [14] одновременно с проводимостью нормального состояния σ при фотооблучении монокристаллической пленки $YBa_2Cu_3O_{6,5}$. Проведенный в [14] анализ временных зависимостей T_c, σ и коэффициента оптического поглощения показал, что в кинетике этих величин проявляются два релаксационных процесса с существенно различающимися постоянными времени: сравнительно быстрый процесс возрастания n_h и медленный процесс упорядочения кислорода в плоскости CuO_x, развивающийся, в основном, при практически постоянном n_h после выхода зависимости $n_h(t)$ на насыщение. Очевидно, медленный процесс, происходящий в плоскости CuO_x, влияет на электронные свойства плоскости CuO_2 (повышая T_c и σ) через упорядочение вторичного потенциального рельефа проводящей плоскости. Как оказалось [14], во временной зависимости T_c преобладает медленный процесс. Иными словами, T_c возрастает при постоянном n_h вследствие упорядочения вторичного потенциального рельефа. Тем самым косвенно подтверждается рассмотренный выше механизм спаривания носителей в плоскости CuO_2.

В рамках этого механизма естественно объясняется и тот экспериментальный факт, что временная зависимость T_c не повторяет быстрого возрастания n_h в начале фотооблучения. По-видимому, средняя длина цепочек ν попадает в окрестность максимума ширины щели, так что T_c слабо зависит от ν, а следовательно, и от n_h. В соответствии с (19), (20) этот максимум достигается при небольших ν, характерных для случая слабого допирования.

В заключение автор выражает глубокую признательность В. В. Еременко и В. В. Шапиро за стимулирующие дискуссии и предоставление еще неопубликованных экспериментальных данных. Автор благодарен В. И. Фомину за полезный обмен мнениями и И. Я. Фуголь и В. Н. Самоварову за критические обсуждения.

Настоящая работа была поддержана грантом U6142 фонда Сороса по рекомендации Американского физического общества, а также Государственным Комитетом Украины по вопросам науки и технологий.

1. M. A. Korotin, V. I. Anisimov, S. M. Butorin, V. R. Galachov, and E. Z. Kurmaev, *Mater. Lett.* **10**, 34 (1990).
2. S. N. Molotkov, S. S. Nazin, I. S. Smirnova, and V. V. Tatarskii, *Physica* **C193**, 314 (1992).
3. I. Fugol, V. Samovarov, A. Ratner, V. Zhuravlev, G. Saemann-Ischenko, M. Lippert, and B. Holzapfel, *Physica* **C216**, 391 (1993).
4. А. М. Ратнер, И. Я. Фуголь, *ФНТ* **19**, 322 (1993).
5. G. Uimin and J. Rossat-Mignod, *Physica* **C199**, 251 (1992).
6. G. Ceder, R. McCormak, and D. de Fontaine, *Phys. Rev.* **B44**, 2377 (1991).
7. B. W. Veal, A. P. Paulikas, H. You, H. Shi, Y. Fang, and J. W. Downey, *Phys. Rev.* **B42**, 6305 (1990).
8. A. Krol et al, *Phys. Rev.* **B45**, 2581 (1992).
9. T. Ito, K. Takenaka, and S. Uchida, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3995 (1993).
10. A. Sacuto, M. Balkanski, and O. Gorochov, *Solid State Communs.* **85**, 589 (1993).
11. B. Axilrod, *J. Chem. Phys.* **19**, 6 (1951).
12. А. М. Ратнер, *ФНТ* **3**, 1067 (1977).
13. Дж. Займан, *Электроны и фононы.*, Изд-во иностр. лит., Москва (1962).
14. В. М. Дмитриев, В. В. Еременко, И. С. Качур, В. Г. Пирятинская, О. Р. Приходько, А. М. Ратнер, Е. В. Христенко, В. В. Шапиро, *ФНТ* **21**, 219 (1995).
15. E. Osquiguil, M. Maenhoudt, B. Wuyts, Y. Bruynseraede, D. Lederman, and I. K. Schuller, *Phys. Rev.* **B49**, 3675 (1994).
16. D. Lederman, J. Hasen, I. K. Schuller, E. Osquiguil, and Y. Bruynseraede, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 652 (1994).

Two-scale electronic structure of copper-oxide superconductors and mechanism of superconducting pairing

A. M. Ratner

An acceptor impurity, which is distributed over the plain parallel to the conducting plane of CuO_2, builds up in the latter a Coulomb potential with a large characteristic distance. The hole band bottom curved by this potential plays the role of a secondary potential relief which reveals itself in the anisotropy of conduction and in the Raman scattering anomalies. The Van der Waals attraction between the holes localized in the minima of the secondary relief is found to be strong enough to give rise to a superconducting gap tens of millielectronvolts wide. The above phenomena are considered using superconductor $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ as an example. There is experimental evidence for the connection between the mechanism of superconductivity and the secondary potential relief.