

## CÁLCULO DE LA ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DEL SUPERCONDUCTOR $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$

C.E. DeLuque,<sup>1,2</sup> D. A. Landínez Téllez,<sup>1</sup> J.A. Rodríguez M.,<sup>3</sup> J. Roa-Rojas<sup>1</sup>

1. Grupo de Física de Nuevos Materiales, Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá DC

2. Escuela de Física, Universidad del Magdalena, Santa Marta

3. Grupo de Física de la Materia Condensada, Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá DC

(Recibido 09 de Sep.2005; Aceptado 20 de Jun. 2006; Publicado 20 de Nov. 2006)

### RESUMEN

Reportamos la determinación de la estructura electrónica del  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  mediante la aproximación de densidad local (LDA) y encontramos los valores de los parámetros que mejor ajustan las bandas. Además, presentamos gráficos de E en función de k, donde se observa un comportamiento acorde con los resultados obtenidos por otros investigadores. Adicionalmente, presentamos resultados, utilizando la teoría DFT (Density Funcional Theory) y el FP\_LAPW (Full Potencial Linear Augmented Plane Wave method) se ha calculado la densidad de estados para el material  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ .

**Palabras claves:** Superconductor cuprato, estructura electrónica y de bandas

### ABSTRACT

We report the determination of the electronic structure of  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  by using the LDA approximation and we found the values of fitting parameters for the band structure. Besides, we show graphics of E as a function of k with a behavior, which is in agreement with results reported by other authors. Results of the density of states by using DFT and PF LAPW are reported.

**Key Words:** Superconducting cuprato, electronic structure and of bands

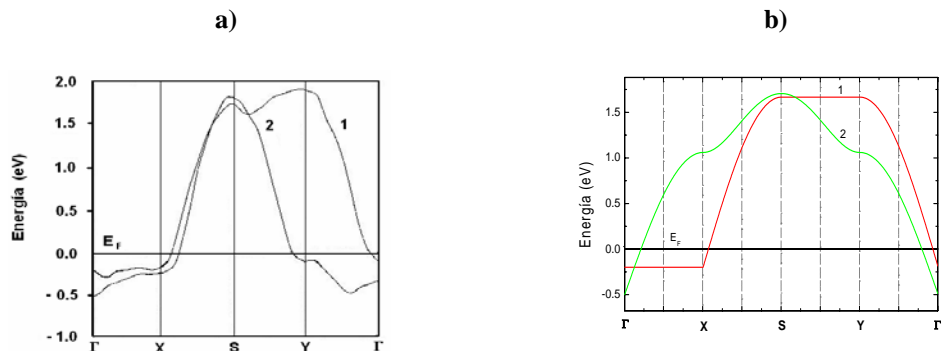
### 1. Introducción

El superconductor  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  (YBCO) es un material cerámico que evidencia propiedades superconductoras por debajo de 90 K y tiene una estructura ortorrómbica con parámetros de red:  $a=3,824 \text{ \AA}$ ,  $b=3,888 \text{ \AA}$  y  $c=11,687 \text{ \AA}$ . Las propiedades electrónicas del YBCO están determinadas por los enlaces que forman los átomos de Cobre y Oxígeno, tanto en los planos de conducción ( $\text{CuO}_2$ ), como en las cadenas ( $\text{Cu-O}$ ) de su estructura cristalina. La banda de conducción proviene principalmente de una fuerte hibridización de estados 3d del cobre con estados 2p del oxígeno. En 1987 Massida y colaboradores [1], determinaron la estructura electrónica del YBCO usando una aproximación de densidad local (LDA). Mediante este cálculo, determinaron una estructura electrónica que consiste de cuatro bandas, dos de ellas bidimensionales originadas en el plano de conducción ( $\text{CuO}_2$ ), y dos bandas unidimensionales originadas en las cadenas de  $\text{Cu-O}$ . Dos de las cuatro bandas cortan el nivel de Fermi, por lo que son semi-llenas, las otras dos bandas están vacías. En este trabajo presentamos resultados

del cálculo de bandas de energía del YBCO, utilizando la aproximación de enlace fuerte, que puede explicar razonablemente las principales características de estas dos bandas semillenas. Adicionalmente presentamos resultados de densidad de estados (DOS) para el YBCO en el estado normal, utilizando la teoría DFT (Density Funcitonal Theory) [2] y el FP\_LAPW (Full Potencial Linear Augmented Plane Wave method) [3].

**2. Cálculo de Estructura de Bandas**

En la figura 1a se muestran los resultados del cálculo de bandas obtenida de la referencia [1]. Las letras que aparecen en el eje de abscisas se refieren a puntos específicos de la base de la celda unidad en el espacio recíproco, que es un rectángulo de lados  $\pi/a$  y  $\pi/b$ . Los vértices del rectángulo se denominan  $\Gamma \rightarrow (0,0)$ ,  $X \rightarrow (\pi/a,0)$ ,  $S \rightarrow (\pi/a,\pi/b)$ , y  $Y \rightarrow (0,\pi/b)$ . Hass y colaboradores [2], propusieron que la aproximación de enlace fuerte puede explicar razonablemente las principales características de estas dos bandas semi-llenas. Admitiendo que la base de la celda unidad es cuadrada, lo que es aproximadamente cierto con un error de un 2%, ellos obtuvieron:  $E_1(k) = \varepsilon_1 + \gamma_1 \sqrt{1 - \cos k_y b}$   $E_2(k) = \varepsilon_2 + \gamma_2 \sqrt{1 - 1/2(\cos k_x a + \cos k_y b)}$  La banda 1 es antienlazante y proviene de la combinación de estados  $3d_{x^2-y^2}$  del Cu y  $2p_y$  del O en las cadenas Cu-O. Para obtener los resultados supusieron además que las energías de los niveles atómicos  $E_p$  y  $E_d$  son iguales. La banda 2 también es antienlazante y proviene de la combinación de estados  $3d_{x^2-y^2}$  del Cu en la posición  $(0, 0,0)$ ,  $2p_x$  del O en la posición  $(a/2, 0,0)$  y  $2p_y$  del O en la posición  $(0, b/2,0)$  igualmente se ha supuesto que  $E_p$  y  $E_d$  son iguales. Inicialmente encontramos los valores de los parámetros  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \gamma_1$  y  $\gamma_2$  que mejor ajustan las bandas de la figura 1a.



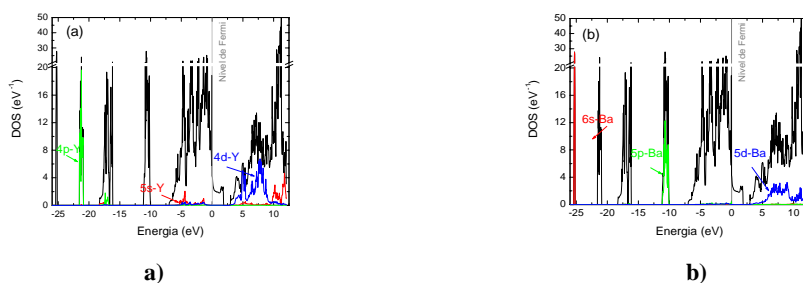
**Fig.1** (a) Estructura de bandas reportada en la literatura para el YBCO. (b) Estructura de bandas del YBCO calculada mediante la aproximación de enlace fuerte.

Una vez hallados los parámetros, representamos gráficamente  $E$  en función de  $k$ , (Figura 1b), y observamos que los resultados para la banda 1 (cadenas Cu-O), son cualitativamente muy buenos. Para la banda 2 (planos  $CuO_2$ ), se observa un desacuerdo en algunas direcciones. Lo anterior se debe a que no es probable que con una relación de dispersión con dos únicos parámetros libres se pueda explicar satisfactoriamente una banda bidimensional. Aun así, la

relación de dispersión mantiene las principales características de la banda 2. Los resultados obtenidos permiten explicar las principales características de las dos bandas semi-llenas.

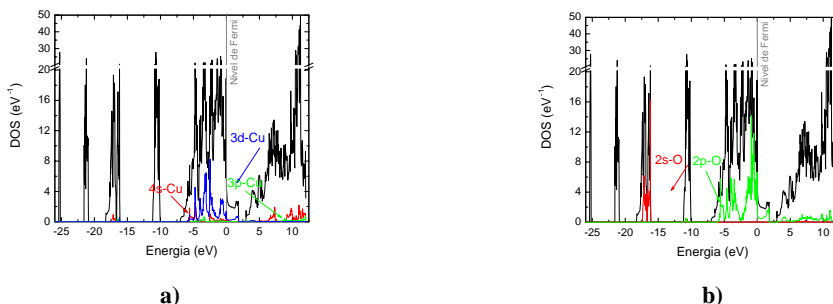
### 3. Cálculo de la Densidad de Estados usando DFT

Los resultados obtenidos para las DOS se pueden observar en las figuras 2 y 3, donde se muestra en línea negra la DOS total y en colores se observa la contribución parcial de cada tipo de orbital de los átomos que intervienen: Y, Ba, Cu y O. El nivel de Fermi se ha elegido como cero para las energías. Se concluye que el YBCO, en su estado normal, es un metal ya que inmediatamente por encima del nivel de Fermi se encuentran estados desocupados, y esta banda es la banda de conducción. A la izquierda del nivel de Fermi se observa la banda de valencia. Esta banda presenta varias sub-bandas dentro de ella. La más profunda, ubicada hacia  $\sim -25$  eV se debe a la presencia de los orbitales  $6s$  del Bario. En  $\sim -21$  eV se encuentran los orbitales  $4p$  del Y. Aproximadamente hacia los  $-17.5$  eV se hallan los electrones  $2s$  del O. En  $\sim -10$  eV se ubican los orbitales  $5p$  del Bario.



**Fig.2** Densidad de Estados con las contribuciones electrónicas parciales (a) del Y y (b) del Ba.

Estas sub-bandas de la banda de valencia son profundas y muy estrechas, indicando que dichos electrones se encuentran localizados como debe corresponder a electrones de valencia fuertemente ligados. En el borde superior de la banda de valencia (entre  $-5$  y  $0$  eV) se encuentran los electrones  $2p$  del O mayoritariamente, con contribuciones minoritarias de  $3d$  y  $4s$  del Cu. Inmediatamente en seguida del nivel de Fermi se encuentran también orbitales  $p$  del O con contribuciones apreciables de orbitales  $3d$  del Cu. Hacia  $2.5$  eV se encuentra una brecha de energías prohibidas, que es interno de la banda de conducción. Luego se encuentra la parte superior de la banda de conducción, la cual está conformada principalmente por orbitales  $d$  de Ba e Y y orbitales  $5s$  del Y en la parte más alta, hacia los  $10$  eV. En conclusión, hemos realizado un estudio de las bandas electrónicas en el YBCO para el estado normal de este material en el estado normal. El estudio se realizó en el marco de la teoría del densidad funcional con la aproximación del gradiente generalizado.



**Fig.3** Densidad de Estados con las contribuciones electrónicas parciales (a) del Cu y (b) del O.

Del análisis de las bandas podemos concluir que las bandas en las proximidades del nivel de Fermi se encuentran determinadas por los orbitales *p* de O (en la banda de valencia) y por orbitales *p* del O y *3d* del Cu, justo por encima del Nivel de Fermi.

**Agradecimientos:** Este trabajo tuvo el apoyo parcial de COLCIENCIAS: proyecto No. 1101-05-13604 y Centro de Excelencia en Nuevos Materiales, contrato No. 043-2005.

**REFERENCIAS**

[1] S. Massida, J. Yu, A. J. Freeman, D. D. Koelling, Phys. Lett. A 122, 198 (1987).  
 [2] K. C. Haas, Sol. Stat. Phys. 42, 213 (1989).  
 [3] P. Blaha, K. Schwarz, J. Luitz. WIEN 97. A Full Potential Linearized Augmented Plane Wave Package for Calculating Crystal Properties, Edit. Katherine Schwarz, Tch. Universität Wien Austria. (1999).