

Sc 替代 Y-Ba-Cu-O(123) 系统的 Cu 位对该系统电子结构的影响

王怀玉¹⁾ 章立源 刘福绥 王思哥

北京大学物理系, 北京, 100871

1990 年 3 月 5 日收到

本文计算了高温超导材料 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{ScO}_7$ 的电子结构. 对于 Sc 替代 Cu1 和 Cu2 晶位的两种情况都进行了研究. 后者对 Cu-O 二维面的电子结构的影响较大, 有可能破坏高温超导性. 但计算表明, 替代 Cu1 晶位的可能性要大一些. 本文结果显示, Sc 的成键分波轨道与其余四个 3d 轨道的交迭分裂约为 4eV, 据此可用近红外荧光实验判定在 Sc-Y-Ba-Cu-O 高温超导材料中, Sc 究竟是替代 Y 晶位还是 Cu 晶位.

PACC: 7120

一、引 言

在 Y-Ba-Cu-O 和其它高温超导材料中用别的金属元素进行替代是探索对 T_c 影响的方法之一. 例如用过渡族元素替代 Cu 晶位^[1], 发现少量的掺杂即导致 T_c 大幅度下降. 我们最感兴趣的是用 Sc 作替代, 因为它有两个特点^[2,3], 其一是 Sc 能替代 Y, Cu 两种元素的晶位; 其二是在替代浓度很高时 (35—60at%), 材料仍保持为高温超导性. 我们已经研究了 Sc 替代 Y 的情况^[3], 发现由于 Sc 原子与 Y 原子的外围价电子数相同, 且态密度都在费密面以上, 因此 Sc-Y 替代对于其它晶位的电子结构影响甚微. 并且费密面的位置具有稳定性, 费密面处态密度的值随掺 Sc 浓度的变化很小. 我们曾预计, Sc-Cu 替代对电子结构的影响比 Sc-Y 替代要大.

本文研究 Sc 替代 Cu 的情况. 考虑到在 $\text{YBa}_2(\text{Cu}_{1-x}\text{Sc}_x)_3\text{O}_7$ 材料中, $x = 0.35$ 时仍是高温超导的, $x = 0.4$ 的材料为半导体^[2], 我们选择了 $x = 0.33$ 的情况, 即一个原胞中的三个 Cu 晶位有一个被 Sc 替代. X 射线相分析表明^[2], 在这样的掺杂浓度下, 高温超导正交相仍为主要相. 在 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ 晶体中, 有两种 Cu 晶位, 即 Cu1-O4 一维链 (沿 y 轴) 上的 Cu1 晶位和 Cu2-O2, O3 二维面上的 Cu2 晶位. 我们分别计算了 Sc 替代 Cu1 和 Cu2 晶位时的电子结构, 研究了各自所产生的影响. 对于第一种情况, Sc 替代了全部 Cu1 晶位的原子. 对于第二种情况, 则替代了一半 Cu2 晶位的原子. 这时 Cu-O 层上的原子排布情况如图 1, 在其紧邻的 Cu-O 层上, Cu, Sc 位置交换. 这样

1) 现在工作单位: 烟台大学物理系.

使替代呈最均匀的有序分布,保留晶格周期性.

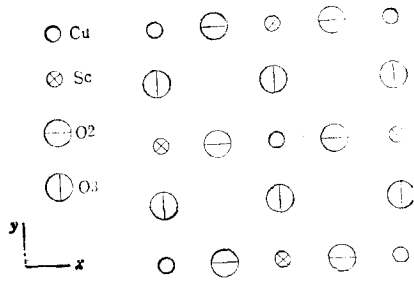


图1 Sc 替代 Cu₂ 晶位时, Cu-O 层上的原子排布
紧邻的 Cu-O 层上, Cu, Sc 位置交换

二、计算方法与模型

本文用 Recursion 方法^[4]计算电子态密度. 态密度是格林函数的虚部, 格林函数则是根据哈密顿量来计算的. 哈密顿量可以在不同的表象不同的基组中表达出来, 格林函数的具体表示式也相应不同. 但态密度作为一个可观察的物理量, 应该是唯一的, 不依赖于表象和基组的选取. 针对这一特点, 可以

选取一个合适的表象中的一套合适的基组, 使得哈密顿量在这组基上显得特别简单, 由此出发可很容易地求得态密度. Recursion 方法就是用一递推过程, 将哈密顿量变换成三对角实对称矩阵, 因此求格林函数极为方便. 具体过程如下.

对于一给定基组 $\{\phi_n\}$, 在此基上的哈密顿量为 H . 如果我们需要知道 $u_0 = \phi_0$ 态的有关信息, 可将 H 作用于 u_0 之上, 通过下列递推关系, 得到一组新的基 $\{u_n\}$:

$$Hu_n = a_n u_n + b_{n-1} u_{n-1} + b_{n+1} u_{n+1}, n = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

其中设初始条件

$$u_{-1} = 0 \quad (2)$$

和要求正交归一化条件

$$\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn} \quad (3)$$

后, 可求得系数为

$$a_n = \langle u_n | H | u_n \rangle, \quad (4)$$

$$b_n^2 = |\langle u_{n-1} | H | u_n \rangle|^2 = |\langle u_n | H | u_{n-1} \rangle|^2. \quad (5)$$

并且有

$$\langle u_n | H | u_m \rangle = 0 \quad (n \neq m, m \pm 1). \quad (6)$$

(1) 式表示一个线性变换, 新的正交归一基组 $\{u_n\}$ 是原基组 $\{\phi_n\}$ 的线性组合. (1) 式还反映了, 在新的基组中, 哈密顿矩阵是如下的三对角对称矩阵的形式:

$$H = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & & & \\ b_1 & a_1 & b_2 & & \\ & b_2 & a_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (7)$$

为方便计, 取 (5) 式中的 b_n 为正值. 既然两组系数 $\{a_n\}$ 和 $\{b_n\}$ 是新基组中哈密顿矩阵的元素, 因此它们应该含有哈密顿量的全部信息, 可用来求各种物理量. 其中初态 u_0 的格林函数正好可以表示为系数 $\{a_n\}$ 和 $\{b_n\}$ 的连分数形式:

$$\langle u_0 | \frac{1}{E - H} | u_0 \rangle = \frac{1}{E - a_0 - b_1^2 / [E - a_1 - b_2^2 / (E - a_2 - \dots)]}. \quad (8)$$

由此很容易求得初态 u_0 的态密度:

$$n_{u_0}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle u_0 | \frac{1}{E + i0^+ - H} | u_0 \rangle. \quad (9)$$

此法可以计算单个状态的态密度,对于固体中的情况,可以计算每个原子的态密度而可以不受晶格周期性的限制,因此用来研究有掺杂、缺陷、空位等的固体内部的各处局域态密度极为方便,能给出一些局部的细致的信息。

本文研究晶体中的局域电子结构,选用 Wannier 表象,用原子轨道作为基组 $\{\phi_n\}$. 紧束缚哈密顿量中只考虑最近邻格点之间的跃迁,这已由 Harrison^[5] 给出. 原子团模型与文献 [3, 6] 中所用的相同,包括 $7 \times 7 \times 3$ 个晶格,共有 2316 个原子. 计算中心原胞的各晶位上外围价轨道的态密度,它们是 O(2p), Cu(3d, 4s), Y(4d, 5s), Ba(6s), Sc(3d, 4s). 从最近邻跃迁的物理图象可以看到, u_0 是所要计算的格点上的状态, u_1 是第一近邻格点上的状态的线性组合,等等. u_n 则包含第 n 近邻格点的态. 因此, n 越大, u_n 就越远,对 u_0 态密度的贡献就越小. 这样可以对 (1) 式的递推关系在某处作截断. 对截断的更详细的分析见文献 [4], 实际计算时按照具体情况决定在何处截断. 作者根据自己的计算经验^[6], 选取 $n = 30$.

三、Sc-Cu 替代对电子结构的影响

图 2 至图 7 是 $\text{YBa}_2\text{Cu}_2\text{ScO}_7$ 晶体的局域电子态密度的部分计算结果. 其中图 2 至图 4 是 Sc-Cu1 替位. 图 5 至图 7 是 Sc-Cu2 替位. 下面对照 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (以下简称纯材料)和 $\text{Y}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (简称 Sc-Y 材料)的电子结构进行讨论. 本文未画出的分波态密度与 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ 晶体的相应分波图相同,后者的电子结构的计算结果及其与能带的比较见文献 [3]. 为叙述方便,下面我们把替代 Cu1 晶位的 Sc 称为 Sc1 晶位,替代 Cu2 晶位的 Sc 称为 Sc2 晶位,这两种替代后的材料分别称为 Sc-Cu1 替代材料和 Sc-Cu2 替代材料.

Sc 与 Cu 相比,前者的 3d 轨道半径参量大一些^[7], 故与最近邻 O 原子的交迭更强些,使得参与成键的 O(p) 分波能带展宽,从而其原子价比纯材料中相应晶位的原子价低 (见表 1).

在 Sc-Cu1 替代材料中,电子结构明显受 Sc1 晶位影响的是最近邻的 O1, O4 晶位. 它们都在能带顶端出现峰: O1 晶位的态密度 (见图 2(f)) 在 $E = -0.02 - 0.01\text{Ryd}$ 之间有峰,它们是属于 O1(z) 分波的,见图 3(c). O4 晶位的态密度 (见图 2(i)) 在 $E = 0.1\text{Ryd}$ 和 $E \approx 0$

处各有一峰,它们是属于 O4(y) 分波的,见图 3(e). 观察图 4 中 Sc 的分波态密度可看到, Sc(s) 分波态密度 (图 4(a)) 能带顶端的峰与 O4(y) 能带顶端的峰位置相近,形状相似. Sc($3z^2 - r^2$) 分波 (图 4(e)) 的峰与 O1(z) 能带顶端的峰相近. 可见 Sc(s)-O4(y) 和 O1(z)-Sc($3z^2 - r^2$) 分别构成两个很强的 $sp\sigma$ 和 $pd\sigma$ 反键态. Sc($x^2 - y^2$) (图 4(d)) 能带顶端的峰也与 O4(y) 能带顶端的峰相近,这是较弱的 $pd\sigma$ 反键. 此外, O1, O4 晶位的其它四个分波在费密面之上约 1.5eV 处各有一个小峰,这些与 Sc 的

表 1 $\text{YBa}_2\text{Cu}_2\text{ScO}_7$ 晶体中各晶位的原子价 $V_{\text{原子}}$ 与费密面处的态密度 $N(E_f)$ (单位: states/Ryd · cell) 为便于比较,也列出 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ 和 $\text{Y}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ 晶体的相应的值

晶位	$\text{YBa}_2\text{Cu}_2\text{ScO}_7$				$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$		$\text{Y}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$	
	Sc-Cu1 替代		Sc-Cu2 替代		$V_{\text{原子}}$	$N(E_f)$	$V_{\text{原子}}$	$N(E_f)$
	$V_{\text{原子}}$	$N(E_f)$	$V_{\text{原子}}$	$N(E_f)$				
O1	-1.48	0.144	-1.62	0.676	-1.60	0.72	-1.62	0.66
O2	-1.39	3.274	-1.26	2.586	-1.35	4.10	-1.34	3.88
O3	-1.34	2.978	-1.28	2.690	-1.32	2.82	-1.34	3.00
O4	-1.40	0.039	-1.55	0.650	-1.52	0.63	-1.53	0.55
Cu1			1.68	6.432	1.68	7.70	1.69	7.81
Sc1	1.45	0.159						
Cu2	1.40	25.840	1.49	20.912	1.38	26.24	1.40	27.10
Sc2			1.30	2.995				
Y	2.05	0.209	2.03	0.650	2.04	0.05	2.02	0.07
Ba	1.78	0.032	1.76	0.048	1.79	0.02	1.79	0.04
Sc							2.15	0.75
总计	32.67		37.55		42.3		43.8	

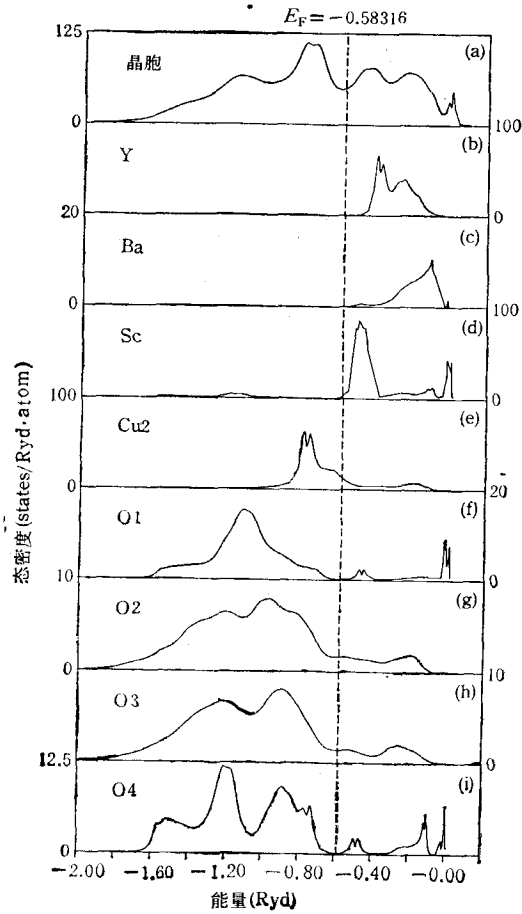


图 2 Sc-Cu1 替代后的原子态密度与原胞总态密度

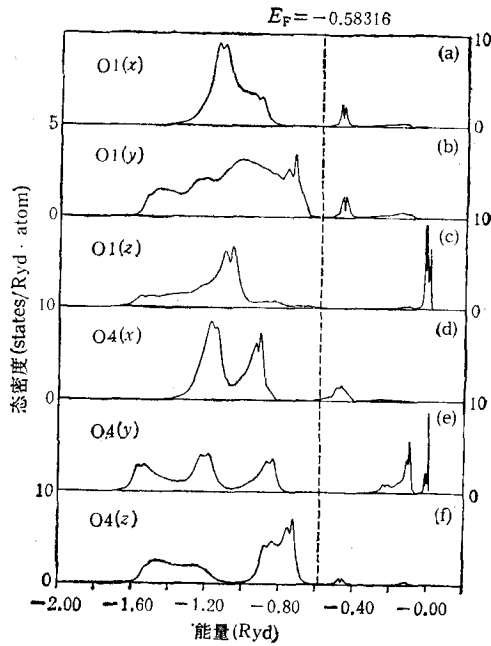


图 3 Sc-Cu1 替代材料中, O1, O4 晶位的分波态密度

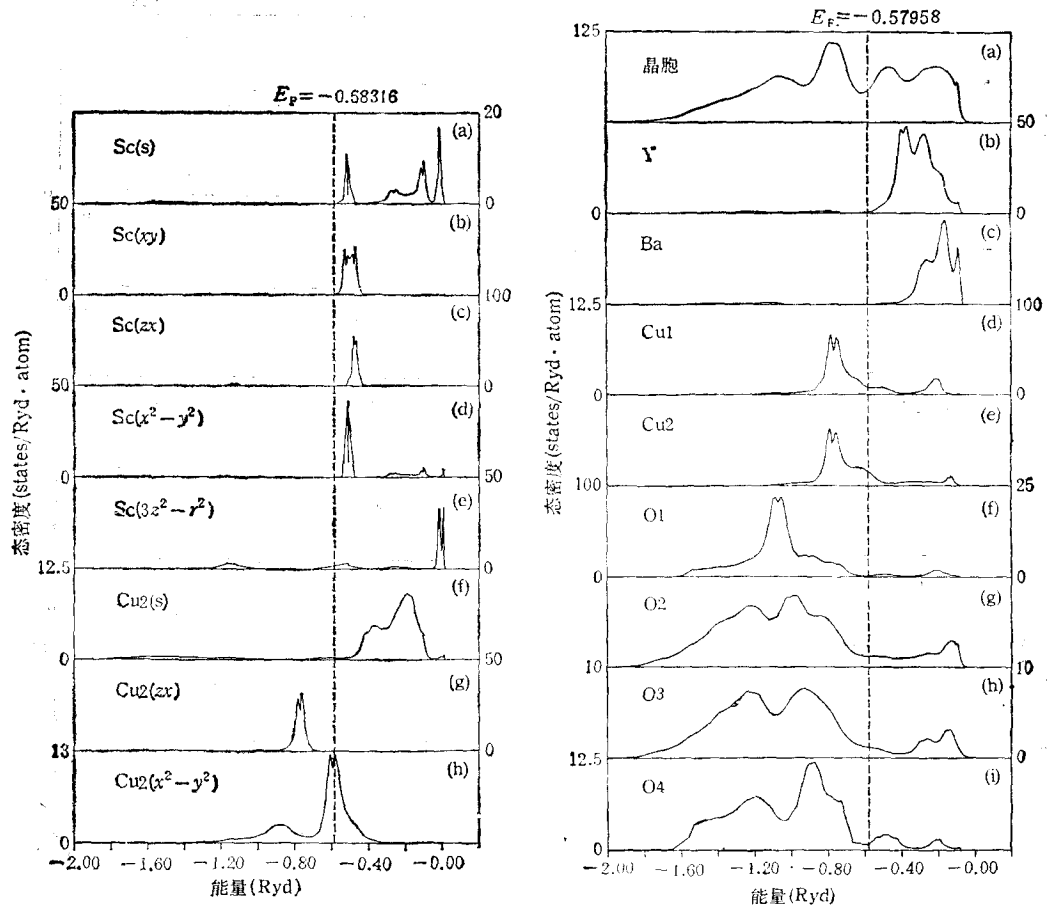


图 4 Sc-Cu1 替代材料中 Sc, Cu 晶位的部分分波态密度 Sc(yz) 与 Sc(zx) 相近

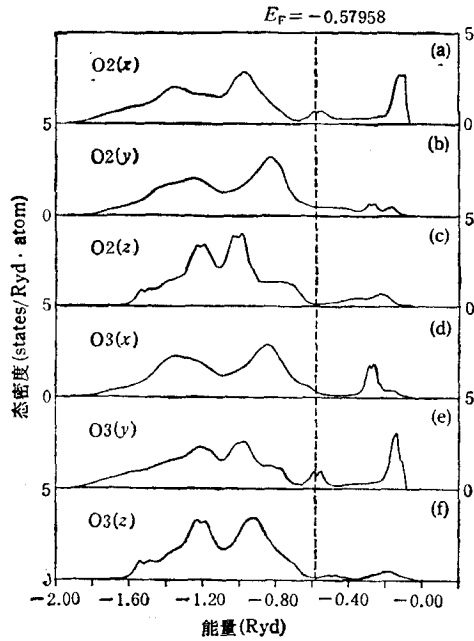
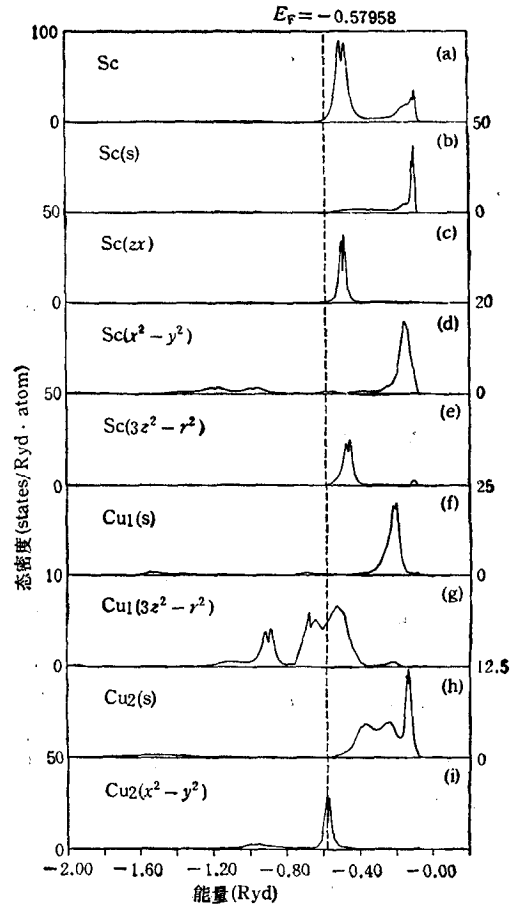
图 5 Sc-Cu2 替代后的原子态密度与原胞总态密度

xy , yz , zx 三个 d 轨道的能带位置一致, 它们分别是 $O1(x)-zx$, $O1(y)-yz$, $O4(x)-xy$, $O4(z)-zy$ 四个 $pd\pi$ 键。由于 Sc 与最近邻 O 晶位的距离较近(约 1.9 \AA), 这些键态比较明显。相比之下, 在 Sc-Y 替代时^[3], Sc 与最近邻 $O2$, $O3$ 之间的距离较远(约 2.4 \AA), 上述键态较弱, 不能在态密度上明显反映出来。

由于 $O1$, $O4$ 晶位的能带的一部分分裂至费密面以上, 使得这两个晶位的费密面上的态密度降低(与纯材料比较, 见表 1), 这归因于 $O1(x)$ 和 $O4(y)$ 两个分波的 $N(E_f)$ 的下降, 见表 2。

在 Sc-Y 替代中, Sc 的各轨道能带基本都在费密面以上^[3]。而在 Sc-Cu1 替代中, Sc1 与最近邻原子的强交迭作用使得 Sc 的分波能带展宽(可将本文图 4(a)~(e) 与文献 [3] 中图 4 比较), 一部分态密度进入费密面以下, 从而 Sc 的原子价比在 Sc-Y 材料中低, 参阅表 1 中 Sc1 与 Sc 晶位原子价的比较。

此外, Sc-Cu1 替代只是使费密面略有下降(比纯材料降低 0.07eV), 对于其它原子, 特别是 Cu-O 层上的电子结构基本无影响, 因为它们都已是次近邻。

图 6 Sc-Cu₂ 替代材料中 O₂, O₃ 晶位的分波态密度图 7 Sc-Cu₂ 替代材料中, Sc, Cu 晶位的部分分波态密度 Sc(xy), Sc(yz) 与 Sc(zx) 相近

在 Sc-Cu₂ 替代材料中, 受 Sc₂ 晶位影响最大的是其最近邻的 O₂, O₃ 晶位。在 YBa₂Cu₃O₇ 晶体中, Cu₂($x^2 - y^2$)-O₂(x), O₃(y) 组成跨越费密面的强 $pd\sigma$ 反键。Sc₂ 也有 d 轨道, 必定有相应的反键态。这表现在这些分波的能带顶端都出现位置与形状一致的尖峰(见图 6 与图 7)。Sc($x^2 - y^2$) 与最近邻轨道的强交互作用使其能带展得很宽, 在费密面以下, O(p) 态密度集中的区域, Sc($x^2 - y^2$) 分波态密度也有贡献(图 7(d)), 即有一定的成键态。

由于 O₂, O₃ 原子与最近邻的 Sc, Cu 原子都组强键, 因此 Sc₂ 的影响就通过 O₂, O₃ 晶位传递给次近邻的 Cu₂ 晶位。与纯材料(文献[3]中的图 3)相比, 我们看到图 7(i) 中 Cu₂($x^2 - y^2$) 分波有明显的变化, 两个峰的位置有移动, 且高峰更为尖锐。两个峰的位置在 E_f 处和费密面以下约 5.4eV 处。Sc($x^2 - y^2$), O₂(x), O₃(y) 在这两个位置处都有峰, 表现出 Cu₂, Sc₂ 与最近邻 O 原子在这一能量范围内构成相同的键态。在高能量处(能带顶端) Cu 则不参与成键。

Cu₂ 成键分波中高峰的上移有两个效果, 一是 Cu₂ 的价数(比纯材料)有所升高, 见表 1。二是部分抵消了因 Sc 的能带进入费密能以下而导致的费密面下降, 使费密面基

表 2 几种晶体中各氧晶位的分波轨道在费密面上态密度的贡献(单位: states/Ryd·atom)

晶位	分波	YBa ₂ Cu ₃ ScO ₇		YBa ₂ Cu ₃ O ₇	Y _{0.5} Sc _{0.5} Ba ₂ Cu ₃ O ₇
		Sc-Cu1 替代	Sc-Cu2 替代		
O1	x	0.006	0.005	0.001	0.002
	y	0.012	0.029	0.029	0.027
	z	0.054	0.304	0.326	0.305
O4	x	0.016	0.002	0.002	0.001
	y	0.006	0.634	0.610	0.538
	z	0.017	0.014	0.014	0.015
O2	x	0.971	0.667	1.390	1.249
	y	0.570	0.503	0.620	0.601
	z	0.096	0.123	0.040	0.047
O3	x	0.337	0.329	0.289	0.326
	y	1.093	0.871	1.082	1.106
	z	0.059	0.145	0.043	0.068

本保持不变(只比纯材料下降 0.02eV)。

与 Sc1 影响最近邻 O1, O4 晶位的原因相同, O2, O3 的能带展宽, 原子价降低, 费密面上态密度的贡献降低。同时 Sc 的价数比 Sc-Y 材料中的低, 甚至比 Sc1 还低(见表 1 中 Sc2 与 Sc, Sc1 晶位原子价的比较), 这是因为二维面上 $pd\sigma$ 键很强的缘故。

四、讨 论

根据本文计算结果可以看到, Sc 替代两种 Cu 晶位后的共同特点。Sc 与最近邻 O 原子的成键分波都在某些能量处出现位置与形状相近的峰, 在能带顶端尤为明显, 显示了强反键态的形成。O 晶位中最主要的成键轨道是 Sc-Cu1 替代材料中的 O1(z), O4(y) 与 Sc-Cu2 替代材料中的 O2(x), O3(y), 它们因能带分裂而在 E_f 处的态密度的贡献(比纯材料)有不同程度的降低(见表 2), 并导致相应 O 晶位的总 $N(E_f)$ 降低, 见表 1。Sc 的成键分波能带都展宽, 从而其原子价较 Sc-Y 材料中有显著的下降, 见表 1。费密面的位置变化很小, 不到 0.08eV, 因为 Sc-Cu 替代虽然减少了费密面以下的态密度, 但价电子数也相应减少(Sc 比 Cu 少 8 个外围价电子)。预计费密面位置这么小的变化实验上很难探测出来。从表 1 中可以看到, Sc 的价数总是小于被它替代的 Cu 的价数, 这样它所能提供的价电子就比 Cu 少, 近邻的 O 原子所得到的电子就少。换一种说法, 就是 O 的能带向高能量方向展宽, 使费密面以下的态密度减少, 因此导致 Sc 的近邻原子价下降。Sc1 导致 O1, O4 原子价的下降, Sc2 导致 O2, O3 原子价的下降, 而非 Sc 的最近邻的 O 晶位的原子价变化小, 见表 1。从表 1 中 $V_{\text{原子}}$ 和 $N(E_f)$ 的数值看, Sc-Y 替代对电子结构几乎没有影响, 而 Sc-Cu 替代则有明显的影响。

Sc-Cu 替代材料与纯材料的一个引人注目的差别是原胞总态密度 $N(E)$ 在 E_f 处的斜率, 对 Y-Ba-Cu-O(123) 系统它为负(见文献 [3] 中图 1), 而以 Sc 替代 Y-Ba-Cu-O(123) 系统的 Cu 位后该斜率为正, 见图 2(a) 和图 5(a), 这是因为 Cu 的态密

度在费密面以下并对 $N(E)$ 有主要的贡献,而 Sc, Y 的态密度都在费密面以上, Sc-Cu 替代使费密面两侧的态密度一增一减而导致 $N(E)$ 在 E_f 处斜率由正变负. 由于 $N(E_f)$ 中大部分贡献来自 Cu, Sc-Cu 替代使 $N(E_f)$ 略有下降, 见表 1. 预计随 Sc-Cu 替代浓度的提高, $N(E_f)$ 将继续下降. 从实验(文献 [2] 中图 4)可定性看到, 随掺 Sc 浓度增加, $N(E_f)$ 下降. 我们的计算结果与实验定性一致. Sc-Y 替代后, 提高了 E_f 以上并紧挨费密面的态密度, 使 $N(E)$ 在 E_f 处的负斜率减小, 当 Sc 替代一半 Y 时, 这一斜率接近为零, 见文献 [3] 中图 4.

从表 1 中看到, Sc-Cu 替代对于未被替代的 Cu 的原子价的影响不大, 只是 Sc-Cu₂ 材料中 Cu₂ 的原子价稍有上升. 而实验上观测到^[2], Sc 的替代使 Cu 的价数下降. 我们在文献 [3] 中分析过, Sc-Y 替代可能引起 O 空位浓度的变化而导致 Cu 的价数降低. 在 Sc-Cu 替代中, 仍可能是通过这一途径导致 Cu 的价数降低. 实验上未给出 O 空位出现的具体结果, 我们无法在这方面作定量的计算. 在涉及 O 空位浓度的变化时仍可有费密面的稳定性^[3].

在实际材料中用 Sc 替代掺杂 Cu 晶位时, 应认为 Cu₁, Cu₂ 晶位都有被替代的可能. 我们根据计算结果认为替代 Cu₁ 的可能性大一些. 首先是 Sc-Cu₁ 替代材料比 Sc-Cu₂ 替代材料的费密面低. 我们还计算了两种替代下的总结构能

$$E_s = \int_{-\infty}^{E_f} N(E) dE,$$

其中 $N(E)$ 是原胞总态密度, 得到 Sc-Cu₁ 材料 $E_s = -61.99\text{Ryd}$, Sc-Cu₂ 材料

$$E_s = -61.88\text{Ryd}.$$

说明前者更稳定些. 其次我们算出 Sc 的价数不是接近三价, 而是不到二价, 与 Cu 的价数接近. 因此在材料中实际的 Sc 离子半径比预想的 Sc^{+3} 离子半径要大一些, 所以将尽量进入空间尽可能大的晶位. Cu₁ 和 Cu₂ 最近邻分别为四配位和五配位, 而且一维链上还有 O 空位, 因此取代 Cu₁ 晶位的可能性大. 较多地替代 Cu₁ 晶位意味着对 Cu-O 层的干扰小些, 这有利于保持高温超导性.

在研究 Sc-Y 材料时, 我们注意到替代 Y 晶位的 Sc 的 3d 轨道有交迭分裂, z^2 和 $x^2 - y^2$ 的能级略高, 其余三个轨道能级略低, 两者差为 1eV. 而在本文的 Sc-Cu 替代中, Sc 的成键最强的一个分波, 即 Sc1 的 $(3z^2 - r^2)$ 和 Sc2 的 $x^2 - y^2$ 分波的峰值位置与其余四个分波能带的峰位相差较远, 达 4eV. 这是一个大得出乎意料的交迭分裂. 我们没有考虑 Sc 的晶场分裂, 因为没有这方面的实验值, 估计也不会大于 Cu 的相应的晶场分裂 (1.44eV^[7]). 现在 Sc 轨道的交迭分裂就远大于 Cu 的晶场分裂. 此结果可启发我们如何在实验上确定 Sc 到底是替代 Cu 晶位还是 Y 晶位的. 实验上, 当用 Y_2O_3 , BaCO_3 , Sc_2O_3 和 CuO 制备^[8,9] Sc-Y-Ba-Cu-O 材料时, Sc 被认为是替代了 Cu 晶位. 如果原料中用金属铜代替氧化铜, 则认为制成的材料中 Sc 替代了 Y 晶位^[10]. 但未见有报道是否真正从实验上观察到 Sc 替代了什么晶位. 根据我们的结果, 作者认为, 可以用与测定 Cu3d 轨道^[7]分裂相同的近红外荧光实验来探测掺 Sc 材料中所有 3d 轨道的能级分裂. 如果只有 1—2eV 的峰, 说明 Sc 只替代 Y 晶位. 如果有 4eV 左右的峰, 则说明有些 Sc 替代了 Cu 晶位. 如果除 Cu 的 1.44eV 的轨道能级劈裂外, 就只有

4eV 左右的峰,表明 Sc 全部替代了 Cu 晶位。

- [1] G. Xiao, F. H. Streitz, A. Garvin, Y. W. Du and C. L. Chien, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 8782.
- [2] N. Mori, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **28**(1989), 980.
- [3] 王怀玉、章立源、刘福绥、王恩哥,低温物理学报,待发表.
- [4] R. Hydock, *Solid State Physics*, **35**(1980), 2156.
- [5] W. A. Harrison, *Electronic Structure and Properties of Solids*, W. H. Freeman and Company, San Francisco, (1980).
- [6] Huaiyu Wang, Fusui Liu and Chongyu Wang, *J. Phys.*, **1**(1989), 1983.
- [7] Z. F. Song, L. Z. Zhang, J. G. Wu, H. Z. Liu, J. F. Wang, D. F. Xu and G. X. Xu, preprint.
- [8] B. R. Zhao, Y. H. Shi, Y. Lu, H. S. Wang, Y. Y. Zhao and L. Li, *Solid State Commun.*, **63**(1987), 409.
- [9] Y. H. Shi, H. S. Wang, Y. Lu, B. R. Zhao, Y. Y. Zhao and L. Li, *Solid State Commun.*, **63**(1987), 641.
- [10] N. Mori, T. Takano and K. Sekagawa, *Physica*, **B148** (1987), 462.

EFFECT OF Sc-Cu SUBSTITUTION ON THE ELECTRONIC STRUCTURE OF Y-Ba-Cu-O(123) SYSTEMS

WANG HUAI-YU ZHANG LI-YUAN LIU FU-SUI WANG EN-GE

Department of Physics, Peking University, Beijing, 100871

(Received 5 March 1990)

ABSTRACT

The electronic structures of high T_c superconductors $YBa_2Cu_2ScO_7$, including two cases of Sc substituting Cu1 and Cu2 sites, are studied. Sc-Cu2 replacement has effects on electronic structure of Cu-O layers, which may possibly destroy the high temperature superconductivity. However, our calculations show that it is more likely for Sc to substitute Cu1 site. It is shown that the overlapping splitting between the major bonding partial wave of Sc and its remaining four 3d orbitals is as large as 4eV. Thus one can detect experimentally, by near infrared fluorescence, whether Sc substitute Y or Cu sites in Sc-Y-Ba-Cu-O materials.

PACC: 7120