

**YADRO FIZIKASI INSTITUTI HUZURIDAGI ILMIY DARAJALAR  
BERUVCHI DSc.02/30.12.2019.FM/T.33.01 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

---

**YADRO FIZIKASI INSTITUTI**

**RASHIDOV JAMSHID SHIRINBOYEVICH**

**KUCHSIZ VA KAM LEGIRLANGAN KUPRATLARDAGI  
TIRQISHLARARO POLYARON VA BIPOLYARON HOLATLARNING  
HOSIL BO'LISHI**

**01.04.07 – Kondensirlangan holat fizikasi**

**Fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi  
AVTOREFERATI**

**Toshkent – 2024**

**Fizika-matematika fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi  
avtoreferati mundarijasi**

**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD)  
по физико-математическим наукам**

**Content of the dissertation abstract of the doctor of philosophy (PhD) on  
physical and mathematical sciences**

**Rashidov Jamshid Shirinboyevich**

Kuchsiz va kam legirlangan kupratlarda tirqishlararo polaron va bipolaron  
holatlarning hosil bo‘lishi ..... 3

**Рашидов Жамшид Ширинбоевич**

Образование внутрищелевых поляронных и биполяронных состояний  
в слаболегированных и недолегированных купратах..... 19

**Rashidov Jamshid**

Formation of intragap polaron and bipolaron states in lightly and  
underdoped cuprates ..... 37

**E‘lon qilingan ishlar ro‘uxati**

Список опубликованных работ  
List of published works..... 41

**YADRO FIZIKASI INSTITUTI HUZURIDAGI ILMIY DARAJALAR  
BERUVCHI DSc.02/30.12.2019.FM/T.33.01 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

---

**YADRO FIZIKASI INSTITUTI**

**RASHIDOV JAMSHID SHIRINBOYEVICH**

**KUCHSIZ VA KAM LEGIRLANGAN KUPRATLARDAGI  
TIRQISHLARARO POLYARON VA BIPOLYARON HOLATLARNING  
HOSIL BO'LISHI**

**01.04.07 – Kondensirlangan holat fizikasi**

**Fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi  
AVTOREFERATI**

**Toshkent – 2024**

**Fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida B2024.4.PhD/FM184 raqam bilan ro'yxatga olingan.**

Dissertatsiya O'zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasi Yadro fizikasi institutida bajarilgan.  
Dissertatsiya avtoreferati uch tilda (o'zbek, rus, ingliz (rezyume)) Ilmiy kengash veb-sahifasida (www.inp.uz) va "Ziyonet" axborot-ta'lim tarmog'ida (www.ziyonet.uz) joylashtirilgan.

**Ilmiy rahbar:**

**Djumanov Safarali**

fizika-matematika fanlari doktori, professor

**Rasmiy opponentlar:**

**Rasulov Rustam Yavkatovich**

fizika-matematika fanlari doktori, professor

**Baxramov Sag'dulla Abdullayevich**

fizika-matematika fanlari doktori, professor, akademik

**Yetakchi tashkilot:**

**Buxoro muhandislik-texnologiya instituti**

Dissertatsiya himoyasi Yadro fizikasi instituti huzuridagi DSc.02/30.12.2019.FM/T.33.01 raqamli Ilmiy kengashning 2024-yil \_\_\_\_\_ soat \_\_\_\_ dagi majlisida bo'lib o'tadi (Manzil: 100214, Toshkent shahri, Ulug'bek qo'rg'oni, Yadro fizikasi instituti. Tel.: (+99871) 289-31-41; faks: (+99871) 289-36-65; e-mail: [info@inp.uz](mailto:info@inp.uz)).

Dissertatsiya bilan Yadro fizikasi institutining Axborot-resurs markazida tanishish mumkin (\_\_\_\_\_ raqami bilan ro'yxatga olingan). Manzil: 100214, Toshkent shahri, Ulug'bek qo'rg'oni, Yadro fizikasi instituti. Tel.: (+99871) 289-31-19.

Dissertatsiya avtoreferati 2024-yil "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ da tarqatildi.  
(2024-yil "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ dagi \_\_\_\_ raqamli reyestr bayonnomasi).

**M.Yu.Tashmetov**

Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash  
raisi f.-m.f.d., professor

**O.R.Tojiboyev**

Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash  
ilmiy kotibi, f.-m.f. PhD, katta ilmiy xodim

**E.M.Tursunov**

Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash qoshidagi  
ilmiy seminar raisi, f.-m.f.d., professor

## **KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi annotatsiyasi)**

**Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zaruriyati.** So‘nggi yillarda dunyoda legirlangan kuprat VTSP-materiallarni o‘rganish ularning turli amaliyotlardagi imkoniyatlari sababli katta ilmiy ahamiyatga ega bo‘lib kelmoqda. Ushbu materiallarning yuqori haroratdagi o‘ta o‘tkazuvchanlik mexanizmlari va g‘ayrioddiy elektron xususiyatlarini chuqur tushunish zarurati olib borilayotgan tadqiqotlarning dolzarbligini belgilab beradi. Polyaron va bipolyaron holatlarini o‘rganish teskari oqim (yoki tok) tashuvchilarning tabiati va turlarini, shuningdek, mazkur materiallarning past energiyali elektron tuzilmasini tushuntirish uchun muhim hisoblanadi.

Oxirgi o‘n yillikda kuchsiz- va kam legirlangan kupratlarda polyaron va bipolyaron holatlarning shakllanishini o‘rganish butun dunyo bo‘ylab yetakchi ilmiy markazlarning e‘tiborini o‘ziga oldi. Legirlangan kupratlarning ko‘plab nazariyalari, oddiy yakkaxon elektron zonalarini modellari asosida ishlab chiqilgan bo‘lib, ular kuchli elektron korrelyasiya va elektron-fonon o‘zaro ta’sirlarini inobatga olmagan holda, shuningdek, Mott-Xabbard zonalarini modeliga asoslangan holda, bu materiallarning ko‘plab g‘ayrioddiy elektron xususiyatlarini tasvirlashda katta qiyinchiliklarga duch keldi. Shu munosabat bilan, kuchli kovak-panjara o‘zaro ta’sirlarining ehtimoliy ta’sirlarini o‘rganish, kovaklarning avtolokalizatsiyasi va ularning juftlashtirishga olib keladigan, energiya tirqishi doirasida polyar lokalizatsiya holatlarni va tor polyaron zonalarini shakllantirish imkoniyatini o‘rganish hamda legirlanmagan kupratlarning yangi past energiyali elektron tuzilmalarini tadqiq qilish ularning g‘ayrioddiy dielektrik, metall va yuqori haroratli o‘ta o‘tkazuvchanlik xususiyatlarini tushunish uchun katta ahamiyatga ega.

Hozirgi kunda O‘zbekiston Respublikasida yarim o‘tkazgich va o‘ta o‘tkazgich materialshunosligini rivojlantirishga katta e‘tibor qaratilib, bu borada sezilarli natijalarga erishilmoqda. Bu tadqiqotlar yuqori haroratli o‘ta o‘tkazuvchanlik mexanizmlarini tushunishda muhim ahamiyat ega va zamonaviy elektronika, energetika hamda kvant texnologiyalari sohalarida yaxshilangan xususiyatlarga ega yangi materiallarni yaratish imkonini beradi. O‘zbekistonning yetakchi ilmiy markazlari xalqaro laboratoriyalar bilan faol hamkorlik qilib, tajriba va texnologiyalar almashmoqda, bu esa kupratli o‘ta o‘tkazuvchilar va boshqa istiqbolli materiallar sohasidagi fundamental va qo‘llanma tadqiqotlarni rivojlanishiga hissa qo‘shmoqda.

O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022 yil 28 yanvardagi PF-60-sonli “2022 – 2026 yillarga mo‘ljallangan yangi O‘zbekistonning taraqqiyot Strategiyasi to‘g‘risida” farmoni, 2017-yil 13-fevraldagi PQ-2772-sonli “2017-2021-yillarda elektrotexnika sanoatini rivojlantirishning ustuvor yo‘nalishlari to‘g‘risida”, 2019-yil 21-noyabrdagi PQ-4526 “Yadro fizikasi instituti ilmiy faoliyatini qo‘llab-quvvatlash chora-tadbirlari to‘g‘risida” qarorlarida hamda mazkur faoliyatga tegishli boshqa normativ-huquqiy hujjatlarda belgilangan vazifalarni amalga oshirishga ushbu dissertatsiya muayyan darajada xizmat qiladi.

**Tadqiqotning respublika fan va texnologiyalari rivojlanishining ustuvor yo‘nalishlariga mosligi.** Dissertatsiya ishi O‘zbekiston Respublikasida fan va texnikani rivojlantirishning ustuvor yo‘nalishlariga muvofiq amalga oshirildi: II. “Energetika, energiya- va resurslarni tejash”.

**Muammoning o‘rganilganlik darajasi.** Har xil turdagi qattiq jismlardagi elektronlar yoki kovaklarni avtolokalizatsiya qilishga doir ilmiy ishlar bilan dunyoning ko‘plab mashhur olimlari, shu jumladan, ukrainalik (S.I.Pekar, V.L.Vineskiy, A.S.Davidov, E.A.Pashiskiy, N.I.Kashirina), rossiyalik (L.D.Landau, A.S.Aleksandrov, V.D.Laxno, Ye.P.Pokatilov), germaniyalik (H.Fröhlich va b.), ingliz (N.F.Mott va b.), yaponiyalik (Y.Tozozawa, Y.Takada va b.), amerikalik (Z.Feynman, T.Holstein, D.Emin va b.), polshalik (G.Adamovsky va b.), belgiyalik (J.E.DeVries, G.J. Verbiest, F.M.Peeters va b.) va o‘zbekistonlik (B.L. Oksengendler, P.K. Xabibullaev, F.Dj.Baymatov, S.Djumanov, U.T.Kurbanov, E.X.Karimbaev, Sh.S.Djumanov va b.) olimlar tomonidan o‘rganilgan.

Ular ishqoriy metall oksidlarida, shuningdek tartibsiz yoki amorf qattiq jismlarda elektronlarning lokalizatsiyasi va delokalizatsiyasi masalalarini ko‘rib chiqdilar (A.Wilson, N.F.Mott, F.Wigner, R.Peierls, Ph.W.Anderson va J. Hubbard). Olimlar kuchli elektron korrelyatsiya kontseptsiyasiga asoslanib, elektronlarning lokalizatsiya holatidan delokalizatsiyalangan holatiga o‘tishini, shuningdek, dielektriklar va yarimo‘tkazgichlarning noodatiy tarmoqli tuzilishini tushuntirishga harakat qilishdi. Elektron gazning kristallanish aspektlari, bir o‘lchovli kristall panjaraning buzilishi, panjara tabiatining ikki baravar oshishi va kristall panjaraning tartibsizligi ko‘rib chiqildi. Ushbu murakkab materiallardagi zaryad tashuvchilarning tabiati va turlarini va ularning elektron tuzilmalarining o‘ziga xos xususiyatlarini aniqlash uchun nazariy va eksperimental tadqiqotlar o‘tkazildi (Ph.W.Anderson, K.A.Müller, A.S.Aleksandrov, B. Chakraverty, J. Ranninger, N.F.Mott, B.J.Emery, G.Lorentz, D.Emin, J.T.DeVries, H.H.Bi, D.Mixaylovik, S.Sigay, D.Pines, B.Lu, A.Bianconi, V.F. Gantmaxer, M.Imada, G.Baskaran va b.).

Ushbu tadqiqotlar polyaron va bipolyaron holatlarni o‘rganishga zamonaviy yondashuvlar asosini yaratdi, bugungi kunda ular o‘tish metallar oksidlarida, jumladan, kupratlarda qo‘llanilmoqda. Kovakli YTO‘O‘ kupratlarining elektron xossalari, ulardagi tok tashuvchilarning asl tabiati va tiplari, past energiyali elektron tuzilishlari to‘g‘risida ko‘plab nazariy va eksperimental tadqiqotlarga qaramay, yetarli darajada o‘rganilmagan. Xususan, YTO‘O‘ materiallarida katta yoki kichik radiusli avtolokalizatsiyalangan qutbli holatlarining hosil bo‘lishni legirlash darajasiga bog‘liqligini miqdoriy aniqlash, ularning fizik parametrlariga (masalan, dielektrik sindruchchanlik) qarab bipolaron holatlarning paydo bo‘lishiga oid muammolar yetarli darajada o‘rganilmagan. Bundan tashqari, kuprat materiallarining zaryad tashuvchilarini energiya tirqishi ichidagi lokalizatsiyalangan elektron holatlarning tabiati va kelib chiqish sabablari muzokarali va noma’lum bo‘lib qolmoqda.

**Dissertatsiya tadqiqotining dissertatsiya bajarilgan ilmiy-tadqiqot muassasasining ilmiy tadqiqot ishlari rejalari bilan bog'liqligi.** Dissertatsiya tadqiqoti O'zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Yadro fizikasi instituti ilmiy ilmiy tadqiqot ishlari rejasining OT- F2-15 "Yangi o'ta o'tkazuvchanlik va o'ta oquvchanlik xossalarning yuqori haroratli o'ta o'tkazgichlar va ularga turdosh kondensatsiyalangan tizimlarning nazariy tadqiqotlari" (2017-2021) mavzusidagi loyihasi doirasida bajarilgan.

**Tadqiqotning maqsadi** kuchsiz legirlangan ( $0,02 < x < 0,05$ ) kupratlarda (bi) polyaron holatlarining hosil bo'lish imkoniyatlarini aniqlashtirish va ushbu materiallarning quyi energetik tuzilishini aniqlash hamda kuchsiz ( $0,02 < x < 0,05$ ) va kam ( $0,05 < x < 0,125$ ) legirlangan kupratlarda tirqishli lokallashgan holatlarni hamda ingichka energetik zonalar hosil bo'lish sababini o'rganishdan iborat.

**Tadqiqotning vazifalari:**

kuchsiz ligirlangan kupratlardagi kuchli kovakli panjara o'zaro ta'sirida kovakli tashuvchilarning bir zarrachali va ikki zarachali avtolokallashish imkoniyatini o'rganish;

kuchsiz ligirlangan kupratlarda kovakli katta polyaron va bipolyaron hosil bo'lish imkoniyatini aniqlash;

kuchsiz ligirlangan kupratlarda avtolokallashgan kovakning asosiy holat energiyasini hisoblash;

kuchsiz ligirlangan kupratlardagi past energiyali elektron tuzilishlar taqiqlangan zonada polyaron va bipolyaron holatlarning paydo bo'lish imkoniyatini aniqlash;

kam ligirlangan kupratlarda tartiblangan polyaron tashuvchilar turlarining ichki tirqishli polyaron zonasining hosil bo'lish imkoniyatini o'rganish.

**Tadqiqotning obyektini** kuchsiz legirlangan kupratlar  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  (LSCO) va  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  (YBCO), kam legirlangan YHO'O' kupratlar LSCO va YBCO tashkil etadi.

**Tadqiqotning predmetini** kovakli tok tashuvchilarning avtolokalizatsiya jarayonlari va kuchsiz legirlangan kupratlarda polyaron hamda bipolyaron holatlarini shakllantirish va kuchsiz hamda kam legirlangan YHO'O' kupratlarida yangi past energiyali elektron tuzilishlarning shakllanishi tashkil etadi.

**Tadqiqotning usullari:** variatsion usullar, avtolokalizatsiyalangan kovakli tashuvchilarni adiabatik yaqinlashuvi va kontinual modelidan foydalanish, kuchli ta'sirlashuv metodi, kompyuter grafikasi (Mathematica).

**Tadqiqotning ilmiy yangiliklari** quyidagilardan iborat:

kontinual model va adiabatik yaqinlashish usulidan foydalanib kuchsiz legirlangan kupratlarda katta kovakli polaronlar hamda bipolaronlar hosil bo'lishining miqdoriy nazariyasi takomillashtirilgan va bunday (bi)polaronlarning asosiy holat energiyalari hamda bog'lanish energiyalari hisoblangan;

kam legirlangan kupratlarda ichki energetik tirqishlardagi zaryad tashuvchilarda hosil bo'luvchi katta (bi)polyaronlarning kuchli bog'langan energetik holatlari hamda katta kovakli polyaronlarning radiuslari aniqlangan;

birinchi marta kuchsiz legirlangan kupratlarda polyaron va bipolyaron holatlari kislorodning yuqori valent zonalarida ichki energetik tirqishlar borligi hamda polyaron zonalarining tor ichki tirqishlari ko'rsatilgan;

kuchsiz va kam legirlangan kupratlarda quyi energetik elektron tuzilishlar legirlanmagan kupratlarning yuqori energetik elektron tuzilishidan faqlanishi ko'rsatilgan.

**Tadqiqotning amaliy natijalari** quyidagilardan iborat:

kuchsiz va kam legirlangan kupratlarning quyi energiyali elektron strukturasi yuqori energiyali elektron strukturadan farq qiluvchi o'ziga xos xususiyatlarini yetarli darajada tavsiflaydigan yangi yondashuv ishlab chiqilgan.

**Tadqiqot natijalarining ishonchliligi** isbotlangan matematik usullar va nazariy yondashuvlar, masalan, variatsion usullar, kuchsiz legirlangan kupratlarda kovakli tashuvchilarni avtolokalizatsiyasini tavsiflash uchun qattiq jismning kontinual modeli va kuchli ta'sirlashuv usulidan foydalanish, shuningdek, olingan natijalarning mavjud eksperimental ma'lumotlar bilan mosligi bilan tasdiqlanadi.

**Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati.** Natijalarning ilmiy ahamiyati shundan iboratki, ular legirlangan qattiq jismlardagi lokalizatsiyalangan elektron holatlar va legirlangan yarimo'tkazgich hamda dielektriklarning zonali nazariyalari to'g'risida fizik tushunchalarni kengaytirishga yordam beradi.

Natijalarning amaliy ahamiyati yaxshilangan elektron xususiyatlarga ega yangi oksidli YHO'O' materiallarini yaratishning mumkin bo'lgan usullarini, xususan, o'ta o'tkazuvchanlik o'tishning yuqori kritik haroratlarini  $T_c$  bashorat qilish imkonini beradi.

**Tadqiqot natijalarining joriy qilinishi.** Legirlangan kuprat materiallarida tirqishlararo elektron holatlarini o'rganish natijasida olingan natijalarga asoslanib:

kuchsiz legirlangan kupratlarda katta kovakli polyaronlar va bipolyaronlar hosil bo'lishi, asosiy va qutblarining energiyalari, shuningdek, katta kovakli polyaron va bipolonlarning energiya zonalarini ishlab chiqilgan miqdoriy nazariya asosida hisoblangan. Olingan ilmiy natijalar Namangan muhandislik-qurilish institutida FZ-20200929243 "Kuchli elektromagnit maydonda qizdirilgan elektronlar va fononlarning yarimo'tkazgichli quyosh xususiyatlariga ta'siri" ilmiy-tadqiqot loyihasi doirasida qo'llanilgan (2022-2026) (Namangan muhandislik-qurilish institutining 30.09.2024 yildagi № 06/10-09/1129 xati). Natijalardan foydalanish kompozit materiallarda, shuningdek, keng ko'lamlilovalar uchun yangi materiallar yaratish uchun nanomateriallarni ishlab chiqish va tadqiq qilishda turli xil elektron jarayonlarni tushuntirishga imkon berdi.

**Tadqiqot natijalarining aprobatsiyasi.** O'rganilgan natijalar 5 ta xalqaro va respublika miqyosida o'tkazilgan ilmiy-amaliy anjumanlarda ma'ruza qilingan hamda muhokamadan o'tkazilgan.

**Tadqiqot natijalarining e'lon qilinganligi.** Dissertatsiya mavzusi bo'yicha 8 ta ilmiy ish, shu jumladan, doktorlik dissertatsiyalarining asosiy ilmiy natijalarini Oliy attestatsiya komissiyasi tomonidan tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda 3 ta maqola, shundan, 1 tasi xorijiy ilmiy jurnalda chop etilgan.

**Dissertatsiyaning tuzilishi va hajmi.** Dissertatsiya kirish, uch bob, xulosa va foydalanilgan adabiyotlar ro'yxatidan iborat. Dissertatsiya hajmi 83 betni tashkil etadi.

## DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

**Kirish** qismida o'tkazilgan tadqiqotlarning dolzarbligi va zarurati asoslangan, tadqiqotning maqsadi va vazifalari, obykti va predmetlari hamda usullari tavsiflangan, O'zbekiston Respublikasining fan va texnologiyalari rivojlanishining ustuvor yo'nalishlariga mosligi ko'rsatilgan, tadqiqotning ilmiy yangiligi va amaliy natijalari bayon qilingan, olingan natijalarning ilmiy va amaliy ahamiyati ochib berilgan, tadqiqot natijalarini amaliyotga joriy qilish, nashr etilgan ishlar va dissertatsiya tuzilishi bo'yicha ma'lumotlar keltirilgan.

Dissertatsiyaning **“Legirlanmagan mis-oksidi (kuprat) birikmalarining elektron tuzilishi”** nomli birinchi bobida legirlangan kuprat birikmalarining tuzilishi sohasidagi nazariy tadqiqotlar holati haqida umumiy ma'lumot berilgan. Legirlangan va legirlanmagan kupratlarning elektron tuzilishlari to'g'risidagi nashr etilgan eksperimental va nazariy ishlarni tahlil qilib, nazariy ishlarda legirlanmagan kupratlarning elektron tuzilishining nazariyasi ko'p hollarda bir yoki uch zonali Hubbard modeli doirasida tushuntirish legirlangan kupratlarda asossiz ravishda qo'llanilgan.

Adabiyotlardagi ma'lumotlarni tahlil qilish shuni ko'rsatadiki, so'nggi o'n yilliklarda legirlangan kuprat materiallarining g'ayrioddiy elektron xususiyatlarini tushunishda ma'lum yutuqlarga erishilganiga qaramay, kuchsiz va kam legirlangan kupratlardagi elektron tuzilishlar to'g'risidagi asosiy muammolar hal etilmaganligicha qolmoqda, chunki ularni aniqlash uchun turli nazariy modellar taklif qilingan. Ularning legirlangan kupratlar uchun qo'llanilishi isbotlanmagan. Xususan, kupratlarda kuchli elektron korrelyatsiya ularning elektron tuzilishi bilan belgilanadi. Bundan farqli o'laroq, legirlangan kupratlarda elektron korrelyatsiya ta'siri ahamiyatsiz bo'lib qoladi va kuchli kovak-panjara o'zaro ta'siri lokalizatsiyalangan elektronlar yoki kovaklarning delokalizatsiyalangan holatini o'zgartirishda dominant bo'lishi mumkin.

Eksperimental natijalar shuni ko'rsatadiki, kovakli legirlangan kupratlarda, yangi kovak, asosan, kislorodning  $2p$  orbitallarida paydo bo'ladi. Kupratlarning dielektrik holatini (yoki yuqori energiyali elektron tuzilishini) tavsiflovchi bir va uch diapazonli Hubbard modellida elektron – kovak holat kislorodning yuqori valent zonasida kuzatilib, Hubbartning yuqori va pastki zonalar orasida joylashgan. Legirlanmagan kupratlarning dielektrik holatini (yoki yuqori energiyali elektron tuzilishini) tavsiflovchi bir va uch zonali Hubbard modeli, past energiyali elektron tuzilishini o'rganish uchun qo'llanilmaydi. Legirlangan kupratlarning kristall panjara ichiga kovakli zaryad tashuvchilarni kiritish, delokalizatsiya jarayoni, xuddi yarimo'tkazgichlarni (masalan, Si va Ge) legirlash kabidir.

Kupratlar legirlanganda yangi elektron holatlar paydo bo'ladi. Bunday holatlar tirqishlararo  $\Delta_{cp}$  holatlar deb ataladi. Ushbu tirqishlararo elektron holatlar

pastki va yuqori Hubbard zonalarini o'rtasida joylashgan yuqori kislorod zonasidan yuqorida joylashgan, ya'ni bu yangi elektron holatlar kislorod valentlik zonasi va yuqori Hubbard zonasi o'rtasida paydo bo'ladi. Kupratlarni kovakli legirlashda kislorod valentlik zonasining  $\Delta_{CT}$  energiya zonadagi tirqishlararo holatlarining kelib chiqishi va taqsimlanishi, shuningdek, bu energiya tirqishdagi legirlangan kupratlarning Fermi energetik holati  $E_F$  ning o'rnini va Fermi energetik holatini yuqoriga siljishi to'g'risida turli xil qarashlar mavjud. Legirlangan kupratlardagi bunday tirqishlararo elektron holatlarning tabiati hali to'liq o'rganilmagan va tushuntirilmagan.

Dissertatsiyaning **“Kuchsiz legirlangan kupratlarda katta polyaronlar va bipolyaronlar hosil bo'lishi”** nomli ikkinchi bobida kuchli bog'langan katta o'lchamli polyaron va bipolyaronlarni hosil bo'lishi hamda elektron (kovak)-fononlarning o'zaro ta'sirini tavsiflashga bag'ishlangan. Ko'plab nazariy modellarda, qutbli kuprat materiallarning bunday muhim ta'sirlashuvi e'tiborsiz qoldiradi. Darhaqiqat, atomlar kristall panjarani tebranishlari maydonining davriyligini buzilishlarni keltirib chiqaradi va legirlangan ion kristalli moddalarda elektron (yoki kovak) zaryad tashuvchilarning holatiga sezilarli ta'sir ko'rsatadi. Kovakli legirlangan kuprat materiallarda kuchli kovak – panjara o'zaro ta'siri natijasida kovaklarning avtolokalizatsiyalanish holati paydo bo'lishi mumkin, bu polyaron holati deb ataladi. Umuman qattiq jismlar fizikasi, ayniqsa, legirlangan oksidli YHO'O'lar fizikasida, xususan, kuchli bog'langan polyaron va bipolyaronlarni o'rganish katta qiziqish uyg'otadi, chunki oksidli materiallarda bipolyaronlarni hosil bo'lishi diqqat markaziga bo'lgan, bu, o'z navbatida, yuqori haroratli o'ta o'tkazuvchanlikni kashf qilishga olib keldi. Ushbu qutbli materiallardagi kuchli bipolaronlar, legirlash jarayonida kiritilgan kovak kristallning ion panjarasini qutblanishi natijasida hosil bo'ladi. Kristallning bunday qutblanishi kovak energiyasining pasayishiga olib keladi, ya'ni tuynuk joylashgan hududda potensial yashiklarning shakllanishiga olib keladi, natijada kovaklarni tutilishiga sabab bo'ladi. Kovaklar yoki polyaron kvazizarralarning bunday o'z-o'zidan avtolokalizatsiyalanishi kristall bo'ylab harakatlanishi mumkin va harakatlanuvchi kovak o'zi bilan polarizatsiya yoki deformatsiya qobig'ini olib yuradi (deformatsiyalar u bilan birga harakat qiladi). Agar polyaronning o'lchamlari panjara doimiysidan  $a_0$  dan oshsa, u holda ion kristalini uzluksiz muhit (kontinuum) deb tavsiflash mumkin. Katta radiusli ion kristallda, polyaronlar hosil bo'lishini ko'rsatish uchun Shredinger tenglamasidagi kristallning davriy potentsiali  $V(r)$  inobatga olmasak ham bo'ladi, bir vaqtning o'zida erkin kovak massasini uning effektiv massasi  $m^*$  bilan almashtiradi. Bunday holda Schrodinger tenglamasining yechimi adiabatik yaqinlashuvli variatsion prinsipdan foydalanish qulayroqdir, ya'ni kovakni to'liq funksiyasi  $-\Psi(r)$ , panjaraning deformatsiyasi- $\Delta(r)$  hamda panjaraning qutblanish potentsiali  $-\varphi(r)$ ga qarab kovakli fonon ta'sirlashuvlarini umumiy energiya funksional  $E\{\Psi, \Delta, \varphi\}$ ni yozish mumkin. Buni faqat kovakning to'liq funksiyasining umumiy shaklini bilgan hollarda amalga oshirish mumkin. Ion kristallida polyaron holatlarning kovak-fonon o'zaro

ta'sirlashuvning tizimining umumiy energiya funksionali, kontinual model va adiabatik yaqinlashish orqali quyidagi tavsiflanadi:

$$E_p \{ \psi, \Delta, \varphi \} = \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m^*} (\nabla \psi(\vec{r}))^2 + \frac{1}{2} K \Delta^2(\vec{r}) + E_d \psi^2(\vec{r}) \Delta(\vec{r}) - e \psi^2(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) + \frac{\tilde{\epsilon}}{8\pi} (\nabla \varphi(\vec{r}))^2 \right] d^3 r, \quad (1)$$

bunda  $K$  – panjaraning elastiklik koeffitsiyenti,  $E_d$  – kovakli zaryad tashuvchining deformatsion potentsiali,  $\tilde{\epsilon} = \epsilon_\infty / (1 - \eta)$  – effektiv dielektrik singdruvchanlik,  $\eta = \epsilon_\infty / \epsilon_0$ ,  $\epsilon_\infty$  va  $\epsilon_0$  – mos holda yuqori chastotali va statik dielektrik singdruvchanlik.

Keyinchalik, kupratli ion kristalida bipolyaronlarni hosil bo'lishini tavsiflovchi ikki kovak-panjara o'zaro ta'sir tizimining umumiy energiya funksionalni, xuddi kovaklar orasidagi Kulon o'zaro ta'sirini hisobga olgan holda ifodalash mumkin. Bunday funksional  $E\{\Psi, \Delta, \varphi\}$  ikki kovakning to'liq funksiyasidan bog'liq bo'ladi.  $E\{\Psi, \Delta, \varphi\}$  funksionalni,  $\Delta(r)$  va  $\varphi(r)$  larga nisbatan minimizatsiyalagandan so'ng funksional faqat  $\Psi(r)$  ga bog'liq bo'lgan va uch o'lchovli (3D) ionli kristalda avtolokalizatsiyalangan (polyaron) holat hosil bo'lishini tavsiflovchi funksionalni quyidagicha yozish mumkin:

$$E_p \{ \psi \} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \int (\Delta \psi(\vec{r}))^2 d^3 r - \frac{E_d^2}{2K} \int \psi^4(\vec{r}) d^3 r - \frac{e^2}{2\tilde{\epsilon}} \iint \frac{\psi^2(\vec{r}) \psi^2(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r d^3 r' \quad (2)$$

$\psi(r)$  funksionalni minimallashtirish (2) legirlangan kupratlardagi kovakli polyaronining asosiy holatining energiyasini beradi. Ushbu funksionalni ekstremumini topish uchun tanlanma to'liq funksiyasini oddiy shaklda tanlash mumkin

$$\psi(\vec{r}) = N_1 \exp(-\sigma \vec{r}), \quad (3)$$

bunda  $N_1 = \sigma^{3/2} / \sqrt{\pi}$  – normirovka koeffitsiyenti,  $\sigma = \beta / a_0$ ,  $\beta$  – variatsiya parametri,  $a_0$  – kristall panjara parametri.

(3) tenglamani funksional (2) ga qo'yib, (2) integrallarni hisoblab, quyidagi funktsionallikni olamiz:

$$E_p(\beta) = A \left[ \beta^2 - g_s \beta^3 - g_l (1 - \eta) \beta \right], \quad (4)$$

bunda  $A = \hbar^2 / 2m^* a_0^2$ ,  $g_s = E_d^2 / 16\pi k a_0^3 A$  va  $g_l = 5e^2 / 16\epsilon_\infty a_0 A$  mos ravishda qisqa va uzoq masofali kovak-fonon ta'sirlashuv konstantalari.

Endi (4) funktsionalni  $\beta$  ga nisbatan minimallashtirish orqali biz avtolokalizatsiyalangan kovakli tashuvchining (kovak polaroni) asosiy holatining energiyasini aniqlaymiz, doplangan kupratlarda kislorod valentlik zonasining

yuqori holatiga nisbatan o'lanadi. Bunday polyaronning bog'lanish energiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$E_p = |E_p(\beta_{min})| \quad (5)$$

bunda  $\beta_{min} = \left[ 1 - \sqrt{1 - 3g_s g_l (1 - \eta)} \right] / 3g_s$ ,

Polyaronning o'rtacha o'lchamini (radiusi) quyidagi ifodadan aniqlanadi:

$$R_p = \int r \psi^2(r) d^3(r), \quad (6)$$

bundan quyidagini topamiz

$$R_p = \frac{9g_s}{2 \left[ 1 - \sqrt{1 - 3g_s g_l (1 - \eta)} \right]} a_0, \quad (7)$$

$E\{\Psi, \Delta, \varphi\}$  funksionalni,  $\Delta(r)$  va  $\varphi(r)$  larga nisbatan minimizatsiyalagandan so'ng funksional faqat  $\Psi(r_1, r_2)$  ga bog'liq hamda legirlangan kupratlarda bipolyaron holatlarni hosil bo'lishini tavsiflaydi.  $\Psi(r_1, r_2)$  funksiyani quyidagicha tanlash mumkin:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N_2 \left[ 1 + \gamma \sigma |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \right] \exp \left[ -\sigma (\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \right], \quad (8)$$

bunda  $N_2 = \sigma^3 / \pi \sqrt{C_1(\gamma)}$ ,  $\gamma$  – normirovka koeffitsiyenti,  $C_1(\gamma)$  – variatsion parametr ga  $\gamma$  bog'liq koeffitsiyent.

Shunday qilib,  $\beta$  va  $\gamma$  variatsion parametrlarga bog'liq bipolyaronlarni asosiy holatining umumiy funksionali  $E\{\psi, \Delta, \varphi\}$ . Katta bipolyaronlarning bog'lanish energiyasi quyidagicha topiladi:

$$E_{bB} = |E_B(\beta_{min}, \gamma_{min}) - 2E_p(\beta_{min})| \quad (9)$$

Biz ilmiy ishimizda kuchsiz legirlangan kupratlardagi katta polyaronlar va bipolyaronlarning asosiy parametrlarini hisoblab chiqdik. Hisoblangan natijalar 1 va 2-jadvallarda keltirilgan.

1-jadval

$\varepsilon_\infty$  va  $\eta$  ning turli qiymatlarida kuchsiz legirlangan 3D katta kupratlarda kuchli polyaronli ta'sirlashuv parametrlarining hisoblangan qiymatlari

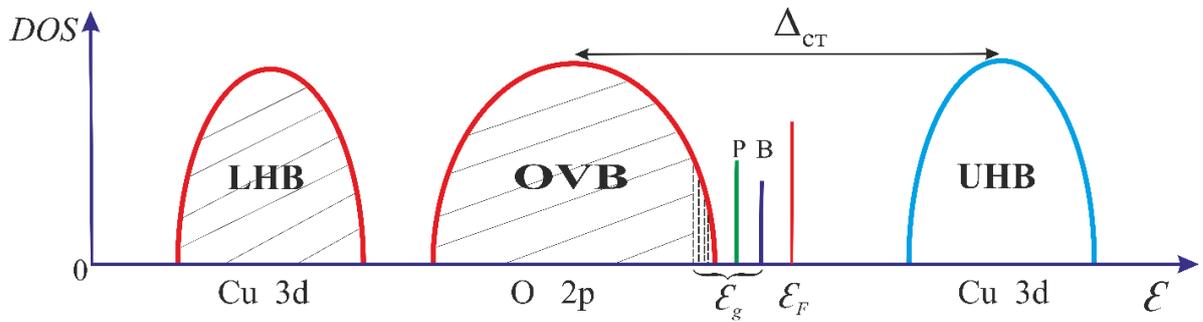
$\eta$	$\varepsilon_\infty = 2,5$		$\varepsilon_\infty = 3$		$\varepsilon_\infty = 3,5$	
	$E_p, eV$	$R_p, \text{Å}$	$E_p, eV$	$R_p, \text{Å}$	$E_p, eV$	$R_p, \text{Å}$
0,00	0,219	6,059	0,151	7,335	0,111	8,610
0,02	0,210	6,189	0,145	7,491	0,106	8,792
0,04	0,201	6,325	0,139	7,634	0,102	9,981
0,06	0,193	6,466	0,133	7,823	0,098	9,179
0,08	0,185	6,614	0,128	8,000	0,093	9,385
0,10	0,177	6,768	0,122	0,185	0,089	9,601
0,12	0,169	6,929	0,117	8,378	0,085	9,826
0,14	0,161	7,097	0,111	8,580	0,081	10,062

2-jadval

$\varepsilon_\infty$  va  $\eta$  ning turli qiymatlarida kuchsiz legirlangan 3D kupratlarda kuchli bipolyaronli ta'sirlashuv parametrlarining hisoblangan qiymatlari

$\eta$	$\varepsilon_\infty = 2,5$		$\varepsilon_\infty = 3$		$\varepsilon_\infty = 3,5$	
	$E_B(\beta_{\min}, \gamma_{\min})$	$E_{bB}$	$E_B(\beta_{\min}, \gamma_{\min})$	$E_{bB}$	$E_B(\beta_{\min}, \gamma_{\min})$	$E_{bB}$
0,00	-0,558	0,120	-0,383	0,081	-0,280	0,058
0,02	-0,520	0,100	-0,357	0,067	-0,260	0,048
0,04	-0,483	0,081	-0,332	0,054	-0,243	0,039
0,06	-0,449	0,063	-0,308	0,042	-0,226	0,030
0,08	-0,416	0,046	-0,287	0,031	-0,208	0,022
0,10	-0,384	0,030	-0,264	0,020	-0,192	0,014
0,12	-0,353	0,015	-0,244	0,010	-0,177	0,007
0,14	-0,324	0,002	-0,223	0,001	-0,162	—

Dissertatsiyaning “**Kuchsiz va kam legirlangan kupratlarning tirqishlararo past energiyali elektron tuzilishlari**” nomli uchinchi bobida kuchsiz legirlangan kupratlardagi tirqishlararo holatlarini tavsiflaydi. Biz taklif qilayotgan kam legirlangan kupratlarning past energiyali yangi elektron tuzilishi 1-rasmda ko‘rsatilgan.



**1-rasm. Kuchsiz legirlangan kupratlarning yangi past energiyali elektron tuzilishi. Uzuq chiziqlar kislorod valentlik zonasidagi erkin kovakli holatlarini, DOS zichligini ko'rsatilgan**

Katta polaronlar va bipolonlarning kuchsiz hamda kam legirlangan kupratlardagi bog'lanish energiyasi ularning uyg'onish spektrlarida o'zini namoyon qiladi, kichik energiyali tirqishlar  $\varepsilon_g = E_{bB}$  va  $\varepsilon_g = E_p$  bo'lib, legirlash darajasi haroratga deyarli bog'liq emas. Bunday tirqishli xususiyatlari aslida kuchsiz legirlangan 3D kupratlarda eksperimental kuzatiladi. Bunday holda, legirlanmagan kupratlarning zaryad tashuvchilari energetik tirqishlar hosil qilib polyaron va bipolyaron holatlar bilan to'ldiriladi. Legirlangan kupratlardagi 2D klasterlarning dastlabki hisoblari Lorensian asosida va Hubbard modelidan foydalangan holda amalga oshirilgan, bu kupratlarning zaryad tashuvchilarni energiya  $\Delta_{CT}$  tirqishi chuqur (bi) polyaron holatlar bilan to'ldirilganligini ta'kidlaymiz. 1 va 2-jadvallardan hamda 1-rasmdan ko'rinib turibdiki, kupratlar 3D legirlanganda, chuqurroq bo'lmagan tirqishlararo polyaronik va bipolaronik holatlar hosil bo'ladi.

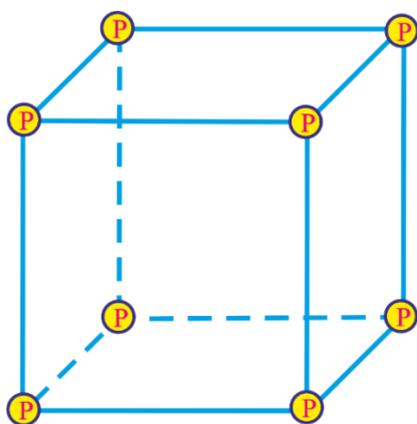
Bizning hisob-kitoblarimiz shuni ko'rsatadiki, polyaron va bipolyaron holatlar qo'llanilmagan kupratlarning zaryad tashuvchilari energiya tirqishlarini hosil qiladi hamda turli tajribalarda kuzatilganidek, kam legirlash darajasida avtolokalizatsiyalangan tirqishlararo holatlari sifatida namoyon bo'ladi.

Katta polyaron hamda bipolyaronlarning xarakterli bog'lanish energiyalari  $E_p \approx (0,1 \div 0,2)$  eV va  $E_{bB} \approx (0,03 \div 0,10)$  eV (1 va 2 jadvallarda qarang) kovakli legirlangan kupratlarning uyg'onish spektrlarida energiya tirqishlaridan farqli legirlanmagan kupratlarga nisbatan past energiya tirqishlari sifatida paydo bo'lishi kerak.  $\Delta_{CT} \approx (1,5 \div 2,0)$  eV. Haqiqatdan,  $E_{bB}$ , qiymati 2-jadvalda keltirilgan  $\varepsilon_\infty = (2,5 \div 3,5)$  va  $\eta = 0,06$ , bu materiallarning uyg'onish spektrlarida energiya tirqishlarining qiymati eksperimentda kuzatilgan qiymatga  $\varepsilon_g \approx (0,03 \div 0,06)$  eV yaqin.

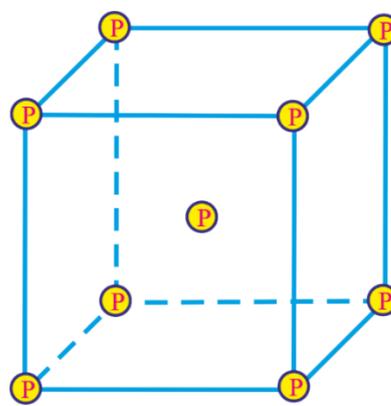
Katta bipolyaronlarning bog'lanish energiyalari  $E_{bB} \approx (0,01 \div 0,04)$  eV, bizlar hisoblangan  $\varepsilon_\infty = 3$  va  $\eta = (0,06 \div 0,14)$ , qiymatlari kuzatilgan yutilish spektridagi qiymatlar bilan mos tushmoqda YHO'O' ( $0,013 \div 0,039$ ) eV. Boshqa eksperimental kuzatishlar shuni ko'rsatadiki, avtolokalizatsiyalangan tirqishlararo

holatlar kuchsiz legirlangan kuprat materialida yarim o'tkazgich tirqish qiymatlari bilan deyarli mos tushadi LSCO ( $x=0,02$ ), kuzatilgan energiya tirqish qiymati 0,04 eV va deyarli to 160 K gacha temperaturaga bog'liq emas. Ushbu energiya tirqishlar qiymatlari katta bipolyaronlar bog'lanish energiyasiga yaqin va 2-jadvalda keltirilgan  $\varepsilon_\infty=3$  va  $\eta=0,06$ . Bundan tashqari, turli tajribalarda legirlangan kupratlarning uyg'onish spektridagi energiya qiymati kichik tirqishlarning energiya shkalalaridagi (0,08÷0,15) eV energiya qiymati bilan mos tushadi, katta polaronlarning bog'lanish energiyasi  $E_p \approx (0,08 \div 0,15)$  eV bunda  $\varepsilon_\infty=(2,5 \div 3,5)$  va  $\eta \approx (0,01 \div 0,14)$ . Shunday qilib, biz kuchsiz legirlangan kupratlar yangi past energiyali elektron tuzilishga ega ekanligini ko'rsatdik (dielektrik tirqishlari bilan  $\varepsilon_g \approx (0,1 \div 0,2)$  eV). Ushbu materiallarning past energiyali uyg'onishlari bo'yicha mavjud eksperimental natijalar bilan mos keladi va legirlanmagan kupratlarning yuqori energiyali elektron tuzilishidan sezilarli darajada farq qiladi (dielektrik bo'shliqlar bilan  $\Delta_{CT} \approx (1,5 \div 2,0)$  eV).

Kupratlarning legirlash darajasi ularning kam legirlash rejimiga qarab oshirilganda, polaron tashuvchilarning o'ziga xos tartiblari ularning turli ust panjaralarini hosil qilishi yuzaga keladi (2, 3, 4-rasmlarga qarang) va 1-rasmda ko'rsatilgan polaronlarning energiya darajasi tirqish  $\Delta_{CT}$  doiraga aylanadi. Bunday tirqishlararo polaron diapazoni kupratning legirlash darajasini oshishi bilan asta-sekin kengayadi va kislorod valentlik zonasining yuqori qismiga tutashgan bo'ladi.



**2-rasm. Kam legirlangan kupratlarda katta polaronlarning oddiy kubik ust panjarasi (P)**



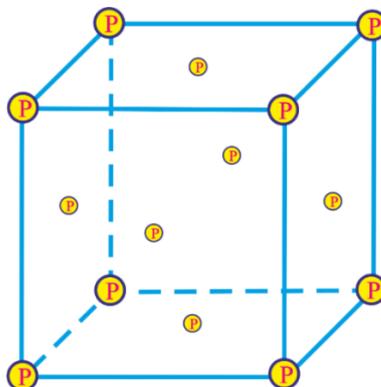
**3-rasm. Kam legirlangan kupratlarda katta polaronlarning hajmi markazlashgan kubik ust panjarasi (P)**

Kuchli bog'lanishning yaqinlashuvida, kam legirlangan YHO'O' kupratlarda katta polaronlarning energiya kengligi energetik zona kengligiga o'xshash hamda quyidagi ifodadan aniqlanishi mumkin.

$$W_p = 2zJ_p \quad (10)$$

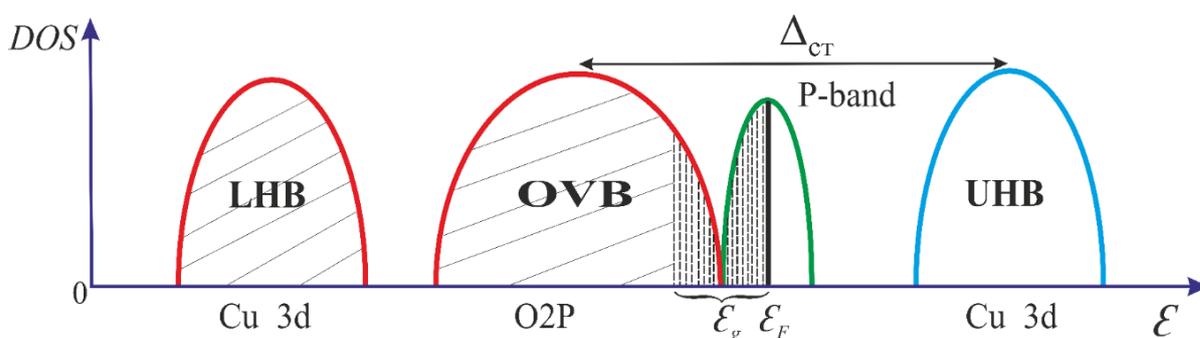
bu yerda  $J_p = \hbar^2/2m_p a_p^2$  – polaron ust panjarasining eng yaqin joylari orasidagi sakrashli integral,  $m_p$  – polaron tashuvchilarning effektiv massasi.

5-rasmda legirlanmagan kupratlarning yangi past energiyali elektron tuzilishi ko‘rsatilgan. To‘liq qo‘llanilmagan kupratlarning ushbu elektron tuzilishining eng yorqin xususiyatlari ( $0,05 < x < 0,125$ ).



**4-rasm. Kam legirlangan kupratlarda katta polaronlarning yoqasi markazlashtirilgan kubik ust panjarasi (P)**

Haqiqatan ham, eksperimental natijalar shuni ko‘rsatadiki, zaryad tashuvchilar kam legirlangan YHO‘O‘ kupratlarda tirqishlararo tor energiyali polaron zonasini hosil qiladi  $\Delta_{CT}$  va bunday holatlar kam legirlangan kupratlarda kuzatilgan infraqizil spektr bilan chambarchas bog‘liq. Xususan, eksperimental ma‘lumotlarga va bizning natijalarimizga ko‘ra, o‘rta infraqizil (O‘IQ) xususiyati lokalizatsiyalashgan kovakli tashuvchilari va ularning polaron diapazoni kislorod valentlik zonasining yuqori qismiga joylashgan (5-rasmga qarang), kam legirlangan kupratlarning (O‘IQ) uyg‘onish spektrida kuzatiladi. Kam legirlangan kupratlarda kuzatilgan bu xarakterli (O‘IQ) xususiyati ko‘plab tadqiqotchilarni YBCO ning (O‘IQ) va Raman spektrlarini polaronli talqin qilishga olib keldi. Biz taklif qilayotgan kam legirlangan kupratlarning past energiyali tuzilishiga ko‘ra, SIR yutilish spektrlari va Raman spektrlari katta polaronlarning uyg‘onishlari bilan bog‘liq bo‘lib, ular zaryad tashuvchi energiya tirqishi kislorodning valent zonasi orasida joylashgan teshiklar tor energiya zonasidan kelib chiqadi va kvazi-erkin delokalizatsiyalangan holatlarga aylanadi. Bundan tashqari, LSCO kuprat materialidagi tirqishlararo zona energiya 0,13 eV da kuzatiladi, bizning fikrimizcha, energiya zonasidagi polaronlar aslida katta polaronlar bo‘lgan. Agar  $\epsilon_\infty = 3$  va  $\eta = 0,07$  LSCO, uchun quyidagini hosil qilamiz  $E_p \approx 0,13$  eV (1-jadvalda qarang), bu eksperimentdagi kuzatishlar bilan mos keladi. Energiya tirqishidagi  $\Delta_{CT}$  polaron polosasi kengayganida, bu tirqishning o‘rtasida joylashgan qo‘shimcha kupratlardagi Fermi zonasi, kam legirlangan kupratlardagi kengaytirilgan polaron zonasiga o‘tadi, 5-rasmga ko‘rsatilganidek.



**5-rasm. Kam legirlangan kupratlarning yangi past energiyali elektron tuzilishi. Nuqtali chiziqlar mos ravishda kislorodning valentlik va polaron diapazonidagi kovaklarning erkin hamda lokalizatsiyalangan holatini ko‘rsatadi. DOS – holat zichligi**

Yana bir muhim eksperimentallardan biri, LSCO kuprat materialida  $\sim 0,12$  eV da Fermi energiyasidan past  $x=0,05$  qiymatidagi tekis zona mavjud bo‘lib monoton o‘svuchan bo‘lib legirlash darajasini  $x$  oshishi bilan kamayadi va o‘zining intensivligini dielektrik fazaga yuqotadi. Biz taxmin qilamizki, kam legirlangan kuprat materialida kuzatilgan yassi energiya zonasi LSCO ( $x \sim 0,05$ ) katta qutblarning energiya polosasi hisoblanadi, chunki fotoemissiya spektrlari tahlili natijasida aniqlangan kovak tashuvchilarning effektiv massasi taxminan  $2,1 m_e$ . katta polaronning effektiv massasi deb qarash mumkin. Shunday qilib, kam legirlangan kupratlarning past energiyali elektron tuzilishi bo‘yicha bizning nazariy natijalarimiz turli eksperimental ma’lumotlar bilan yaxshi mos keladi.

## XULOSA

Fizika-matematika fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) ilmiy darajasini olish uchun “**Kuchsiz va kam legirlangan kupratlarda tirqishlararo polaron va bipolyaron holatlarning hosil bo‘lishi**” mavzusidagi dissertatsiya yuzasidan olib borilgan tadqiqotlar asosida nazariy hamda amaliy ahamiyatga ega quyidagi xulosalar chiqarildi:

1. Kuchsiz legirlangan kupratlardagi zaryad tashuvchilarning tabiati va mumkin bo‘lgan tiplari, shuningdek, ularning asosiy holatlarining energiyalari qattiq jismlarning kontinual, adiabatik yaqinlashuv modelidan foydalangan holda yuqori chastotali dielektrik sindruchanlik  $\epsilon_\infty = (2,5 \div 3,5)$  va kupratlarning ionlik  $\eta = (0 \div 0,14)$  darajasiga qarab aniqlanadi.

2. Kuchsiz legirlangan kupratlardagi asosiy zaryad tashuvchilar past haroratlarda harakatsiz bo‘lgan hamda xarakterli bog‘lanish energiyasiga  $E_p \square (0,1 \div 0,2)$  eV ( $\epsilon_\infty = (2,5 \div 3,5)$  va  $\eta = (0,02 \div 0,06)$ ) hamda  $E_{bB} \square (0,5 \div 0,1)$  eV ( $\epsilon_\infty = (2,5 \div 3,5)$  va ( $\eta = (0,02 \div 0,06)$ )) ega bo‘lgan lokalizatsiyalangan katta polaron hamda kuchli bog‘lovchi bipolyaronlar ekanligi ko‘rsatilgan.

3. Katta polaronlar va kuchli bog'lovchi bipolonlarning bog'lanish energiyalarining hisoblangan qiymatlari  $\varepsilon_g \approx (0,1 \div 0,2)$  eV hamda kuchsiz legirlangan  $x < 0,05$  kupratlardagi katta polaron radiuslari ( $R_p \approx (6 \div 10) \text{ \AA}$ ) past energiyali qo'zg'alishlarning eksperimental kuzatilgan energiyalari bilan, ya'ni kichik energiya tirqishlar bilan yaxshi mos kelishi ko'rsatilgan.

4. Kuchsiz legirlangan kupratlardagi yangi tirqishlararo lokalizatsiyalangan holatlar akustik va optik fononlar bilan kuchli o'zaro ta'sir qilish natijasida zaryad tashuvchilarning energiya tirqishida  $\Delta_{CT}$  hosil bo'lgan avtolokalizatsiyalangan (polaron va bipolyaronik) kovak holatlari ekanligi aniqlandi.

5. Lokalizatsiyalangan polaron va bipolyaron energiya pog'onalari legirlanmagan  $x < 0,05$  kupratlarning zaryad tashuvchilari energiya tirqishlarida  $\Delta_{CT}$  hosil bo'ladigan hamda kislorod valentlik zonasi yuqorisida paydo bo'ladigan yangi past energiyali elektron tuzilmasi kam legirlangan kupratlardan tubdan farq qiladi.

6. Kam legirlangan kupratlarning taklif qilinayotgan yangi past energiyali elektron strukturasi ( $x > 0,05$ ), katta polaronlarning tor  $\Delta_{CT}$  energetik zonasi kam legirlangan kupratlarning zaryad tashuvchilarning energiya tirqishida hosil bo'ladi va kislorod valentlik zonasidan yuqorida paydo bo'ladi hamda legirlanmagan kupratlarning yuqori energiyali elektron tuzilishidan tubdan farqlanadi.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.02/30.12.2019.FM/T.33.01 ПО  
ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ ИНСТИТУТЕ  
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ**

---

**ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ**

**РАШИДОВ ЖАМШИД ШИРИНБОВЕВИЧ**

**ОБРАЗОВАНИЕ ВНУТРИЦЕЛЕВЫХ ПОЛЯРОННЫХ И  
БИПОЛЯРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В СЛАБОЛЕГИРОВАННЫХ И  
НЕДОЛЕГИРОВАННЫХ КУПРАТАХ**

**01.04.07 – физика конденсированного состояния**

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации доктора философии (PhD) по физико–математическим наукам

**Ташкент – 2024**

**Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико–математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Министерстве высшего образования, науки и инноваций Республики Узбекистан за номером B2024.4.PhD/FM184.**

Диссертация выполнена в Институте ядерной физики Академия наук Республики Узбекистан.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета ([www.inp.uz](http://www.inp.uz)) и Информационно-образовательном портале «Ziyonet» ([www.ziyonet.uz](http://www.ziyonet.uz)).

**Научный руководитель:**

**Джуманов Сафарали**

доктор физико-математических наук, профессор

**Официальные оппоненты:**

**Расулов Рустам Явкатович**

доктор физико-математических наук, профессор

**Бахрамов Сагдулла Абдуллаевич**

доктор физико-математический наук, профессор  
академик

**Ведущая организация:**

**Бухарский инженерно-технологический институт**

Защита диссертации состоится « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2024 года в \_\_\_\_ часов на заседании Научного совета DSc.02/30.12.2019.FM/T.33.01 при Институте ядерной физики (Адрес: 100214, Ташкент, пос. Улугбек, Институт ядерной физики. Тел.: (+99871) 289-31-41; факс: (+99871) 289-36-65; e-mail: [info@inp.uz](mailto:info@inp.uz)).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Института ядерной физики (регистрирована за № \_\_\_\_). Адрес: 100214, Ташкент, пос. Улугбек, Институт ядерной физики. Тел.: (+99871) 289-31-19.

Автореферат диссертации разослан « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2024 г.  
(протокол рассылки № “ \_\_\_\_ ” от \_\_\_\_\_ 2024 г.)

**М.Ю.Ташметов,**  
председатель Научного совета по  
присуждению ученых степеней,  
д.ф.-м.н., профессор

**О.Р.Тожибоев**  
ученый секретарь Научного совета  
по присуждению ученых степеней, PhD ф.-м.н.,  
старший научный сотрудник

**Э.М.Турсунов**  
председатель научного семинара при  
Научном совете по присуждению  
ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

## **ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))**

**Актуальность и востребованность темы диссертации.** В настоящее время исследование легированных купратных ВТСП-материалов обладает значительной научной ценностью благодаря разнообразным возможностям их применения. Исследование природы и типов носителей заряда (тока) в дырочно-легированных медно-оксидных (купратных) соединениях и низкоэнергетической электронной структуры этих материалов, зависящей от уровня их легирования и характера взаимодействия дырочных носителей между собой и с колебаниями кристаллической решетки, является одной из важных задач современной физики конденсированного состояния.

В последние годы многочисленные экспериментальные исследования показали, что электронные свойства слабо легированных, недолегированных и даже оптимально легированных купратов сильно отличаются от электронных свойств обычных диэлектриков, металлов и сверхпроводников. При этом слаболегированные купраты проявляют необычное диэлектрическое поведение. При увеличении уровня легирования в недолегированных и оптимально легированных режимах купратные соединения проявляют необычные свойства, связанные с явлениями локализации и делокализации дырочных носителей и с их низкоэнергетической электронной структурой. Многочисленные теории легированных купратов, основанные на обычной одноэлектронной зонной модели, пренебрегающие сильной электронной корреляцией и электрон-фононными взаимодействиями, а также базирующиеся на зонной модели Мотта-Хаббарда, встретились со значительными трудностями при описании многих необычных электронных свойств этих материалов. В этой связи исследования возможных эффектов сильных дырочно-решеточных взаимодействий, приводящих к автолокализации дырок и спариванию этих автолокализованных дырок, возможности образования полярных локализованных состояний и узких поляронных зон внутри энергетической щели перескока заряда, новых низкоэнергетических электронных структур недолегированных купратов крайне важны и весьма актуальны для понимания их необычных диэлектрических, металлических и сверхпроводящих свойств.

В настоящее время в Республике Узбекистан большое внимание уделяется развитию полупроводникового и сверхпроводникового материаловедения, где достигнуты значительные результаты. При этом пристальное внимание уделяется выяснению природы и типов носителей тока в легированных купратах, определению низкоэнергетической электронной структуры этих материалов. Направления этих фундаментальных исследований, имеющих важное значение для развития науки нашей страны и её практического применения, отражены в Стратегии<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup> Указ Президента Республики Узбекистан № УП-60 «О Стратегии развития нового Узбекистана на 2022-2026 годы» от 28 января 2022 г.

развития нового Узбекистана на 2022–2026 гг.

Исследования в этой области соответствуют целям и задачам, предусмотренным в Указах Президента Республики Узбекистан № УП-60 «О Стратегии развития нового Узбекистана на 2022-2026 гг.» от 28 января 2022 года, Постановлениях Президента Республики Узбекистан № ПП-2772 «О приоритетных направлениях развития электротехнической промышленности в 2017-2021 годах» от 13 февраля 2017 года, № ПП-4526 «О мерах по поддержке научно исследовательской деятельности Института ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан» от 21 ноября 2019 года, а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере.

**Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий республики.** Диссертационная работа выполнена в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий республики II. «Энергетика, энергосбережение и альтернативные источники энергии».

**Степень изученности проблемы.** Исследованиями внутрищелевых поляронных и биполяронных состояний в слаболегированных и недолегированных купратах занимались и занимаются многие ученые в мире, в том числе украинские (С.И. Пекар, В.Л. Винецкий, А.С. Давыдов, Э.А. Пашицкий, Н.И. Каширина), российские (Л.Д. Ландау, А.С. Александров, В.Д. Лахно, Е.П. Покатилов), германские (Г. Фрёлх), английские (Н.Ф. Мотт), японские (Ю. Тойзава, Ю. Такада), американские (З. Фейнман, Т. Холстейн, Д. Эмин), польские (Ж. Адамовский), бельгийские (Дж.Е. Девриз, Г. Вербист, Ф.М. Пеетерс) и узбекистанские (Б.Л. Оксенгендлер, П.К. Хабибуллаев, Ф. Дж. Байматов и др.).

Ими рассматривались вопросы локализации и делокализации электронов в оксидах переходных металлов, а также в неупорядоченных или аморфных твердых телах (А. Вильсон, Н.Ф. Мотт, Ф. Вигнер, Р. Пайерлс, Ф.В. Андерсон и Дж. Хаббард). Ученые стремились объяснить переход от делокализованного состояния электронов к локализованному, а также необычную зонную структуру диэлектриков и полупроводников, основываясь на концепции сильной электронной корреляции. Также рассматривались аспекты кристаллизации электронного газа, искажения одномерной кристаллической решетки, удвоения природы решетки и неупорядоченности кристаллической решетки. В дальнейшем эти идеи были использованы и получили развитие при изучении явлений локализации и делокализации носителей тока в различных классах твердых тел, а также при определении электронной структуры оксидных материалов и легированных полупроводников (О. Маделунг, Я. Заанен, Г.А. Сабацкий, Дж.В. Аллен, Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос, Г. Котлиар, В. Добросавлежвик). Проводились теоретические и экспериментальные исследования по определению природы и типов носителей тока в этих сложных материалах и отличительных особенностей их электронных структур (Ф.В. Андерсон, К.А. Мюллер, А.С. Александров, Б.К. Чакраверти, Дж. Раннингер, Н.Ф. Мотт, В.Дж. Эмери,

Ж.В. Лоренц, Д. Эмин, Дж.Т. Девриз, Х.Х. Би, Д. Михайлович, С. Сигай, Д. Пайнс, Т. Римаск, Б.А. Лу, А. Бианкони, В.Ф. Гантмахер, М. Имада, Г. Баскаран, Ю. Ру).

Несмотря на такие многочисленные теоретические и экспериментальные исследования электронных свойств дырочно-легированных ВТСП-купратов, истинная природа и типы носителей тока в них, их реальная низкоэнергетическая электронная структура недостаточно изучены. В частности, вопросы о количественном определении возможности образования автолокализованных поляронных состояний большого или малого радиусов в ВТСП-материалах, возможности образования биполяронных состояний в них в зависимости от их физических параметров (например, диэлектрической проницаемости) и от степени их легирования оставались недостаточно исследованными. Кроме того, природа и причины происхождения локализованных электронных состояний внутри энергетической щели переноса зарядов купратных материалов оставались спорными и были недостаточно изучены.

**Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертация.** Диссертационное исследование выполнено в рамках плана научно-исследовательских работ Института ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан по теме: ОТ-Ф2-15 “Теоретические исследования новых сверхпроводящих и сверхтекучих свойств высокотемпературных сверхпроводников и родственных конденсированных систем” (2017–2021).

**Цель исследования** заключается в выявлении возможности формирования (би)поляронных состояний в слабо легированных купратах ( $0,02 < x < 0,05$ ) и в определении низкоэнергетической электронной структуры этих материалов, а также в анализе причин возникновения локализованных состояний внутри щелей и узких энергетических зон в слабо ( $0,02 < x < 0,05$ ) и недолегированных ( $0,05 < x < 0,125$ ) купратах.

**Задачи исследования:**

исследовать возможности одночастичной и парной автолокализации дырочных носителей при сильном дырочно-решеточном взаимодействии в слаболегированных купратах;

определить возможности образования больших дырочных поляронов и биполяронов в слаболегированных купратах;

рассчитать энергии основных состояний автолокализованных дырок в слаболегированных купратах;

определить низкоэнергетическую электронную структуру слаболегированных купратов и возможности появления внутрищелевых поляронных и биполяронных состояний выше потолка валентной зоны кислорода;

изучить возможные типы упорядочения поляронных носителей и образование узких внутрищелевых поляронных зон выше потолка валентной зоны кислорода в недолегированных купратах.

**Объектом исследования** являются слаболегированные купраты  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  (LSCO) и  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  (YBCO), недолегированные ВТСП-купраты LSCO и YBCO.

**Предметом исследования** являются процессы автолокализации дырочных носителей тока и образования поляронных и биполяронных состояний в слаболегированных купратах, а также формирования новой низкоэнергетической электронной структуры в слаболегированных и недолегированных ВТСП-купратах.

**Методы исследования:** вариационные методы, использование адиабатического приближения и континуальной модели автолокализации дырочных носителей, метод сильной связи, компьютерная графика (Mathematica).

**Научная новизна исследования** заключается в следующем:

развита количественная теория образования больших дырочных поляронов и (би)поляронов в слаболегированных купратах в континуальной модели и адиабатическом приближении и рассчитаны энергии основных состояний и энергии связей таких (би)поляронов;

определены радиусы больших дырочных поляронов и энергетические уровни больших (би)поляронов сильной связи, образующихся внутри энергетической щели переноса заряда (т.е. запрещенной зона) недолегированных купратов при их дырочном легировании;

впервые показаны возможности появления внутрищелевых поляронных и биполяронных состояний и узких внутрищелевых поляронных зон выше потолка валентной зоны кислорода в слаболегированных купратах;

показано, что низкоэнергетические электронные структуры слаболегированных и недолегированных купратов фундаментально отличаются от высокоэнергетической электронной структуры нелегированных купратов.

**Практические результаты исследования** заключаются в следующем:

разработан новый подход, адекватно описывающий отличительные особенности низкоэнергетических электронных структур слаболегированных и недолегированных купратов от высокоэнергетической электронной структуры нелегированных купратов.

**Достоверность результатов исследования** подтверждается применением апробированных математических методов и теоретических подходов, таких как вариационные методы, континуальная модель твердого тела для описания автолокализации дырочных носителей в слаболегированных купратах и метод сильной связи, позволяющий описать образование узкой поляронной зоны, а также хорошим согласием полученных результатов с существующими экспериментальными данными

### **Научная и практическая значимость результатов исследования.**

Научная значимость результатов заключается в том, что теоретические выводы расширяют физические представления о локализованных электронных состояниях в легированных твердых телах и о зонных структурах легированных полупроводников и диэлектриков.

Практическая значимость результатов определяется тем, что они позволяют предсказать возможные пути создания новых оксидных ВТСП материалов с улучшенными электронными свойствами, в частности, с более высокими критическими температурами сверхпроводящего перехода  $T_c$ .

**Внедрение результатов исследования.** На основе полученных результатов по исследованию внутрищелевых электронных состояний в легированных купратных материалах:

развитая количественная теория образования больших дырочных поляронов и биполяронов в слаболегированных купратах и рассчитанные энергии основных состояний и энергии связи этих (би)поляронов была использована в Наманганском инженерно-строительном институте в рамках научно-исследовательского проекта ФЗ-20200929243 “Влияние электронов и фононов, нагретых в сильном электромагнитном поле, на характеристики полупроводниковых солнечных фотоэлектрических элементов и наноструктур” (2022-2026) (Письмо Наманганского инженерно-строительного института № 06/10-09/1129 от 30.09.2024 г.). Использование результатов позволило объяснить различные электронные процессы, протекающие в композитных материалах, а также при разработке и исследовании наноматериалов с целью создания новых материалов для широкого круга применений;

**Апробация работы.** Результаты исследования докладывались и обсуждались на 5 международных и республиканских научно-практических конференциях.

**Публикация результатов исследований.** По теме диссертации опубликовано 8 научных работ, в том числе 3 статьи в научных изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией для публикации основных научных результатов докторских диссертаций, из них 1 в зарубежном научном журнале.

**Структура и объем диссертационной работы.** Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка использованной литературы. Объем диссертации составляет 83 страниц.

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ**

Во **введении** обоснованы актуальность и востребованность темы диссертации, определено соответствие проведенных исследований приоритетным направлениям развития науки и технологий республики Узбекистан и степень изученности проблемы, сформулированы цель и задачи

исследования, приводятся сведения об объектах, предметах и методах исследования, изложены научная новизна и практические результаты, обоснована практическая значимость результатов исследования достоверность, приведены сведения о внедрении результатов исследования, апробации работы, а также об объеме и структуре диссертации.

В первой главе диссертации **«Электронная структура нелегированных медно-оксидных (купратных) соединений»** приведены сведения об электронной структуре нелегированных купратных материалов. Проанализированы опубликованные экспериментальные и теоретические работы, посвященные определению электронной структуры нелегированных и легированных купратов. В теоретических работах электронная структура нелегированных купратов описывается в рамках одно или трехзонной модели Хаббарда, которая часто необоснованно применяется также к легированным купратам. Анализ литературных данных показывает, что несмотря на определенный прогресс, достигнутый в последние десятилетия в понимании необычных электронных свойств легированных купратных материалов, основные вопросы об электронных явлениях в слабо- и недолегированных купратах остаются еще нерешенными, так как различные теоретические модели, предложенные для определения реальной низкоэнергетической электронной структуры легированных купратов, истинной природы носителей тока и внутрищелевых состояний в них во-первых, противоречивы, а во-вторых, недостаточно обоснованы. Их применимость для легированных купратов остается не доказанной. В частности, в нелегированных купратах сильные электронные корреляции, описываемые моделью Хаббарда, играют важную роль в определении их электронной структуры. Однако в легированных купратах эффекты электронной корреляции становятся несущественными и эффекты сильных дырочно-решеточных взаимодействий могут быть доминирующими в изменении делокализованного состояния электронов или дырок в локализованное состояние.

Экспериментальные данные показывают, что при дырочном легировании купратов новая дырка появляется, в основном, на  $2p$  орбиталях кислорода. На самом деле при таком легировании появление электронных (дырочных) состояний наблюдается выше потолка валентной зоны кислорода, которая находится между нижней и верхней зонами Хаббарда. Одно- и трех-зонные модели Хаббарда, описывающие диэлектрическое состояние (или высокоэнергетическую электронную структуру) нелегированных купратов, видимо, будут не применимыми для изучения низкоэнергетической электронной структуры легированных купратов, в которых дырочные носители, введенные в кристаллическую решетку купратов путем их легирования, могут быть делокализованы аналогично как в легированных полупроводниках (например, *Si* и *Ge*). Поэтому адекватное описание новой электронной структуры легированных купратов требует более подходящий и реалистический теоретический подход.

При дырочном легировании купратов появляются новые электронные состояния внутри так называемой энергетической щели переноса заряда  $\Delta_{\text{ср}}$ . Такие электронные (дырочные) состояния получили название внутрищелевых состояний. Эти внутрищелевые состояния распределены выше потока валентной зоны кислорода, которая расположена между нижней и верхней зонами Хаббарда, т.е. эти новые электронные состояния появляются между валентной зоной кислорода и верхней зоной Хаббарда. Имеются различные точки зрения о происхождении и распределении внутрищелевых состояний в энергетической щели  $\Delta_{\text{ст}}$ , а также о положении уровня Ферми  $\varepsilon_F$  легированных купратов в этой энергетической щели и о возможном смещении уровня Ферми до потолка валентной зоны кислорода при дырочном легировании купратов. Природа этих внутрищелевых электронных состояний в легированных купратах остается еще не до конца изученной и понятной.

Вторая глава диссертации **«Образование больших поляронов и биполяронов в слабо-легированных купратах»** посвящена исследованию сильных электрон (дырочно)-фононных взаимодействий и образованию больших поляронов и биполяронов сильной связи в слаболегированных купратах. В большинстве теоретических моделей пренебрегается этими важными и доминирующими взаимодействиями в полярных купратных материалах. В действительности, колебания атомов кристаллической решетки вызывают нарушения периодичности кристаллического поля и оказывают существенное влияние на состояние электронных (или дырочных) носителей тока в легированных ионных кристаллах. В дырочно-легированных купратных материалах при сильном дырочно-решеточном взаимодействии может образоваться автолокализованное состояние дырок, которое называется поляронным состоянием. Большой интерес для физики твердого тела вообще и физики легированных оксидных ВТСП-материалов в частности представляет изучение процессов образования поляронов и биполяронов сильной связи. Особое внимание к возможности существования биполяронов в оксидных материалах сыграло ключевую роль в открытии высокотемпературной сверхпроводимости в легированных купратах. Биполяроны сильной связи в этих полярных материалах формируются в результате поляризации ионной решетки дыркой, введенной в кристалл при легировании. Поляризация приводит к снижению энергии дырки, то есть к образованию потенциальной ямы в области её нахождения, где дырка впоследствии захватывается. Эта автолокализованная дырка (т.е. поляронная квазичастица) может перемещаться по всему кристаллу, при этом движущаяся дырка несет с собой поляризационную или деформационную шубу (деформации будут перемещаться вместе с ней). Если размеры полярона превышают постоянную решетки  $a_0$ , то ионный кристалл можно описывать как непрерывную среду (континуум). Для описания образования поляронов большого радиуса в ионном кристалле можно опустить в уравнении Шредингера периодический потенциал кристалла  $V(r)$ , заменив

одновременно массу свободной дырки на ее эффективную массу  $m^*$ . При этом для решения уравнения Шредингера в адиабатическом приближении удобнее пользоваться вариационным принципом, т.е. функционалом полной энергии  $E\{\psi, \Delta, \varphi\}$  взаимодействующей дырочно-фононной системы, зависящей от волновой функции дырки  $\psi(r)$ , деформации решетки  $\Delta(r)$  и потенциала поляризации решетки  $P(r)$ . Это может быть сделано в тех случаях, когда нам из физических соображений известен общий вид волновой функции дырки. Функционал полной энергии взаимодействующей дырочно-фононной системы, описывающий образование поляронного состояния в ионном кристалле в рамках континуальной модели и адиабатического приближения, имеет вид:

$$E_p\{\psi, \Delta, \varphi\} = \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m^*} (\nabla \psi(\vec{r}))^2 + \frac{1}{2} K \Delta^2(\vec{r}) + E_d \psi^2(\vec{r}) \Delta(\vec{r}) - e \psi^2(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) + \frac{\tilde{\epsilon}}{8\pi} (\nabla \varphi(\vec{r}))^2 \right] d^3r, \quad (1)$$

где  $K$  – упругая постоянная решетки,  $E_d$  – деформационный потенциал дырочного носителя,  $\tilde{\epsilon} = \epsilon_\infty / (1 - \eta)$  – эффективная диэлектрическая проницаемость,  $\eta = \epsilon_\infty / \epsilon_0$ ,  $\epsilon_\infty$  и  $\epsilon_0$  – соответственно высокочастотная и статическая диэлектрическая проницаемость.

Функционал полной энергии взаимодействующей системы дырка-кристаллическая решетка, описывающий образование биполярного состояния в ионном кристалле купратов, можно записать аналогичным образом с учетом кулоновского взаимодействия между дырками. Этот функционал  $E\{\psi, \Delta, \varphi\}$  зависит уже от волновой функции двух дырок  $\Psi(r_1, r_2)$ . Функционал, зависящий только от  $\psi(r)$  и описывающий образование автолокализованного (поляронного состояния в трехмерном (3D) ионном кристалле) имеет вид:

$$E_p\{\psi\} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \int (\Delta \psi(\vec{r}))^2 d^3r - \frac{E_d^2}{2K} \int \psi^4(\vec{r}) d^3r - \frac{e^2}{2\tilde{\epsilon}} \iint \frac{\psi^2(\vec{r}) \psi^2(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r' \quad (2)$$

Минимизация функционала (2) по  $\psi(r)$  будет давать энергию основного состояния дырочного полярона в легированных купратах. Для того, чтобы найти экстремумы этого функционала, пробную волновую функцию дырки можно выбрать в простой форме

$$\psi(\vec{r}) = N_1 \exp(-\sigma \vec{r}), \quad (3)$$

где  $N_1 = \sigma^{3/2} / \sqrt{\pi}$  – нормировочный множитель,  $\sigma = \beta / a_0$ ,  $\beta$  – вариационный параметр,  $a_0$  – параметр кристаллической решетки.

Подставляя уравнение (3) в функционал (2) и после вычисления интегралов в (1), получаем следующий функционал:

$$E_p(\beta) = A \left[ \beta^2 - g_s \beta^3 - g_l (1 - \eta) \beta \right], \quad (4)$$

где  $A = \hbar^2 / 2m^* a_0^2$ ,  $g_s = E_d^2 / 16\pi K a_0^3 A$  и  $g_l = 5e^2 / 16\epsilon_\infty a_0 A$  соответственно константы коротко- и дальнедействующих дырочно-фононных связей.

Теперь минимизируя функционал (4) по  $\beta$ , определяем энергию основного состояния автолокализованного дырочного носителя (дырочного полярона), измеряемую по отношению потолка валентной зоны кислорода в легированных купратах. Энергия связи такого полярона определяется как

$$E_p = |E_p(\beta_{min})| \quad (5)$$

$$\text{где } \beta_{min} = \left[ 1 - \sqrt{1 - 3g_s g_l (1 - \eta)} \right] / 3g_s.$$

Средний размер (радиус) полярона определяется из выражения

$$R_p = \int r \psi^2(r) d^3(r), \quad (6)$$

из которого находим

$$R_p = \frac{9g_s}{2 \left[ 1 - \sqrt{1 - 3g_s g_l (1 - \eta)} \right]} a_0. \quad (7)$$

После минимизации функционала  $E\{\psi, \Delta, \varphi\}$ , по  $\Delta(r)$  и  $\varphi(r)$  получаем функционал, зависящий только от волновой функции  $\Psi(\eta, r_2)$  и описывающий образование биполяронного состояния в легированных купратах. При этом волновую функцию выбираем в виде:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N_2 \left[ 1 + \gamma \sigma |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \right] \exp \left[ -\sigma (\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \right], \quad (8)$$

где  $N_2 = \sigma^3 / \pi \sqrt{C_1(\gamma)}$ ,  $\gamma$  – нормировочный множитель,  $C_1(\gamma) = 1 + \frac{35}{8} \gamma + 6\gamma^2$  параметра  $\gamma$ .

Таким образом функционал  $E\{\psi, \Delta, \varphi\}$ , зависящий от вариационных параметров  $\beta$  и  $\gamma$  определяет основные состояния биполярона.

Энергия связи большого биполярона определяется как

$$E_{bV} = |E_B(\beta_{min}, \gamma_{min}) - 2E_p(\beta_{min})| \quad (9)$$

Нами вычислены основные параметры больших поляронов и биполяронов в слабо легированных купратах, которые приведены в таблицах 1 и 2.

Таблица 1

Рассчитанные значения параметров 3D больших поляронов сильной связи в слабелегированных купратах при различных значениях  $\varepsilon_\infty$  и  $\eta$

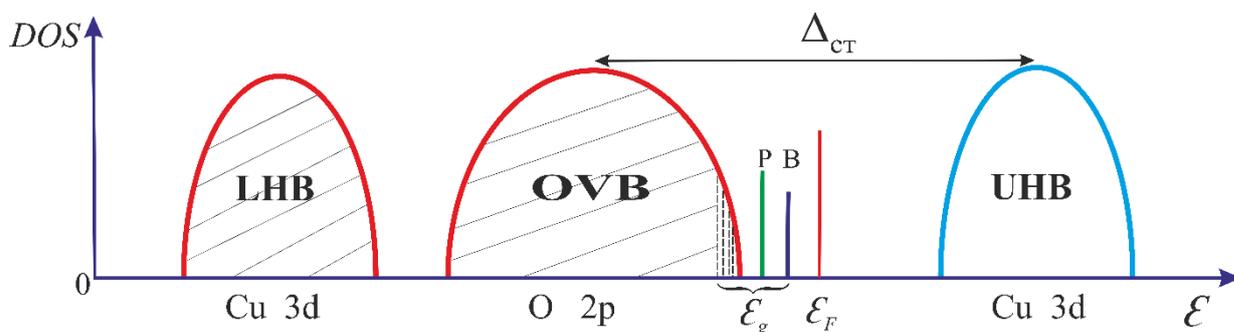
$\eta$	$\varepsilon_\infty = 2,5$		$\varepsilon_\infty = 3$		$\varepsilon_\infty = 3,5$	
	$E_p, \text{eV}$	$R_p, \text{Å}$	$E_p, \text{eV}$	$R_p, \text{Å}$	$E_p, \text{eV}$	$R_p, \text{Å}$
0,00	0,219	6,059	0,151	7,335	0,111	8,610
0,02	0,210	6,189	0,145	7,491	0,106	8,792
0,04	0,201	6,325	0,139	7,634	0,102	9,981
0,06	0,193	6,466	0,133	7,823	0,098	9,179
0,08	0,185	6,614	0,128	8,000	0,093	9,385
0,10	0,177	6,768	0,122	0,185	0,089	9,601
0,12	0,169	6,929	0,117	8,378	0,085	9,826
0,14	0,161	7,097	0,111	8,580	0,081	10,062

Таблица 2

Рассчитанные значения параметров 3D биполяронов сильной связи в слабелегированных купратах при различных значениях  $\varepsilon_\infty$  и  $\eta$

$\eta$	$\varepsilon_\infty = 2,5$		$\varepsilon_\infty = 3$		$\varepsilon_\infty = 3,5$	
	$E_B(\beta_{\min}, \gamma_{\min})$	$E_{bB}$	$E_B(\beta_{\min}, \gamma_{\min})$	$E_{bB}$	$E_B(\beta_{\min}, \gamma_{\min})$	$E_{bB}$
0,00	-0,558	0,120	-0,383	0,081	-0,280	0,058
0,02	-0,520	0,100	-0,357	0,067	-0,260	0,048
0,04	-0,483	0,081	-0,332	0,054	-0,243	0,039
0,06	-0,449	0,063	-0,308	0,042	-0,226	0,030
0,08	-0,416	0,046	-0,287	0,031	-0,208	0,022
0,10	-0,384	0,030	-0,264	0,020	-0,192	0,014
0,12	-0,353	0,015	-0,244	0,010	-0,177	0,007
0,14	-0,324	0,002	-0,223	0,001	-0,162	—

В третьей главе диссертации «Внутрищелевые состояния и низкоэнергетические электронные структуры слабо- и недолегированных купратов» описаны внутрищелевые состояния в слабелегированных купратах. Предложенная нами новая низкоэнергетическая электронная структура слабелегированных купратов показана на Рисунке 1.



**Рис. 1. Новая низкоэнергетическая электронная структура слабо-легированных купратов. Пунктирами в валентной зоне кислорода показаны свободные состояния дырок, DOS – плотность состояния**

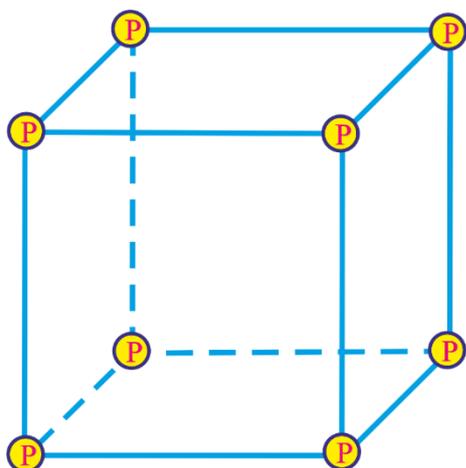
Энергия связи больших поляронов и биполяронов в слабо- и недолегированных купратах проявляется в спектрах их возбуждения как малые энергетические щели  $\varepsilon_g = E_{bB}$ , и  $\varepsilon_g = E_p$ , которые и являются почти независимыми от уровня легирования  $x$  и температуры  $T$  при низких уровнях легирования и температурах. Такие щелевые особенности фактически наблюдались экспериментально в слаболегированных  $3D$  купратах. При этом энергетическая щель переноса зарядов нелегированных купратов при их легировании заполняется поляронными и биполярными состояниями. Здесь следует отметить, что ранние исследования  $2D$  кластеров в легированных купратах, проведенные Лоренцом с использованием  $2D$  модели Хаббарда, показали, что энергетическая щель  $\Delta_{СТ}$  переноса зарядов в купратах заполняется глубокими (би)поляронными состояниями. Как видно из таблиц 1 и 2 и рисунка 1, при легировании купратов такие и менее глубокие внутрищелевые поляронные и биполярные состояния образуются также в слаболегированных  $3D$  купратах.

Проведенные нами расчеты показывают, что поляронные и биполярные состояния формируются внутри энергетической щели переноса зарядов в нелегированных купратах (см. рис.1) и проявляются как локализованные внутрищелевые состояния при низких уровнях легирования, что подтверждается результатами различных экспериментов.

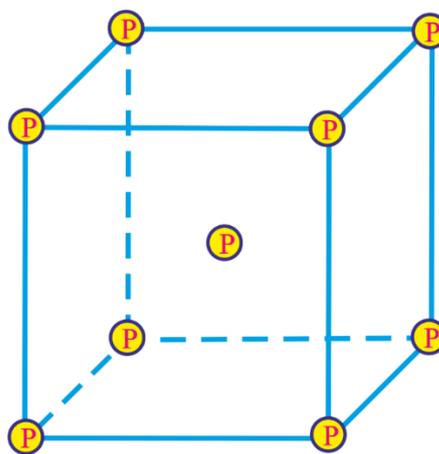
Характерные энергии связей больших поляронов и биполяронов  $E_p \approx (0,1 \div 0,2)$  эВ и  $E_{bB} \approx (0,03 \div 0,10)$  эВ (см. таблицы 1 и 2) должны проявляться в спектрах возбуждения дырочно-легированных купратов как сравнительно малые энергетические щели, которые отличаются от энергетических щелей  $\Delta_{СТ} \approx (1,5 \div 2,0)$  эВ нелегированных купратов. Действительно, значения  $E_{bB}$ , приведенные в таблице 2 для  $\varepsilon_\infty = (2,5 \div 3,5)$  и  $\eta = 0,06$ , близки к экспериментально наблюдаемым энергетическим щелям  $\varepsilon_g \approx (0,03 \div 0,06)$  эВ в спектрах возбуждения этих материалов.

Далее значения энергии связей больших биполяронов  $E_{bB} \approx (0,01 \div 0,04)$  эВ, полученные нами при  $\varepsilon_\infty = 3$  и  $\eta = (0,06 \div 0,14)$ , также хорошо согласуются с наблюдаемыми пиками поглощения в спектрах YBCO при  $(0,013 \div 0,039)$  эВ. Другие экспериментальные наблюдения свидетельствуют о существовании локализованных внутрищелевых состояний и хорошо определенной полупроводниковой щели в слабо легированном купратном материале LSCO ( $x = 0,02$ ), где наблюдаемая энергетическая щель имеет значение  $0,04$  эВ и является почти температурно-независимой до 160 К. Значения этой энергетической щели близки к энергии связи больших биполяронов, приведенной в таблице 2 для  $\varepsilon_\infty = 3$  и  $\eta = 0,06$ . Кроме того, в различных экспериментах спектры возбуждения легированных купратов показывают щелевые особенности на других энергетических шкалах  $(0,08 \div 0,15)$  эВ, которые согласуются с значением малой энергетической щели, определенной как энергия связи больших поляронов  $E_p \approx (0,08 \div 0,15)$  эВ при  $\varepsilon_\infty = (2,5 \div 3,5)$  и  $\eta \approx (0,01 \div 0,14)$ . Таким образом, нами показано, что слаболегированные купраты имеют новую низкоэнергетическую электронную структуру (с диэлектрическими щелями  $\varepsilon_g \approx (0,1 \div 0,2)$  эВ), которая находится в разумном согласии с существующими экспериментальными результатами по низкоэнергетическим возбуждениям этих материалов и существенно отличается от высокоэнергетической электронной структуры нелегированных купратов (с диэлектрическими щелями  $\Delta_{CT} \approx (1,5 \div 2,0)$  эВ).

Когда уровень легирования купратов увеличивается в сторону их недолегированного режима, специфические упорядочения поляронных носителей будут происходить с образованием их различных сверхрешеток (см. Рисунки 2, 3, 4) и энергетический уровень поляронов, показанный на Рисунке 1, превращается уже в узкую поляронную зону внутри энергетической щели переноса зарядов  $\Delta_{CT}$  нелегированных купратов. Эта внутрищелевая поляронная зона постепенно будет уширяться с увеличением уровня легирования купратов и примыкать к потолку валентной зоны кислорода.



**Рис. 2. Простая кубическая  
сверхрешетка больших поляронов  
(P) в недолегированных купратах**



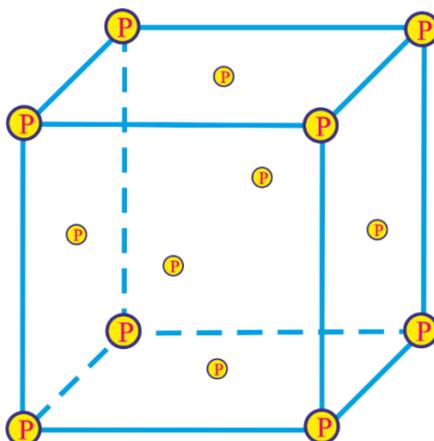
**Рис. 3. Объемно центрированная  
кубическая сверхрешетка  
больших поляронов (P) в  
недолегированных купратах**

В приближении сильной связи ширины энергетических зон больших поляронов в недолегированных ВТСП – купратах подобно ширине примесной зоны в них можно определить из выражения

$$W_p = 2zJ_p \quad (10)$$

где  $J_p = \hbar^2/2m_p a_p^2$  – интеграл перескока полярона между ближайшими узлами сверхрешетки поляронов,  $m_p$  – эффективная масса поляронных носителей.

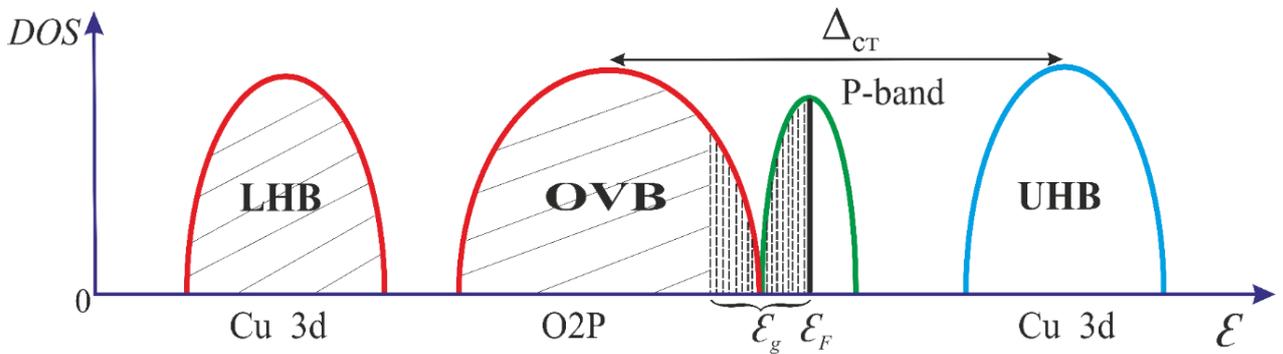
Предлагаемая здесь новая низкоэнергетическая электронная структура недолегированных купратов показана на рисунке 5. Наиболее важные особенности такой электронной структуры недолегированных купратов  $0,05 < x < 0,125$  описаны ниже.



**Рис. 4. Гранецентрированная кубическая решетка больших поляронов  
(P) в недолегированных купратах**

Экспериментальные результаты показывают, что в недолегированных ВТСП – купратах узкие энергетические зоны образуются в энергетической щели переноса заряда  $\Delta_{CT}$  недолегированных купратов и тесно связаны с внутрищелевыми поляронными зонами и наблюдаемым инфракрасным спектром в недолегированных купратах. В частности, согласно экспериментальным данным и нашим результатам, средне-инфракрасная (СИК) особенность ожидается из-за возбуждения локализованных дырочных носителей из их узкой поляронной зоны в их делокализованные состояния, существующие ниже потолка валентной зоны кислорода (см. Рисунок 5), как это и наблюдалось в СИК спектре недолегированных купратов. Такая характерная СИК особенность, наблюдаемая в спектрах возбуждения недолегированных в купратов, привела многих исследователей к поляронной интерпретации СИК отклика и рамановских спектров YBCO, хотя истинная природа этой СИК особенности осталась окончательно установленной. Согласно предложенной нами низкоэнергетической структуре недолегированных купратов, СИК поглощения, как и в рамановских спектрах, связаны с возбуждениями больших поляронов из их узкой энергетической зоны, расположенной внутри энергетической щели переноса зарядов  $\Delta_{CT}$ , с последующим переходом в делокализованные состояния квазисвободных дырок, находящихся в валентной зоне кислорода.

Кроме того, внутрищелевая энергетическая зона в купратном материале LSCO, наблюдаемая при 0,13 эВ, приписана энергетической зоне поляронов, которые, по нашему мнению скорее всего, являются большими поляронами. Если предположить, что  $\epsilon_{\infty} = 3$  и  $\eta = 0,07$  для LSCO, то получим значение  $E_p \approx 0,13$  эВ (см. таблицу 1), соответствующее этим экспериментальным наблюдениям. Когда поляронная зона в энергетической щели  $\Delta_{CT}$  уширяется, уровень Ферми в легированных купратах, расположенный в середине этой щели, будет двигаться в уширенную поляронную зону в недолегированных купратах, как показано на Рисунке 5, где LNB и UNB соответственно, нижняя (заполненная) и верхняя (пустая) зоны Хаббарда, OVB – валентная зона кислорода,  $\Delta_{CT}$  – энергетическая щель переноса заряда, P-band – энергетическая зона больших поляронов,  $\epsilon_g$  – минимальная энергетическая щель в спектрах возбуждения недолегированных купратов,  $\epsilon_F$  – уровень Ферми.



**Рис. 5. Новая низкоэнергетическая электронная структура недолегированных купратов. Пунктирами в валентной зоне кислорода и поляронной зоне показаны соответственно свободные и автолокализованные состояния дырок, DOS – плотность состояний**

Другим важным экспериментальным наблюдением является то, что в купратном материале LSCO плоская зона, которая находится  $\sim 0,12$  эВ ниже энергии ферми при  $x=0,05$ , с увеличением уровня легирования  $x$  монотонно поднимается вверх, ее интенсивность уменьшается и полностью исчезает в диэлектрической фазе. Мы предполагаем, что эта плоская энергетическая зона, наблюдаемая в недолегированном купратном материале LSCO ( $x \sim 0,05$ ) является энергетической зоной больших поляронов, так как эффективная масса дырочных носителей, определенная на основе анализа фотоэмиссионных спектров, составляет около  $2,1 m_e$  которую можно рассматривать как эффективную массу большого полярона. Таким образом, полученные нами теоретические результаты по низкоэнергетической электронной структуре недолегированных купратов находятся в хорошем согласии с различными экспериментальными данными.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе проведенных исследований по диссертации на соискание ученой степени доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам на тему «**Образование внутрищелевых поляронных и биполяронных состояний в слаболегированных и недолегированных купратах**» представлены следующие выводы:

1. Определены природа и возможные типы носителей зарядов в слаболегированных купратах, а также энергии их основных состояний в зависимости от высокочастотной диэлектрической проницаемости  $\epsilon_\infty = (2,5 \div 3,5)$  и степени ионности  $\eta = (0 \div 0,14)$  купратов с использованием континуальной модели твердого тела и адиабатического приближения.

2. Показано, что основными носителями зарядов в слаболегированных купратах являются локализованные 3D большие поляроны и биполяроны сильной связи, которые являются неподвижными при низких температурах и

имеют характерные энергии связи  $E_p \approx (0,1 \div 0,2)$  эВ (при  $\varepsilon_\infty = (2,5 \div 3,5)$  и  $\eta = (0,02 \div 0,06)$ ) и  $E_{bB} \approx (0,05 \div 0,1)$  эВ ( $\varepsilon_\infty = (2,5 \div 3,5)$ ) и  $\eta = (0,02 \div 0,06)$ ).

3. Показано, что вычисленные значения энергии связей 3D больших поляронов и биполяронов сильной связи и радиусов 3D больших поляронов в слаболегированных купратах ( $x < 0,05$ ) находятся в хорошем согласии с экспериментально наблюдаемыми энергиями низкоэнергетических возбуждений (т.е. с малыми энергетическими щелями  $\varepsilon_g \approx (0,1 \div 0,2)$  эВ) этих материалов и радиусами поляронов  $R_p \approx (6 \div 10) \text{ \AA}$  в них.

4. Выявлено, что новые внутрищелевые локализованные состояния в слаболегированных купратах представляют собой автолокализованные (поляронные и биполяронные) состояния дырок, образующиеся в энергетической щели переноса заряда  $\Delta_{CT}$  в результате их сильных взаимодействий с акустическими и оптическими фононами.

5. Предложена новая низкоэнергетическая электронная структура слабо-легированных купратов ( $x < 0,05$ ), в которой локализованные поляронные и биполяронные энергетические уровни образуются внутри энергетической щели переноса заряда  $\Delta_{CT}$  нелегированных купратов и появляются выше потолка валентной зоны кислорода, коренным образом отличающаяся от высокоэнергетической электронной структуры нелегированных купратов.

6. Предложена новая низкоэнергетическая электронная структура недолегированных купратов ( $x > 0,05$ ), в которой узкая энергетическая зона больших поляронов образуется в энергетической щели переноса заряда  $\Delta_{CT}$  нелегированных купратов и появляется выше потолка валентной зоны кислорода, коренным образом отличающаяся также от высокоэнергетической электронной структуры нелегированных купратов.

**SCIENTIFIC COUNCIL DSc.02/30.12.2019.FM/T.33.01 ON AWARD OF  
SCIENTIFIC DEGREES AT THE INSTITUTE OF NUCLEAR PHYSICS**

---

**INSTITUTE OF NUCLEAR PHYSICS**

**RASHIDOV JAMSHID**

**FORMATION OF INTRAGAP POLARON AND BIPOLARON STATES IN  
LIGHTLY AND UNDERDOPED CUPRATES**

**01.04.07 – Condensed matter physics**

**DISSERTATION ABSTRACT  
of the Doctor of Philosophy (PhD) on Physical and Mathematical Sciences**

**Tashkent – 2024**

**The theme of the dissertation of the doctor of philosophy (PhD) on physics-mathematical sciences was registered by the Supreme Attestation Commission of the Ministry of higher education, science and innovations of the Republic of Uzbekistan under No. B2024.4.PhD/FM184.**

The doctoral (PhD) dissertation was carried out at the Institute of Nuclear Physics of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan.

The abstract of the dissertation was posted in three (Uzbek, Russian, English (resume)) languages on the website of the Scientific Council at [www.inp.uz](http://www.inp.uz) and on the website of “Ziyonet” information and educational portal at [www.ziyonet.uz](http://www.ziyonet.uz).

**Scientific supervisor:**

**Dzhumanov Safarali**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences,  
Professor

**Official opponents:**

**Rasulov Rustam Yavkatovich**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

**Bahramov Sagdulla Abdullayevich**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences,  
Professor, Academician

**Leading organization:**

**Bukhara Institute of Engineering and Technology**

The defense of the dissertation will be held on “\_\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2024 at \_\_\_\_\_ at the meeting of Scientific Council No. DSc.02/30.12.2019.FM/T.33.01 at the Institute of Nuclear Physics (Address: INP, Ulugbek settlement, 100124 Tashkent city, tel. (+99871)289-31-41; fax: (+99871)289-36-65; e-mail: info@inp.uz).

The doctoral (PhD) dissertation can be looked through in the Information Resource Center of Institute of Nuclear Physics (registered under No. \_\_\_\_\_) Address: INP, Ulugbek settlement, 100124 Tashkent city. tel. (+99871)289-31-19.

The abstract of dissertation was distributed on “\_\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2024.  
(Registry record No. \_\_\_\_\_ dated “\_\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2024).

**M.Yu.Tashmetov**

Chairman of the Scientific Council  
on Award of Scientific Degrees,  
D.Ph.-M.S., Professor

**O.R.Tojiboev**

Scientific Secretary of the Scientific Council  
on Award of Scientific Degrees, PhD Ph.-M.S.,  
Senior Researcher

**E.M.Tursunov**

Chairman of scientific seminar of the Scientific Council on  
Award of Scientific Degrees,  
D.Ph.-M.S., Professor

## INTRODUCTION (annotation of PhD dissertation)

**The aim of the research** is to investigate the possibility of the formation of (bi)polaron states in weakly doped ( $0.02 < x < 0.05$ ) cuprates and to determine the low-energy electronic structure of cuprates and the origin of localized in-gap states and narrow energy bands in weakly ( $0.02 < x < 0.05$ ) and underdoped ( $0.05 < x < 0.125$ ) cuprates.

**The tasks of the research:** To investigate the possibilities of single-particle and paired self-localization of hole carriers under strong hole-lattice interaction in weakly doped cuprates;

To determine the possibilities of the formation of large hole polarons and bipolarons in weakly doped cuprates;

To calculate the ground state energies of self-localized holes in weakly doped cuprates;

To determine the low-energy electronic structure of weakly doped cuprates and the possibilities of the emergence of in-gap polaron and bipolaron states above the oxygen valence band top;

To study possible types of polaron carrier ordering and the formation of narrow in-gap polaron bands above the oxygen valence band top in underdoped cuprates.

**The objects of the research** is weakly doped cuprates (LSCO) and (YBCO), underdoped high-temperature superconducting cuprates LSCO and YBCO.

**The subject of the research** is the processes of self-localization of hole carriers and the formation of polaron and bipolaron states in weakly doped cuprates, and the formation of a new low-energy electronic structure in weakly and underdoped high-temperature superconducting cuprates.

**The scientific novelty of the research:**

a quantitative theory of the formation of large hole polarons and (bi)polarons in lightly doped cuprates has been improved via the continuum model and adiabatic approximation, and the energies of the ground states and the binding energies of such (bi)polarons have been calculated;

the radii of large hole polarons and the energy levels of large tight-binding (bi)polarons formed inside the charge transfer energy gap (i.e., the forbidden zone) of undoped cuprates upon their hole doping have been determined;

the possibilities of the appearance of intra-gap polaron and bipolaron states and narrow intra-gap polaron bands above the ceiling of the oxygen valence band in lightly doped cuprates have been demonstrated for the first time;

it has been shown that the low-energy electron structures of lightly and underdoped cuprates fundamentally differ from the high-energy electron structure of undoped cuprates.

**Implementation of the research results:** The developed quantitative theory of the formation of large hole polarons and bipolarons in weakly doped cuprates, and the calculated ground state energies and binding energies of these (bi)polarons, as well as the determined energy levels of large, strongly bound hole polarons and

bipolarons, formed inside the charge transfer gap of undoped cuprates during their hole doping, were used at the Namangan Engineering-Construction Institute as part of the research project FZ-20200929243 “The effect of electrons and phonons heated in a strong electromagnetic field on the characteristics of semiconductor solar photovoltaic cells and nanostructures” (2022-2026) (Letter from the Namangan Engineering-Construction Institute № 06/10-09/1129 dated 30.09.2024). The use of the results made it possible to explain various electronic processes occurring in composite materials, as well as in the development and study of nanomaterials with the aim of creating new materials for a wide range of applications;

**Structure and volume of the dissertation.** The dissertation consists of an introduction, three chapters, a conclusion, and a list of references. The total volume of the dissertation is 83 pages.

**E'LON QILINGAN ISHLAR RO'YXATI**  
**СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ**  
**LIST OF PUBLISHED WORKS**

**I bo'lim (Часть I; Part I)**

1. Джуманов С., Рашидов Ж.Ш., Каримбаев Э.Х., Джуманов Ш.С. Несвязанная БКШ-подобная псевдощель и критическая температура сверхпроводящего перехода в различных купратных соединениях // Доклады Академии наук Республики Узбекистан. – Ташкент: Фан АН РУз, 2018. – № 1. – С. 33-36 (01.00.00. № 7).

2. Dzhumanov S., **Rashidov J.Sh.**, Sabirov S.S. Formation of in-gap polaronic and bipolaronic states in lightly doped cuprates // Доклады Академии наук Республики Узбекистан. – Ташкент: Фан АН РУз, 2019. – № 3. – С. 25-28 (01.00.00. № 7).

3. Dzhumanov S., Sabirov S.S., **Rashidov J.Sh.**, Karimbaev E.X., Djumanov S.D., Kurbanov U.T., Sheraliev M.U. Formation of strong-coupling (bi)polarens and related in-gap states in lightly-doped cuprate superconductors // Modern Physics Letters B. – World Scientific Publishing (Singapore), 2021. Vol. 35. No. 11. Id. 2150190 (8 p.) (№1. Web of Science; IF=1,668).

**II bo'lim (Часть II; Part II)**

4. Dzhumanov S., Djumanov S.D., **Rashidov J.Sh.** BCS-like Pseudogap and Novel Isotope Effects in High-Tc Cuprate Superconductors / The 12th International conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (M2S-2018). – Beijing China, 2018. 19-24 august. – P. 247.

5. Dzhumanov S., Kurbanov U.T., **Rashidov J.Sh.**, Khudayberdiev Z.S. The coexisting insulating and metallic/superconducting phases and their manifestations in various underdoped cuprates / Book of Abstracts of the Seventh International Conference on Physical Electronics IPEC-7. – Tashkent: Arifov Institute of ion-plazma and lazer technologies, 2018. 18-19 May. – P. 129.

6. Dzhumanov S., Khidirov I., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., **Rashidov J.Sh.** Metal-insulator transitions and competing effects of insulating and metallic/superconducting phase in hole doped cuprates / “Modern Problems of Nuclear Physics and Nuclear Technologies”: Book of abstracts of 9<sup>th</sup> International Conference. – Tashkent: Institute of Nuclear Physics, 2019. September 24-27. – P. 203.

7. Dzhumanov S., **Rashidov J.Sh.**, Sabirov S.S., Karimbaev E.X., Djumanov D.S., Kurbanov U.T., Sheraliev M.U. Strong dependence of the binding energies of large polarons and bipolarons on dielectric constants of hole-doped cuprates / “Ядерная физика и ядерные технологии” VI Республиканская конференция молодых физиков Узбекистана. – Ташкент: ИЯФ АН РУз, 2020. 1-2 декабря. – С. 168-171.

8. Джуманов С., Рашидов Ж.Ш., Курбанов У.Т. Механизмы локализации носителей, металл-диэлектрик переходов и наноразмерное разделение фаз в дырочно-легированных купратах / “Фундаментальные и прикладные вопросы физики” труды Международной конференции. – Ташкент: НПО Физика-Солнце АН РУз, 2020. 22-23 сентября. – С. 59-62.