

**FARG‘ONA POLITEKNIKA INSTITUTI HUZURIDAGI ILMIY
DARAJALAR BERUVCHI PhD.03/27.02.2020.FM.106.01 RAQAMLI ILMIY
KENGASH**

AJINIYOZ NOMIDAGI NUKUS DAVLAT PEDAGOGIKA INSTITUTI

XAJIBAYEV DO‘SMUXAMMAD G‘ANIYEVICH

**KUPRATLARNING PARDA VA HAJMIY NAMUNALARI
O‘TAO‘TKAZUVCHANLIK XOSSALARIDA POLARON SAMARASI**

01.04.07 – Kondensirlangan holat fizikasi

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

Farg‘ona – 2025

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

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

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

Xajibayev Do‘smuxammad G‘aniyevich

Kupratlarning parda va hajmiy namunalari o‘tao‘tkazuvchanlik
xossalarida polaron samarasi.....3

Хажобаев Досмухаммад Ганиевич

Поляронный эффект в сверхпроводящих свойствах пленочных и
объемных образцов купратов.....25

Khajibaev Dusmukhammad G‘aniyevich

Polaronic effect in the superconducting properties of the cuprate’s film
and bulk samples.....47

E‘lon qilingan ishlar ro‘uxati

Список опубликованных работ

List of published works.....54

**FARG‘ONA POLITEXNIKA INSTITUTI HUZURIDAGI ILMIY
DARAJALAR BERUVCHI PhD.03/27.02.2020.FM.106.01 RAQAMLI ILMIY
KENGASH**

AJINIYOZ NOMIDAGI NUKUS DAVLAT PEDAGOGIKA INSTITUTI

XAJIBAYEV DO‘SMUXAMMAD G‘ANIYEVICH

**KUPRATLARNING PARDA VA HAJMIY NAMUNALARI
O‘TAO‘TKAZUVCHANLIK XOSSALARIDA POLARON
SAMARASI**

01.04.07 – Kondensirlangan holat fizikasi

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

Farg‘ona – 2025

Fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida № B2023.3.PhD/FM924 raqami bilan ro'yxatga olingan

Dissertatsiya Ajiniyoz nomidagi Nukus davlat pedagogika institutida bajarilgan.

Dissertatsiya avtoreferati uch tilda (o'zbek, rus, ingliz (rezyume)) Ilmiy kengash veb-sahifasi (www.ferpi.uz) va «Ziyonet» axborot-ta'lim portalida (www.ziyonet.uz) joylashtirilgan.

Ilmiy rahbar:

Yavidov Bahram Yangibaevich

fizika-matematika fanlari doktori, dotsent

Rasmiy opponentlar:

Jumayev Mustaqim Rofiyevich

fizika-matematika fanlari doktori,
professor

Sobirov Maxmud Mamarasulovich

fizika-matematika fanlari nomzodi, dotsent

Yetakchi tashkilot:

O'zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasining Yadro fizika instituti

Dissertatsiya himoyasi Farg'ona politexnika instituti huzuridagi PhD.03/27.02.2020.FM.106.01 raqamli Ilmiy kengashning 2025-yil _____ soat _____ dagi majlisida bo'lib o'tadi. (Manzil: 150107, Farg'ona shahar, Farg'ona ko'chasi 86-uy. Tel. (+99873) 241-12-06; факс (+99873) 241-12-06; e-mail: uzferfizika@mail.ru).

Dissertatsiya bilan Farg'ona politexnika institutining Axborot-resurs markazida tanishish mumkin (_____ raqami bilan ro'yxatga olingan). (Manzil: 150107, Farg'ona shahar, Farg'ona ko'chasi 86-uy. Tel. (+99873) 241-12-06).

Dissertatsiya avtoreferati 2025-yil “ ” _____ kuni tarqatildi.
(2025-yil “ ” _____ dagi _____ raqamli reestr bayonnomasi)

N.X. Yuldashev

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

B.J. Axmadaliyev

Ilmiy darajalar beruvchi ilmiy
kengash ilmiy kotibi f-m.f.b.f.d (PhD)

S.M. Otajonov

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

KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasining annotatsiyasi)

Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati. Bugungi kunda jahonda samarali energiya manbalarini topish, energiya olishning samarali usullarini ishlab chiqish hamda energiyani saqlash va tashish kabi muammolar o'ta dolzarb bo'lib qolmoqda. Elektr o'tkazuvchanligi yuqori bo'lgan yangi materiallarning kashf etilishi va mavjud materiallar elektrofizikaviy xossalarining yanada takomillashtirilishi mazkur muammolarning yechimlaridan biri sifatida ko'rilmogda. Xususan, yuqori haroratli o'tao'tkazuvchan (YuHO'O') mis-kislorod birikmalari (kupratlar) energiya tejamkor texnologiya yaratishda istiqbolli ko'rilmogda. Kupratlar YuHO'O' kondensirlangan muhitlar fizikasida mana qariyb 40 yildan beri faol tadqiqot ob'yekti hisoblanadi. Keyingi yillar davomida kupratlar YuHO'O' xossalari tadqiq qilinishining yanada ortishi ularning amaliyotga keng kirib borishiga bog'liq. Jumladan, o'zining noyob xossalari sabab, hozirda, kupratlar mikro- va nanoelektronika qurilmalari (mikroto'lqin filtrlari, aralashtirgichlar, antennalar), magnetik qurilmalar (MRT qurilmasi, zarralar tezlatgichlari, energiya saqlash tizimlari), sezgichlar (magnit maydon sezgichlari, yuqori chastotali elektromagnit to'lqin generatorlari) va 2-avlod o'tao'tkazgichlar tayyorlashda ishlatilmoqda. Shuningdek, istiqbolli bashoratlarga ko'ra YuHO'O' lar yaqin kelajakda kvant kompyuterlarining asosini tashkil qiluvchi kvant protsessorlarini ishlab chiqishda keng qo'llanishi mumkin. YuHO'O' larning fan, texnika va ishlab-charishning barcha sohalarida keng qo'llashni taqozo qiluvchi eng asosiy sabablardan biri bu jahonda mavjud an'anaviy energiya manbalarini tabora kamayib borishi va shu sabab energiya tejamkor va ekologik toza texnologiya asosida faoliyat yuritishga o'tish hisoblanadi.

So'ngi yillar davomida dunyoning rivojlangan mamlakatlari ilmiy dargohlarida YuHO'O' sohasida olib borilgan ilmiy-tadqiqot ishlar va erishilgan natijalarga qaramay, kupratlarga oid hanuz o'z yechimini topmagan qator muammolar ham mavjudki, ular hal qilinmay kupratlardan amaliyotda keng qamrovli foydalanishni tez sur'atlarda rivojlantirib bo'lmayapti. Shunday muammolar qatoriga kupratlar YuHO'O' ning tugallangan nazariyasi yo'qligini, mavjud nazariy modellar esa kristal struktura o'zgarishi natijasida kupratlar YuHO'O' xossalari o'zgarishini to'liq tushuntirib berolmasligini misol qilib keltirish mumkin. Xususan, kupratlar kristal strukturasiidagi CuO_2 tekisligi va apikal kislorod orasidagi masofa o'zgarishi kupratlar YuHO'O' xossalarini belgilashda muhim ahamiyat kasb etishi aniqlanganiga qaramay, hanuzgacha, kupratlar hajmiy namunalari va yupqa pardalari, YuHO'O' kritik haroratining shu masofaga qanday bog'liqligini tavsiflovchi, kupratlardagi kuchli elektron-fonon ta'sirlashuvini inobatga olgan, nazariy model mavjud emas. Mavjud nazariy modellar magnit ta'sirlashuviga asoslangan bo'lib, ularda tajribalar va kupratlarning ko'pchilik xossalarida o'zini namoyon qiladigan, kuchli elektron-fonon ta'sirlashuvi ya'ni polaron samarasi inobatga olinmagan. Shu sabab, kupratlar, hajmiy namunalari va yupqa pardalari, YuHO'O' xossalarida polaron samarasining nazariy tadqiq etilishiga zarurat mavjud. Bunda, kupratlar kristal strukturasiidagi CuO_2 tekisligi va apikal kislorod orasidagi masofa o'zgarishi kupratlarda zaryad tashuvchisi massasi, kupratlar

hajmiy namunalari YuHO‘O‘ kritik harorati va kupratlar yupqa pardasi qalinligining parda YuHO‘O‘ kritik harorati qiymatlariga ta’sirini nazariy tadqiq qilish o‘ta dolzarb hisoblanadi.

Respublikamizda energiya tejamkor materiallarni kashf etish, mavjudlaridan foydalanish va istiqbollarini kengaytirish yordam beradigan yangi texnologiyalarni yaratish bo‘yicha tadqiqotlar otkazish va ularni amalda qo‘llash bo‘yicha keng ko‘lamli chora tadbirlar amalga oshirilmoqda . Davlatimiz raxbari tomonidan chiqarilayotgan farmonlarda ham energiya tejamkor materiallardan foydalanish va yashil energitikaga o‘tishga e’tibor qaratilmoqda. Xususan, 2022-2026-yillarda Yangi O‘zbekistonni rivojlantirish strategiyasida “... iqtisodiyotni elektr energiyasi bilan uzluksiz ta’minlash, hayotning barcha sohalariga “Yashil iqtisodiyot” texnologiyalarini faol tatbiq etish, energiya samaradorligini oshirish...”¹ bo‘yicha aniq vazifalar belgilab qo‘yilgan. Ushbu vazifalarni amalga oshirishda elektr o‘tkazuvchanligi yuqori bo‘lgan yangi materiallarni kashf etish yoki mavjudlarini takomillashtirish, jumladan kupratlar, hajmiy namunalari va yupqa pardalari, YuHO‘O‘ xossalarida polaron samarasinining nazariy tadqiq qilish muhim hisoblanadi.

O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022-yil 28-yanvardagi PF-60-son 2022-2026 yillarga moljallangan «Yangi O‘zbekistonning taraqqiyot strategiyasi to‘g‘risidagi» Farmoni, 2019-yil 22-avgustdagi PQ-4422-son «Iqtisodiyot tarmoqlari va ijtimoiy sohaning energiya samaradorligini oshirish, energiya tejoychi texnologiyalarni joriy etish va qayta tiklanuvchi energiya manbalarini rivojlantirishning tezkor chora tadbirlari to‘g‘risida», 2020-yil 29-oktabrdagi PF-6097-sonli «Ilm-fanni 2030-yilgacha rivojlantirish konsepsiyasini tasdiqlash to‘g‘risida»gi Farmoni, 2021-yil 19-martdagi PQ-5032-son «Fizika sohasidagi ta’lim sifatini oshirish va ilmiy tadqiqotlarni rivojlantirish chora-tadbirlari to‘g‘risida»gi Qarorlari hamda mazkur faoliyatga tegishli boshqa me’yoriy-huquqiy hujjatlarda belgilangan vazifalarni amalga oshirishga ushbu dissertatsiya tadqiqoti muayyan darajada xizmat qiladi.

Tadqiqotning respublika fan va texnologiyalari rivojlanishining ustuvor yo‘nalishlarga mosligi. Dissertatsiya ishi O‘zbekiston Respublikasi fan va texnologiyalari rivojlanishining II “Energetika, energotejamkorlik va muqobil energiya manbalari” ustuvor yo‘nalishiga mos holda olib borilgan.

Muammoning o‘rganilganlik darajasi. Kupratlardagi o‘ta o‘tkazuvchanlik muammosini dunyoning ko‘plab olimlari nazariy yo‘l bilan va tajribalar orqali o‘rganishgan. Jumladan: chet el olimlaridan C. Chen (Xitoy), H.Q. Lin (Xitoy), T.L. Meyer (AQSH), I. Zaytseva (Polsha), L. Chen (AQSh), H.L.Kao (AQSH), M.Z.Cieplak (Polsha), L.Howald (Shvetsariya), J. P. Locquet (Shvetsariya), H. Oyanagi (Yaponiya), M. Naito (Yaponiya), H. Sato (Yaponiya), J. Bonča (Sloveniya), M. Zoli (Germaniya), K.W.Post (AQSH), M. Berciu (Kanada), A.S. Alexandrov (Angliya), P.E. Kornilovitch (AQSH), X.J. Chen (Shvetsariya), R. Khasanov (Shvetsariya) ishlarida o‘rganilgan. Yurtimizda esa S. Djumanov, B.

¹O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022-yil 28-yanvardagi “2022-2026-yillarda yangi O‘zbekistonni rivojlantirish strategiyasi to‘g‘risida”gi PF-60-son Farmoni

Yavidov, P.J. Baymatov, B. Abdullaev, B. Narimbetov, D. Gulamova, D. Djurayev, M. Ibragimova, U. Kurbanov, Sh. Djumanov, O. Ganiev, E. Karimboev, A. Jalekeshov kabi olimlar kupratlardagi o'taotkazuvchanlikning turli xossalarini o'rganish yo'lida tadqiqotlar olib bormoqdalar.

Hozirgi vaqtda YuHO'O' ning bir nechta nazariy modellari mavjud bo'lib, bular kengaytirilgan Holstein-Hubbard modeli, Ginzburgning eksiton modeli, Hubbard modeli, Holstein-Hubbard modeli, Mott-Hubbard modeli, Landauning fermi-suyuqlik modeli, t-J modeli, Andersonning rezonansli valent bog'lanishlar modeli va boshqalar. Ammo, umume'tirof etilgan nazariya mavjud emas. Shu bilan birga, ko'pchilik tajribalar elektron-fonon o'zaro ta'sirlashuvi YuHO'O' kupratlarda boshqa ta'sirlashuvlarga nisbatan kuchliroq ekanligini va zaryad tashuvchilari o'zlarini (bi)polaronlar kabi tutishlarini ko'rsatmoqda. Bularni hisobga olgan holda, polaron yondashuvi asosida to'plangan tajriba natijalarini sharhlash va nazariy jihatdan tushuntirish zarurati mavjud.

Dissertatsiya tadqiqotining dissertatsiya bajarilgan oliy ta'lim muassasining ilmiy-tadqiqot ishlari rejalari bilan bog'liqligi. "Ilm-fanni 2030-yilgacha rivojlantirish konsepsiyasini tasdiqlash to'g'risida" gi O'zbekiston Respublikasi Prezidentining 2020-yil 29-oktabr kungi PF-6097-sonli farmoni ijrosini taminlash rejalari muvofiq "Istiqbolli materiallarda elektron g'alayonishlar xossalarini o'rganish" mavzusi (Ajiniyoz nomidagi Nukus davlat pedagogika instituti Ilmiy Kengashining 2021-yil 30-noyabr kungi 4-sonli bayonnomasi) doirasida olib borilgan.

Tadqiqotning maqsadi. Mis-kislorod tekisligi va apikal kislorod joylashuvi strukturaviy o'zgarishlari bilan bog'liq (bi)polaron samarasining kupratlar parda va hajmiy namunalari o'taotkazuvchanlik xossalariga ta'sirini nazariy tadqiq qilishdan iborat.

Tadqiqotning vazifalari quyidagilardan iborat:

La-asosli kupratlarda polaron parametrlarining kristal panjara tarangliklari bilan bog'liqliklarini o'rganish;

$YBa_2Cu_4O_8$ kupratida polaron massasini hisoblash va tajriba natijalari bilan taqqoslash;

Kuprat pardalarida polaron parametrlariga parda qalinligi samarasi nazariyasini taklif qilish;

Pardasimon *La*- asosli kupratlari T_c ga parda qalinligi samarasini o'rganish;

Bir qatlamli kupratlar T_c ning mis kislorod tekisligi va apikal kislorod orasidagi masofaga bog'likligini o'rganish;

Bir mis kislorod tekisligiga ega kupratlar T_c ning apikal kislorod joylashuviga bog'likligini sonli o'rganish.

Tadqiqotning ob'yekti. Kuchli tas'irlovchi elektron-fonon tizim, polaron va bipolaron, $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, $YBa_2Cu_4O_8$, $HgBa_2CuO_4$, $Tl_2Ba_2CuO_6$, $Bi_2Sr_2CuO_6$.

Tadqiqotning predmeti. Elektron-fonon ta'sirlashishi (EFT), zaryad tashuvchisi (polaron)ning massasi, qalinlik samarasi, bir o'qli taranglik ta'siri, bipolaronlarning Boze-Eyshteyn kondensatsiyasi (BEK), o'taotkazuvchanlik.

Tadqiqotning usullari. Kengaytirilgan Holstein-Hubbard modeli, o'tao'tkazuvchanlikning bipolaron yondashuvi, ikkilamchi kvantlash usuli, hisoblashning sonli usullari.

Tadqiqotning ilmiy yangiligi quyidagilardan iborat:

birinchi marta yuqori haroratli o'tao'tkazuvchan $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ kupratida zaryad tashuvchi massasini, apikal kisloroqning kristal panjarada mis-kislorod tekisligiga nisbatan joylashuvini inobatga olgan holda, o'tao'tkazuvchanlikning bipolaron yondashuvi negizida hisoblash imkonini beruvchi nazariy model ishlab chiqilgan;

birinchi marta o'tao'tkazuvchanlikning bipolaron modeli negizida yuqori haroratli o'tao'tkazuvchan kuprat pardalari o'tao'tkazuvchlik kritik harorati (T_c) ning parda qalinligi hamda parda va taglik panjara doimiylarining o'zaro farqiga bog'liqligini tavsiflovchi nazariy model ishlab chiqilgan;

LSAO (STO) taglikda o'stirilgan yuqori haroratli o'tao'tkazuvchan LSCO kuprati pardasining o'tao'tkazuvchanlik kritik harorati (T_c) qiymati parda qalinligi kamayishi bilan ortishi (kamayishi) o'tao'tkazuvchanlikning bipolaron modeli negizida birinchi marta asoslangan;

birinchi marta bir mis kislorod tekisligiga ega yuqori haroratli o'tao'tkazuvchan $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$, $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_6$, $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ kupratlarining o'tao'tkazuvchlik kritik haroratining turlicha bo'lishi, bipolaron yondashuvi doirasida, apikal kisloroqning kristal panjarada mis-kislorod tekisligiga nisbatan joylashuvini inobatga olgan holda, asoslangan.

Tadqiqotning amaliy natijalari quyidagilardan iborat:

LSCO yupqa pardasidagi polaron massasining kristal panjarada vujudga keluvchi bir o'qli tarangliklarga bog'liqligi o'rganilgan;

YBCO kupratida zaryad tashuvchi massasi hisoblangan;

LSCO yupqa pardasi O'O' kritik harorati T_c ning parda qalinligiga bog'liqligini tavsiflovchi nazariya ishlab chiqilgan;

Bir mis kislorod tekisligiga ega kupratlar O'O' kritik harorati T_c apikal kislorod joylashuviga bog'liq ravishda tushuntirilgan.

Tadqiqot natijalarining ishonchliligi. Kondensatsiyalangan moddalar fizikasining sinovdan o'tgan zamonaviy nazariy usullaridan, xususan, kengaytirilgan Holstein-Hubbard modeli va Bose-Eynsteyn kondensatsiyasi tamoyili asosida qurilgan bipolaron suyuqligi o'tao'tkazuvchanligi (o'taoquvchanligi) nazariyasidan foydalanilganligi hamda nazariy jihatdan olingan natijalar va xulosalar eksperimental ma'lumotlariga mos kelishi va kupratlarda aniqlangan asosiy qonuniyatlarga muvofiqligi bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati. Tadqiqot natijalarining ilmiy ahamiyati shundan iboratki, olingan natijalar kupratlar $\text{YuHO}'\text{O}'$ mikroskopik nazariyasini ishlab chiqishda foydali bo'ladi. Kupratlar $\text{YuHO}'\text{O}'$ xossalari, zaryad tashuvchisi massasi va o'tao'tkazuvchanlik kritik harorati qiymatlari polaron samarasi orqali kristal strukturasi bevosita bog'liq o'zgaradi. Xususan, kupratlar hajmiy namunalari va yupqa pardalari $\text{YuHO}'\text{O}'$ xossalari mis-kislorod tekisligi va apikal kislorod orasidagi masofa bilan aniqlanadi. Bu esa o'z navbatida kupratlar fizikaviy xossalari kristal strukturasi bilan bog'lovchi nazariy bilimlarni takomillashtirishda yordam beradi.

Tadqiqot natijalarining amaliy ahamiyati shundan iboratki, turli tagliklarda o‘stirilgan kuprat yupqa parda qalinligining parda o‘taotkazuvchanlik kiritik harorati qiymatiga ta’sirini o‘rganishdan nazariy modellashtirishda hamda amaliy materialshunoslikda foydalanish mumkin.

Tadqiqot natijalarining joriy qilinishi. Kupratlarning parda va hajmiy namunalari o‘taotkazuvchanlik xossalari polaron samarasi bo‘yicha olingan natijalar asosida:

o‘taotkazuvchanlik kritik haroratining parda qalinligiga bog‘liqligi bo‘yicha olingan natijalar Bi-2212 YuHO‘O‘ yupqa pardalarni zol-gel metodi orqali o‘stirish mexanizmini taglik ta’siri orqali takomillashtirish va pardalarning o‘taotkazuvchanlik xususiyatlarini optimallashtirish imkonini bergan (International Journal of Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects **684**, 133134, 2024);

o‘taotkazuvchanlikning bipolaron modeli negizida $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ kupratida zaryad tashuvchisi massasini tushuntirish, kuprat pardalari o‘taotkazuvchanlik kritik haroratining parda qalinligiga bog‘liqligini tavsiflovchi taklif qilingan nazariy modeldan va LSCO pardasi o‘taotkazuvchanlik kritik haroratining parda qalinligiga bog‘liqligi bipolaron modeli negizida sifat va miqdoriy tushuntirilishi kabi ilmiy yangiliklaridan O‘zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasi Yadro fizikasi institutida 2020-2024 yillarga mo‘ljallangan ilmiy-tadqiqot ishlari dasturi doirasida «Legirlangan YuHO‘O‘-kupratlarning elektron nazariyasi va uni dielektrik/metall va o‘ta o‘tkazuvchanlik fazalarining hosil bo‘lishi va nanomasshtabda bo‘linishini tadqiq qilish uchun qo‘llash» mavzusidagi fundamental ilmiy tadqiqot dasturining ilmiy natijalarini taqqoslashda foydalanilgan. (O‘zR FA 2024-yil 15-noyabr №2/1255-2555 sonli ma’lumotnomasi). Mazkur ilmiy natijalardan foydalanish Y124 kupratida zaryad tashuvchi massasini aniqlash va LSCO yupqa pardasi o‘taotkazuvchanlik kritik haroratini parda qalinligi bo‘yicha aniqlash imkonini bergan.

Tadqiqot natijalarining aprobatsiyasi. Dissertatsiya ishining asosiy natijalari 8 ta xalqaro va respublika miqyosidagi anjumanlarda muhokamadan o‘tkazilgan.

Tadqiqot natijalarining e‘lon qilinganligi. Dissertatsiya mavzusi bo‘yicha 14 ta ilmiy ish chop etilgan. Shulardan O‘zbekiston Respublikasi Oliy ta’lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasi tomonidan doktorlik dissertatsiyalari asosiy ilmiy natijalari chop etish uchun tavsiya etilgan ilmiy jurnallarda 6 ta maqola, shundan 1 tasi Scopus bazasidagi jurnalda nashr etilgan.

Dissertatsiya ishining tuzilishi va hajmi. Dissertatsiya ishi kirish, to‘rt bob, xulosa, e‘lon qilingan ishlar ro‘yxati, foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxati va ilovadan iborat. Dissertatsiyaning umumiy hajmi 120 betni tashkil qiladi.

DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

Dissertatsiyaning **kirish** qismida ilmiy izlanish mavzusining dolzarbligi va zarurati tushuntirilgan. O‘zbekiston Respublikasi fan va texnologiyalari rivojlanishining ustuvor yo‘nalishlariga mosligi keltirilgan, tadqiqotning ilmiy

yangiligi, olingan amaliy natijalari ishonchliligi asoslangan. Muammoning o'rganilganlik darajasi, tadqiqotning maqsadi va vazifalari, tadqiqot ishining approbatsiyasi, tadqiqot natijalarining e'lon qilinganligi hamda dissertatsiyaning tuzilishi va hajmi haqida qisqacha ma'lumotlar keltirilgan.

Dissertatsiyaning **“O'tao'tkazuvchanlikning umumiy xossalari”** deb nomlangan birinchi bobida adabiyotlarda e'lon qilingan natijalar sharhi berilgan. Ushbu adabiyotlar ma'lumotlarini tahlil qilish asosida dissertatsiya ishining maqsad va vazifalari belgilangan.

Dissertatsiyaning **“La- asosli kuprat pardalarida va YBaCu₄O₈ kupratida polaron massasi”** deb nomlangan ikkinchi bobida panjara polaronlari nazariyalari va kengaytirilgan Holstein-Hubbard modeli va uning kupratlarda qo'llanilishi berilgan.

Kupratlar kuchli bog'langan elektron (yoki kovak) hamda kuchli bog'langan elektron-fonon tizimi sifatida tavsiflanadi. Bunday tizimlarni o'rganish uchun kengaytirilgan Holstein-Hubbard modeli qulay hisoblanadi. Ushbu modelda tizimning to'liq gamiltoniani quyidagicha ifodalanadi:

$$H = H_e + H_{ph} + H_V + H_{e-ph} \quad (1)$$

1- formuladagi H_e qo'shni panjara tugunlari orasidagi elektronning sakrashini tavsiflaydi va u quyidagi ko'rinishda yoziladi:

$$H_e = \sum_{n \neq n'} T(n - n') c_n^\dagger c_{n'}, \quad (2)$$

Bu yerda $T(n - n')$ – zaryad tashuvchilarning sakrash integrali, n – va n' – qo'shni tugunlar orasidagi elektronni yaratish (yo'q qilish) operatori hisoblanadi.

1- formuladagi H_{ph} fononlar quyi tizimining gamiltonianini tavsiflaydi va u quyidagi ko'rinishda yoziladi:

$$H_{ph} = \sum_{q,\alpha} \hbar \omega_{q\alpha} (d_{q\alpha}^\dagger d_{q\alpha} + 1/2). \quad (3)$$

Bu yerda $\omega_{q\alpha}$ – fonon chastotasini bildiradi. $d_{q\alpha}^\dagger (d_{q\alpha})$ – yaratilish (annigilyatsiya) $\alpha (\alpha = x, y, z)$ qutblanish va to'liqin vektori \mathbf{q} bo'lgan fonon operatori hisoblanadi.

1 - formuladagi H_V n va n' panjara tugunlarida joylashgan elektronlarning Kulon kuchlari orqali o'zaro ta'sir energiyasining gamiltonianini bildiradi va u quyidagi shaklda yoziladi:

$$H_V = \sum_{n \neq n'} V_C(n - n') c_n^\dagger c_n c_{n'}^\dagger c_{n'}, \quad (4)$$

Bunda $V_C(\mathbf{n} - \mathbf{n}')$ – n va n' tugunlarda joylashgan ikkita elektronning Kulon potensial energiyasini tavsiflaydi. 1 - formuladagi H_{e-ph} elektron-fonon o'zaro ta'sir gamiltonianini ifodalaydi va u quyidagicha yoziladi:

$$H_{e-ph} = \sum_{nm\alpha} f_{m\alpha}(\mathbf{n}) c_n^\dagger c_n \xi_{m\alpha} \quad (5)$$

Bu yerdagi $f_{m\alpha}(\mathbf{n})$ – \mathbf{n} tugundagi elektronni \mathbf{m} tugundagi ion bilan “zichlik-siljish” tipidagi bog'lanish kuchi, $\xi_{m\alpha}$ – \mathbf{m} tugundagi ion tebranishlarining normal koordinatasi. $\xi_{m\alpha}$ – ni esa fonon yaratish va yo'q qilish operatori orqali quyidagicha ifodalash mumkin:

$$\xi_{m\alpha} = \sum_q \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{q\alpha}}} e^{iqm} d_{q\alpha}^\dagger + h.c. \right) \quad (6)$$

bunda N – tugunlar soni va M – ionning massasi. Kengaytirilgan Holstein-Hubbard modeli elektron korrelyatsiyalarni, shuningdek, elektron-fonon o‘zaro ta’sirining uzoq masofali xususiyatlarini hisobga olish imkonini beradi. Model doirasida kupratlardagi polaron massasi quyidagi formula orqali hisoblanadi:

$$m_p = m^* \cdot e^{g^2} \quad (7)$$

Bu yerda m^* - zaryad tashuvchisining o‘tkazuvchanlik zonasidagi massasi, g^2 - polaron massasi eksponensial ortishi koeffitsienti. Kupratlarning zanjir panjarasi modelida g^2 - polaron massasi eksponensial ortishi koeffitsienti quyidagicha aniqlandi:

$$g^2 = \gamma \frac{E_p}{\hbar\omega} \quad (8)$$

bu yerda γ –sonli koeffitsient va E_p – polaron energiyasi bo‘lib, ular quyidagi formulalar yordamida hisoblanadi:

$$\gamma = 1 - \frac{\sum_m f_m(n) f_m(n+a)}{\sum_m f_m^2(n)} \quad (9)$$

$$E_p = \frac{1}{2M\omega^2} \sum_m f_m^2(n) \quad (10)$$

8-formulaga 9-10-formulalarni olib borib qo‘yish natijasida g^2 - polaron massasi eksponensial ortishi koeffitsienti quyidagicha ifodalashimiz ham mumkin:

$$g^2 = \frac{1}{2M\hbar\omega^3} \sum_{\vec{m}} [f_{\vec{m}}^2(\vec{n}) - f_{\vec{m}}(\vec{n}) \cdot f_{\vec{m}}(\vec{n} + \vec{a})] \quad (11)$$

Bu yerda M – apikal kislorod massasi, $\hbar\omega$ - kupratlarga xos fonon energiyasi bo‘lib, odatda u 75 meV deb qabul qilinadi. $f_{\vec{m}}(\vec{n})$ - EFT kuchi bo‘lib, qandaydir ma’noda kuprat tarkibidagi CuO_2 tekisligining \vec{n} -tugunidagi zaryad tashuvchisining \vec{m} -tugundagi apikal kislorod ioni bilan ta’sirlashuvini tavsiflaydi va uning analitik ifodasi quyidagi formula bilan aniqlanadi:

$$f_{\vec{m}}(\vec{n}) = \frac{kc(1-\varepsilon_c)}{(|(\vec{n}-\vec{m})(1-\varepsilon_a)|^2 - (c(1-\varepsilon_c))^2)^{3/2}}. \quad (12)$$

Bu yerda, k – qandaydir doimiy, a - CuO_2 tekislidagi a - yoki b -o‘qlar bo‘yicha panjara davri, c – esa, kuprat kristal panjarasining ab -tekislikka tik yo‘nalishdagi davri, ε_a (ε_c) – panjaraning a - (c -) davri nisbiy deformatsiyasi (tarangligi). Kristal panjara davrlari tarangliklari

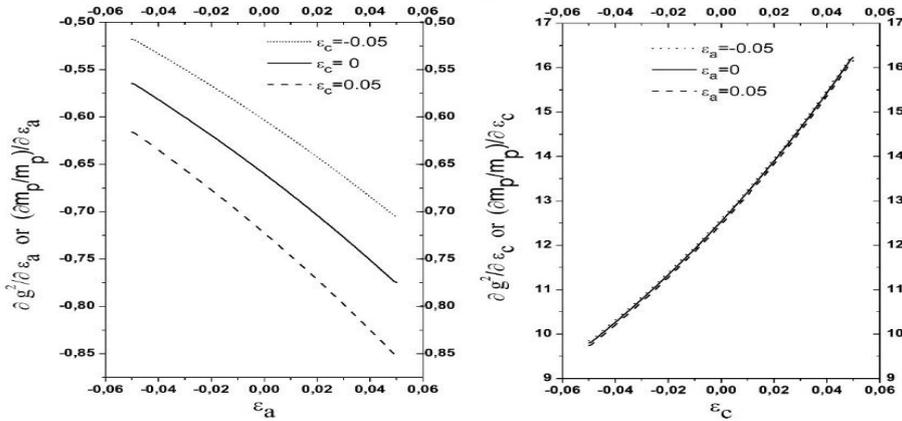
$$\varepsilon_a = \frac{a_0 - a_t}{a_0} \quad \text{va} \quad \varepsilon_c = \frac{c_0 - c_t}{c_0}. \quad (13)$$

formula bo‘yicha aniqlanadi. Bu yerda, a_0 - va c_0 (a_t - va c_t)– panjaraning taranglashmagan (taranglashgan) davrlari. Ya’ni musbat taranglik siqilishini, manfiy taranglik esa cho‘zilishni anglatadi. Yuqoridagi munosabatlardan polaron massasidan bir o‘qli taranglik bo‘yicha olingan hosilasini aniqlash mumkin ($i=a,c$):

$$\frac{1}{m_p} \frac{\partial m_p}{\partial \varepsilon_i} = \frac{\partial g^2}{\partial \varepsilon_i}. \quad (14)$$

$\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ kuprat birikmasi tetragonal kristal strukturaga ega deb qaraymiz va panjara davrlari $a=3.8370 \text{ \AA}$ va $c=27.1844 \text{ \AA}$ ga teng. CuO_2 tekisligidan tashqaridagi

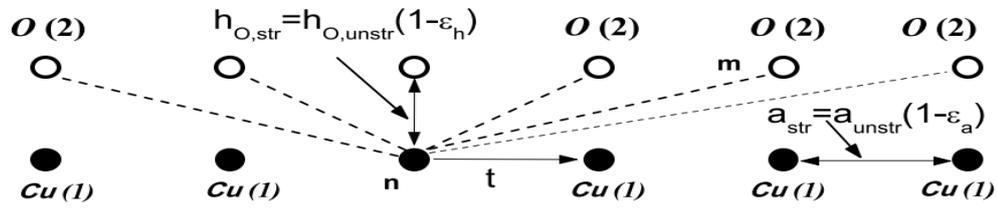
apikal kislorod vaziyati $z=0.0522$ bilan aniqlanadi. U holda Cu-O_{ap} masofa $h_o=1.4190 \text{ \AA}$ ga teng bo'ladi. Yuqoridagi (12) va (13) formulalarda biz c o'rniga h_o ni ishlatamiz. Bir o'qli taranglik bo'yicha polaron massasidan olingan hosilaviy qiymatlar 1-rasmda aks ettirilgan. Rasmdan ko'rinib turganidek bir o'qli taranglik bo'yicha polaron massasidan olingan hosilalarning o'zlari taranglikar funksiyalaridir. Kristal panjaraning a -o'qining siqilishi (cho'zilishi), $(1/m_p)\partial m_p/\partial \varepsilon_a < 0$ bo'lganlikdan, polaron massasining kamayishi (ortishi) ga olib keladi. Xuddi, shunday, c -o'qining siqilishi (cho'zilishi), $(1/m_p)\partial m_p/\partial \varepsilon_c > 0$ bo'lganlikdan, polaron massasining ortishi (kamayishi) ga olib keladi. Bu hosilalarning a - va c -o'qlarga mos ifodalari uchun quyidagilar son qiymatlarni topamiz: $(1/m_p)\partial m_p/\partial \varepsilon_a \approx -2$ va $(1/m_p)\partial m_p/\partial \varepsilon_c \approx 6.5$. Ushbu hisoblash kengaytirilgan Holstein-Hubbard modeli negizida polaron massasining bir o'qli taranglik ta'sirida o'zgarishini o'rgandik. Hisoblash natijalari polaron massasi a – va c – o'qlari bo'yicha yo'nalgan bir o'qli taranglik ta'sirida o'zgarishini ko'rsatadi.



1-rasm. Bir o'qli taranglik ε_i ($i=a,c$) bo'yicha polaron massasidan olingan hosilalar.

Topilgan natijalar $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ va boshqa kuprat birikmalarining taranglik ta'siridagi xossalari ta'lqin qilishda ishlatilishi mumkin.

Kupratlar panjarasining zanjirli modeli quyida 2-rasmda ko'rsatilgan va u quyidagicha tavsiflanadi: CuO_2 tekisligiga oid $\text{Cu}(1)$ ionlar zanjiri bo'ylab harakatlanuvchi zaryad tashuvchisi $\text{O}(2)$ apikal ionlar bilan 12-formuladagi $f_{\vec{m}}(\vec{n})$ kuch (punktir chiziqlar) orqali ta'sirlashadi. t -zaryad tashuvchisining tugunlararo



2-rasm. Kupratlar panjarasining zanjirli modeli.

sakrash integrali. h_o - $\text{Cu}(1)$ va apikal kislorod $\text{O}(2)$ orasidagi boglanish uzunligini tavsiflaydi va atom joylashuvi parametri z va c dan foydalanib $h_o = c * z$ formula yordamida hisoblanadi, bu yerdagi ε_a - va ε_h - lar esa panjarning mos ravishda a_0 - va h_0 - lar nisbiy deformatsiyasi (tarangligi). 12-formulani quyidagicha o'zgartirsak bo'ladi:

$$f_{\vec{m}}(\vec{n}) = \frac{kh_o(1-\varepsilon_h)}{(|(\vec{n}-\vec{m})(1-\varepsilon_a)|^2 - (h_o(1-\varepsilon_h))^2)^{3/2}} \quad (15)$$

Panjara doimiylari nisbiy deformatsiya (taranglik) larini $\varepsilon_a = (a_{unst} - a_{str})/a_{unst}$ va $\varepsilon_h = (h_{o,unst} - h_{o,str})/h_{o,unst}$ formulalar orqali aniqlaymiz. Bu ifodalardagi “unst” va “str” mos ravishda panjara doimiysi deformatsiyalanmagan (deformatsiyalangan) holatni tavsiflaydi. Ya’ni panjara doimiysining siqilishi (cho‘zillishi) musbat (manfiy) taranglik bilan tavsiflanadi. Elektron-fonon ta’sirlashish kuchli bo‘lganda adiabatik yaqinlashuvda polaron massasi haqida qo‘sh-potensial o‘ra masalasini qarab xulosa qilishimiz mumkin. Xususan, qo‘sh-potensial o‘radagi zaryad tashuvchisi asosiy energetik sathi parchalanishi

$$\Delta E = \Delta \cdot e^{-g^2} \quad (16)$$

formula orqali topib, keyin adiabatik polaron massasi haqida ma’lumotni $m = \hbar^2/2a^2\Delta E$ munosabatdan aniqlasak bo‘ladi. (16) munosabatda

$$\Delta = (\hbar\tilde{\omega}/\pi) \cdot \sqrt{E_p\kappa^{3/2}/2\hbar\omega} \cdot \left(1 - \sqrt{1 - (E_p\kappa^{3/2}/2\hbar\omega)^{-1}}\right), \quad (17)$$

$$g^2 = (E_p\kappa^{1/2}/2\hbar\omega) \cdot \sqrt{1 - (E_p\kappa^{1/2}/2\hbar\omega)^{-1}}, \quad (18)$$

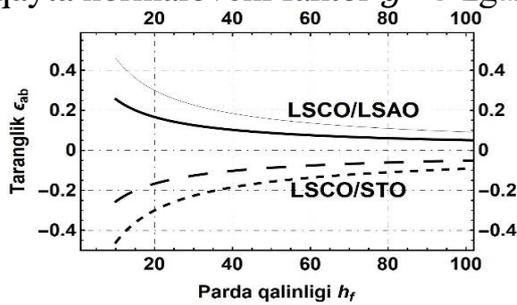
$\tilde{\omega} = \omega\kappa^{1/2}$ – ionlarning qayta normalashgan chastotasi, $\kappa = 1 - 1/\lambda^2$, $\lambda = E_p/2t$ – ikki tugun masalasida elektron-fonon ta’sirlashishini tavsiflovchi ko‘rsatgich bo‘lib elektron-fonon ta’sirlashish doimiysi deb ataladi. Odatda, kuprat pardalari biror taglik (LaSrAlO₄, SrTiO₃, MgO va h.k.) da o‘stiriladi. Parda va taglik panjara doimiylari o‘zaro mos kelmasligi bois parda panjarasi taranglashgan (siqilgan yoki cho‘zilgan) holda bo‘ladi. Xususan, kuprat pardasi (001) yo‘nalishda o‘stirilganda CuO₂-tekislikda vujudga kelgan taranglikni quyidagicha hisoblash mumkin:

$$\varepsilon_{ab} = \frac{2\mu}{4\pi(1-\nu)\bar{B}} \cdot \frac{\ln(h_f/\bar{a})}{(h_f/\bar{a})}. \quad (19)$$

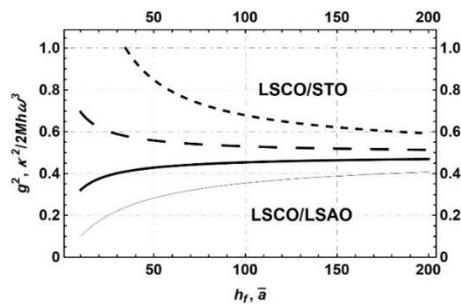
Bunda, \bar{B} - kupratning biaksial taranglik (elastik) moduli, μ - kuprat siljish moduli, ν - Poisson koeffitsienti, h_f - parda qalinligi va \bar{a} - kupratning CuO₂ tekisligi panjarasi doimiysi a va taglik panjarasi doimiysi a_s larning o‘rtachasi: $\bar{a} = (a + a_s)/2$. Taglikda o‘stirilgan kuprat pardasining faqat CuO₂ tekisligi taranglashib qolmay, balki c - o‘qi bo‘yicha panjara doimiysi ham Poisson samarasi tufayli taranglashadi. Agar kupratning c - o‘qi bo‘yicha taranglashgan va taranglashmagan panjara doimiylari, mos ravishda, c va c_0 bo‘lsa, u holda shu o‘q bo‘yicha panjara doimiysi tarangligi $\varepsilon_c = (c_0 - c)/c_0$ bilan aniqlanadi hamda ta’rifga binoan Poisson koeffitsienti $\nu = -\varepsilon_c/\varepsilon_{ab}$ munosabatdan topiladi. Kupratlar, kuchli anizotop va kvazi ikki o‘lchamli tuzulishga ega bo‘lganligi sabab, ε_c va ε_h lar o‘zaro teng bo‘lmasligi mumkin. Odatda, $\varepsilon_h > \varepsilon_c$. Tajribada, hatto, $\varepsilon_h \cong 2\varepsilon_c$ ekanligi aniqlangan. Yuqorida o‘rnatilgan munosabatlar yordamida, polaron massasining kuprat pardasi qalinligiga bog‘liqligini sifat va miqdor jihatdan o‘rganamiz.

Tadqiqot ob’yektlar sifatida LSAO va STO tagliklarda (001) yo‘nalishda o‘stirilgan LSCO pardalarini qaraymiz. Tajribalarning ko‘rsatishicha tadqiqot ob’jektini tashkil etuvchi moddalar kristal panjaralari doimiylari quyidagicha (nm): $a=0.37357$, $c=1.31973$, $h_o=0.241115$ (LSCO), $a=0.3756$ (LSAO) va $a=0.3905$ (STO)

), LSCO uchun Puasson koeffitsienti $\nu=0.272$, siljish moduli $\mu=67.4$ GPa va (001) yoʻnalishda oʻstirilgan LSCO pardaning biaksial taranglik (elastik) moduli $\bar{B}=248$ GPa. 18-formulaga muvofiq (001) yoʻnalishda oʻstirilgan LSCO/LSAO va LSCO/STO pardalar CuO_2 tekisligida vujudga kelgan taranglikning parda qalinligiga bogʻliqligi 3-rasmda tasvirlangandek boʻladi. 3-rasmda taranglik $\mu/2\pi\bar{B}$ birliklarda, parda qaliligi \bar{a} uzunlikda berilgan, yoʻgʻon va ingichka chiziqlar Puasson koeffitsientining 0.1 va 0.5 qiymatlariga mos. Puasson samarasi tufayli c -oʻqi panajara doimiysi ham mos ravishda h_f oʻzgarishi bilan oʻzgaradigan boʻladi. Natijada, h_f oʻzgarishi bilan LSCO/LSAO va LSCO/STO pardalaridagi polaron tizimi barcha parametrlari, jumladan noadiabatik yaqinlashuvda polaron massasini qayta normalovchi faktor g^2 oʻzgaradi.

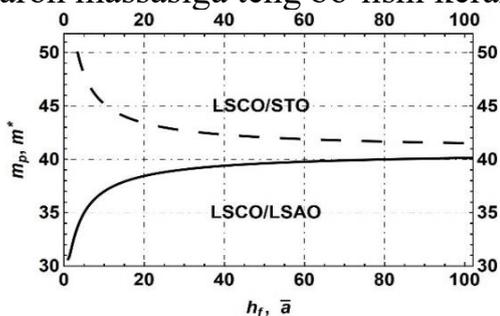


3-rasm. (001) yoʻnalishda oʻstirilgan LSCO/LSAO va LSCO/STO pardalar CuO_2 tekisligida vujudga kelgan taranglikning parda qalinligiga bogʻliqligi.

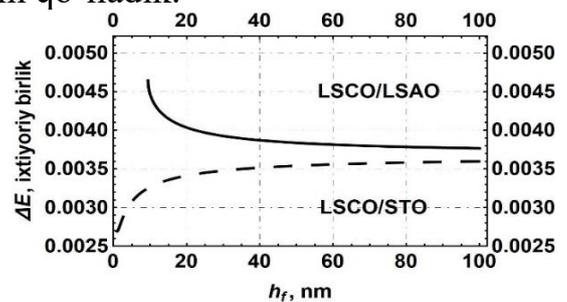


4-rasm. (001) yoʻnalishda oʻstirilgan LSCO/LSAO va LSCO/STO pardalar polaron tizimida massani qayta normalash faktorining h_f ga bogʻliqligi.

g^2 ni 11-formula, 15-formula va 19-formulalar orqali parda qalinligi h_f ga bogʻliq boʻladi (4-rasm). Oʻrganilayotgan tizimlarda noadiabatik polaron massasi pardalarda vujudga kelgan tarangliklarga (ϵ_{ab} , ϵ_c), lar orqali esa parda qalinligi h_f ga, bilvosita bogʻliq boʻladi. Bu bogʻliqlik 5-rasmda keltirilgan. “Polaron massasi-parda qalinligi” bogʻlanishidan koʻrinib turganidek, LSCO/LSAO va LSCO/STO pardalar qalinliklari kamayishi bilan, birinchi tizimda polaron massasi kamayadi, ikkinchi tizimda esa polaron massasi ortadi. Parda qalinligi LSCO panjara doimiylaridan nihoyatda katta boʻlganda, $h_f \gg a, b, c$, LSCO pardasi OʻOʻ xossalariga taglikning taʼsiri kuzatilmagan va oʻta qalin parda hajmiy manuma xossalariga ega. Shu sabab, biz yuqorida keltirilgan natijalarni olishda $h_f=500$ nm qalinlikdagi parda uchun ikkala tizimdagi polaron massalari hajmiy namunadagi polaron massasiga teng boʻlishi kerak shartini qoʻlladik.



5-rasm. (001) yoʻnalishda oʻstirilgan LSCO/LSAO va LSCO/STO pardalarda



6-rasm. (001) yoʻnalishda oʻstirilgan LSCO/LSAO va LSCO/STO pardalarda adiabatik polaronning qoʻsh-oʻradagi asosiy

polaron massasining parda qalinligiga bog'liqligi holati energiya sathining parchalanish ya'ni ΔE ning h_f ga bog'liqligi.

Ya'ni, $h_f=500$ nm qalinlikdagi parda uchun $\hbar\omega \approx 75$ meV, $E_p \approx 0.4$ eV va $m_p \approx 40m_e$ deb qabul qildik. Bunday ko'rsatgichlarga ega bipolaron gazi (suyuqligi) Boze-Eynshteyn kondensatsiyasi harorati $T_{BEC} \approx 36$ K ga teng va u tajribada kuzatilgan O'O' kritik haroratigan teng. LSCO da massalar anizotropiyasi $\gamma_m = \gamma_c/\gamma_{ab} \approx 160$ deb qabul qilib, $m_{ab} \approx 7.5m_e$ ekanligini topamiz. Oxirgi topilgan natija optimal legirlangan LSCO da topilgan $m_{ab} \approx 4.9m_e \pm 0.8m_e$ natijaga yaqin. Polaron massasining LSCO pardasi qalinligiga bog'liqligi adiabatik yaqinlashuvda ham 5-rasmda keltirilganga o'xshash bo'lishi kutiladi. Darhaqiqat, (16)-(19) munosabatlar yordamida olingan sonli ma'lumotlar, masalan $\hbar\omega/t = 0.8$ adiabatik yaqinlashuvda ham, polaron massasi parda qalinligiga xuddi noadiabatik yaqinlashuvdagidek bog'liq bo'lishi ko'rsatadi (6-rasm). Parda qalinligi kamayishi bilan LSCO/LSAO (LSCO/STO) tizimlarda qo'sh-o'radagi polaron asosiy energiyasi sathi parchalanishi ortadi (kamayadi). Oqibatda, polaron va bipolaron massalari kamayadi (ortadi). Bu esa o'z navbatida bipolaronlar gazi (suyuqligi) Boze-Eynsteyn kondensatsiyasi hatorati T_{BEK} (O'O' kritik harorati T_c) ortadi (kamayadi). Bunday hollar tajribada kuzatilgan.

O'O' likning bipolaron modeliga ko'ra, YuHO'O' kupratlari tugunlararo bipolaronlar gazining (yokiuyuqligining) BEK ga bog'liq. Kupratlarda (i) tugunlararo bipolaronlar ideal gazni hosil qiladi; (ii) bipolaronning massasi ikki polaron massasiga teng, ya'ni $m_{bp} = 2m_p$ va kupratlar (iii) kuchli elektron-fonon o'zaro ta'sirida (EFT) va (iv) adiabatik bo'lmagan holatda deb taxmin qilish mumkin. U holda tugunlararo bipolaronlar ideal gazi T_{BEK} ni quyidagicha yozish mumkin:

$$T_{BEK} = \frac{3.31\hbar^2 n^{2/3}}{2k_B m^*} e^{-g^2}, \quad (20)$$

Bu yerda \hbar - Plank doimiysi, k_B - Bolsman doimiysi, m^* - massasi (erkin elektron massasiga teng), n - tugunlararo bipolaronlar zichligi. Endi biz yuqoridagi formalizmni $YBa_2Cu_4O_8$ kupratiga qo'llaymiz. Buning uchun $YBa_2Cu_4O_8$ dagi kabi CuO_5 piramidalaridan tashkil topgan kvazi ikki o'lchovli panjarani ko'rib chiqaylik. CuO_5 piramidalarining mis-kislorodli (CuO_2) tekisligini biz kvadrat panjara sifatida qabul qilamiz, panjara doimiysi $a=0,193$ nm bo'lib, $Cu(2) - O(2)$ va/yoki $Cu(2) - O(3)$ tekislik masofalarini talqin qiladi. $YBa_2Cu_4O_8$ ning $Cu(2) - O(1)$ bog'lanish uzunligi $0,2276$ nm ga teng, biz h_o bilan bog'laymiz. Barcha bu panjara parametrlari 85 K da o'lchanadi. Bundan tashqari, fonon chastotasi uchun kupratlar uchun umumiy bo'lgan $\hbar\omega = 75$ meV ni qabul qilamiz va apikal kislorod massasi uchun $M=16$ m.a.b ni qo'yamiz. Avvalo, biz polaron energiyasi $E_p = 0,75$ eV qiymatini tanlaymiz. Shu sharoitda BEK otish harorati T_{BEC} $YBa_2Cu_4O_8$ birikmasi uchun tajriba natijalariga mos ravishda O'O' ning kritik harorati $T_c=80$ K ga to'g'ri keladi. Keyin, $T_{BEC}=T_c$ ni qabul qilib, yuqoridagi farazlar va (15)-(20) - formulalar bo'yicha polaron parametrlarini hisoblaymiz. Tanlangan polaron energiyasiga mos keladigan polaronning hisoblangan massasi $m_p=18,3m_e$ ga teng. Oxirgi massa $YBa_2Cu_4O_8$

massasidagi polaronning uch o'lovli massasi sifatida talqin qilinishi kerak. Polaronning tekislikdagi massasini, ya'ni CuO_2 -tekisligidagi polaron massasini, $m_{p,ab}$ hisoblaymiz. Tekislikdagi polaron massasi $m_{p,ab}$ ni hisoblash uchun quyidagi

$$m_p = m_{p,ab}^{2/3} * m_{p,c}^{1/3} \text{ va } \gamma_{(p,m,cab)} = m_{p,c}/m_{p,ab}$$

formularidan foydalaniladi. γ_m $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ ning CuO_2 tekisligi va c yo'nalishi bo'yicha tashish xususiyatlarining anizotropiyasini tavsiflaydi. $\gamma_{(m,cab)}$ koeffitsientining tajribalarda qiymatini topish mumkin. Zech va boshqalar, tajribaviy ravishda massa anizotropiya nisbatini aniqladilar $\gamma_{(m,cab)} = \sqrt{m_c^*/m_{ab}^*} = 12.3$. Massa anizotropiya nisbatining qiymatidan foydalanib, CuO_2 tekisligidagi zaryad tashuvchining (polaron) massasini $m_{p,ab} = 3.489m_e$ osongina hisoblash mumkin. Hussey et al., va Teylor et al., ishlaridagi ma'lumotlarga ko'ra, massa anizotropiya nisbati $\gamma_{(m,cb)} = \sqrt{m_c^*/m_b^*} = 15$ va $\gamma_{(m,cb)} = \sqrt{m_c^*/m_b^*} = 9 \pm 0,3$. Agar $\gamma_{(m,ca)} = \gamma_{(m,cb)}$ deb faraz qilinsa, Hussey va boshqalarning yuqoridagi nisbatlari uchun $m_{(p,ab)} = 3,00673m_e$ va $m_{(p,ab)} = 4,22663m_e$ ni oladi, va Teylor va boshqalar, so'ngi ikkita natija $\gamma_{(m,ca)} = \gamma_{(m,cb)}$ bo'lgan holatga mos keladi. Haqiqatda ular orasida bir oz farq bor: $\gamma_{(m,ca)} \neq \gamma_{(m,cb)}$. $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ da $\gamma_{(m,ca)} = m_c/m_a$ va $\gamma_{(m,cb)} = m_c/m_b$ uchun massa anizotropiya nisbatlarini beradi. Shunday qilib, $\gamma_{(m,ca)} = 13$ va $\gamma_{(m,cb)} = 14$ so'ngi nisbatlardan biri olinadi.

$$\gamma_{m,cab} = \frac{m_c}{m_{ab}} = \frac{m_c}{(m_a \cdot m_b)^{1/2}} = \sqrt{\frac{m_c}{m_a}} \cdot \sqrt{\frac{m_c}{m_b}} = \gamma_{m,ca} \cdot \gamma_{m,cb} = 182.$$

Keyin CuO_2 tekisligidagi zaryad tashuvchining (polaron) massasi uchun yuqoridagi massa anizotropiya nisbatidan foydalanib, $m_{(p,ab)} = 3,227m_e$ ga teng bo'ladi. Olingan natijalar 1-jadvalda jamlangan.

1-jadval. $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ yuqori haroratli o'ta'okazuvchan kupratining hisoblangan parametrlari

Birikma	Tugunlararo bipolaronlar ideal gazining BEC harorati, $T_{BEC} (T_c), K$	polaron energiyasi, E_p, eV	Polaronning uch o'lovli massasi, m_p, m_e	massa anizotropiya nisbati, $\gamma_{m,cab}$	CuO_2 -tekisligi Ichida polaron massasi, $m_{p,ab}, m_e$ (nazariy)	CuO_2 -tekisligi Ichida polaron massasi, $m_{p,ab}, m_e$ (tajriba)
$\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$	80	0.75	18.3	144	3.489	$2,7 \pm 0.3$
				225	3.00673	
				81	4.22663	3 ± 0.3
				182	3.227	

CuO_2 tekisligidagi zaryad tashuvchining (polaron) massasi oddiy Holsteyn modelida kutilgandek kuchli qayta normallashtirilmaganligini ko'rish mumkin. Kupratlarda yengil va harakatchan (bi) polaronlarning mavjudligini Aleksandrov aytib o'tgan. Bangura va boshq. (Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 047004) va Yelland va boshq. (Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 047003) ishlarida $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ tarkibidagi

kvazizarralar massasi $(2.7 \pm 0.3) m_e$ va $(3.0 \pm 0.3) m_e$ ga teng bo'lgan tajribaviy qiymatlarni keltirib o'tgan va bu qiymatlar esa bizning nazariy hisob kitoblarimizga qoniqarli darajada yaqin.

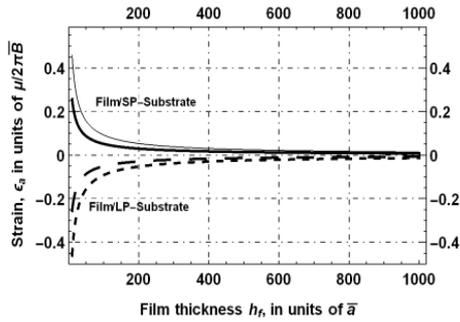
Xulosa qilib aytganda, biz $YBa_2Cu_4O_8$ kupratini kengaytirilgan Holsteyn-Hubbard modeli va yuqori T_c o'taotkazuvchanligining bipolaron mexanizmi doirasida o'rgandik. BEK haroratining analitik formulasidan foydalanib, ideal gazning BEK haroratining $YBa_2Cu_4O_8$ kupratining tajribadagi qiymati bilan T_{BEK} ning mos kelishini ta'minlovchi polaron energiyasi tanlanadi va kichik polaronning uch o'lchovli massasini hisobladik. $YBa_2Cu_4O_8$ kupratidagi massa anizotropiyasining tajribadagi qiymatlarini olib, CuO_2 tekisligidagi polaron massasini hisobladik. Natijalarimiz $YBa_2Cu_4O_8$ kupratida $(3 \div 4) m_e$ massali yengil (bi)polaronlar mavjudligini ko'rsatadi hamda tajribalarda aniqlangan kvazizarra massalarining qiymatlariga mos keladi.

Dissertatsiyaning **“La-asosli kuprat pardalarida o'taotkazuvchanlikning kritik harorati: qalinlik samarasi”** deb nomlangan uchinchi bobida model doirasida quyidagilar bayon etilgan: LSAO va STO tagliklarida o'stirilgan LSCO kuprat yupqa pardasining o'taotkazuvchanlik kritik haroratining parda qalinligiga bog'liqligi tushuntirilgan. Biz tugunlararo bipolaronlar ideal boze gazini hosil qiladi deb hisobladik va taranglikni Boze-Eynshteyn kondensatsiyasi harorati bilan 20-formula orqali bog'laymiz. Taranglik g^2 va n orqali T_{BEK} ga ta'sir qiladi. Taranglik ta'sirida namunaning boshlang'ich hajmi o'zgaradi va ushbu $V(\varepsilon_a, \varepsilon_b, \varepsilon_c) = V_0(1 + \varepsilon_a)(1 + \varepsilon_b)(1 + \varepsilon_c)$ ifoda orqali hisoblanadi. Natijada bipolaronlar konsentratsiyasi quyidagi

$$n = n_0(1 - \varepsilon_a)(1 - \varepsilon_b)(1 - \varepsilon_{ho}) \quad (21)$$

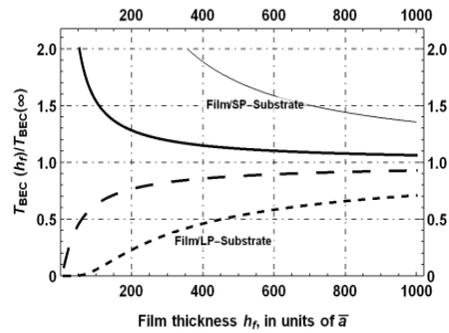
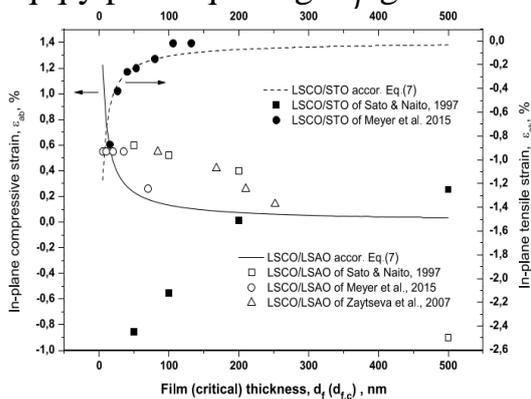
formula orqali hisoblanadi.

Nazariy modelimizga ko'ra, parda kichik davrli (SP) yoki katta davrli (LP) taglikda o'stirilganda, T_{BEC} qiymati parda qalinligining oshishi bilan kamayishi yoki ortishi kutiladi. Bizning modelimiz T_{BEC} va h_f o'rtasida bunday bog'liqlik mavjudligini aniq ko'rsatishi mumkin. Buni isbotlash uchun biz LSCO/LSAO va LSCO/STO tizimlarida tugunlararo bipolaronlar uchun $T_{BEC}(hf)/T_{BEC}(\infty)$ nisbatining parda qalinligiga bog'liq ravishda hisoblangan natijalarni tahlil qildik. Bu yerda $T_{BEC}(hf)$ yoki $T_{BEC}(\infty)$ mos ravishda hf va cheksiz qalinlikka ega LSCO pardalarining BEK haroratlarini ifodalaydi. $hf = \infty$ qiymati LSCO kupratining hajmiy holatiga mos keladi. $T_{BEC}(\infty)$ qiymati 36 K ga teng qilib belgilangan bo'lib, bu polaron energiyasi $E_p = 0,5667$ eV ga mos keladi. Parda qalinligiga bog'liq $T_{BEC}(hf)/T_{BEC}(\infty)$ nisbatining hisoblangan natijalari 8-rasmda, Puasson koeffitsientining $\nu = 0,1$ va $\nu = 0,5$ qiymatlarida grafik tarzda tasvirlangan. Qizig'i shundaki, LSCO yupqa pardalarining O'O' kritik harorati va LSCO yupqa pardalaridagi tugunlararo bipolaronlarning BEK harorati parda qalinligiga bir xil tarzda bog'liq ekanligini kuzatilgan.



7-rasm. a o‘q bo‘yicha taranglik (ε_a) ning parda qalinligi (h_f)ga bog‘liqligi

Biz T_{BEK} ning parda qalinligiga bog‘liqligini o‘rganib chiqdik va LSCO yupqa pardalarining O‘O‘ kritik harorati T_c va LSCO yupqa pardalaridagi tugunlararo bipolyaronlarining BEK harorati xuddi shu tarzda parda qalinligiga bog‘liq ekanligini aniqladik. Ushbu natijalar LSCO yupqa pardalarining O‘O‘ xususiyatlari va tugunlararo bipolyaronlarining BEK o‘rtasida chuqur bog‘liqlik mavjudligini aniq ko‘rsatmoqda. Olingan natijalarni tajriba ma‘lumotlar bilan taqqoslaymiz. 9-rasmda tekislikdagi taranglik ε_{ab} ning parda qalinligi h_f ga bog‘liqligi tasvirlangan. Bu yerda to‘liq va uzilgan chiziqlar mos ravishda LSCO/LSAO va LSCO/STO ga tegishli. Taqqoslash uchun ba‘zi tajriba ma‘lumotlar ham keltirilgan: ochiq (to‘ldirilgan) belgilar LSCO/LSAO (LSCO/STO) tizimiga mos keladi. Kvadrat va doira belgilari mos ravishda Sato va Naito hamda Meyer ishlaridan olingan, uchburchak belgilar esa Zaytseva va boshq. (Acta Physica polonica A 111(1), 185-188 (2007)) ishidan olingan. Barcha belgilar tajriba ma‘lumotlariga muvofiq holda haqiqiy parda qalinligi h_f ga mos keladi.

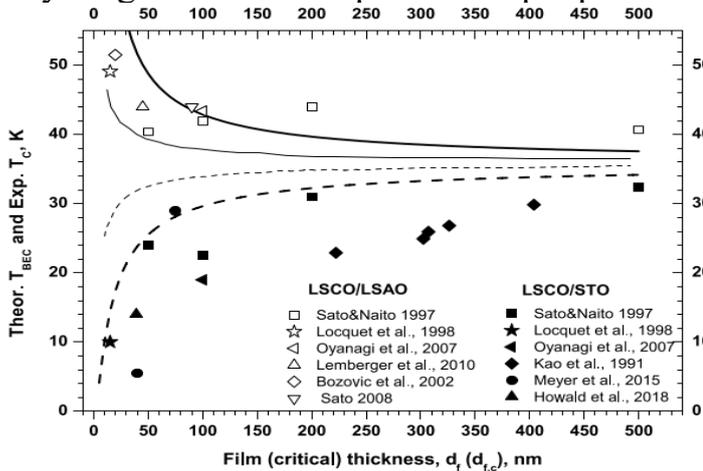


8-rasm. Bose Eyshteyn harorati T_{BEK} ning parda qalinligi (h_f) ga bog‘liqligi

9-rasm. Tekislikdagi taranglik ε_{ab} ning pardaning qalinligi h_f ga bog‘liqligi

Parda kritik qalinligi h_f ga nisbatan tugunlararo bipolyaronlar ideal gazining BEK harorati T_{BEK} ning hisob-kitob natijalari 10-rasmda keltirilgan. Qalin to‘g‘ri va uzilgan chiziqlar LSCO/LSAO va LSCO/STO tizimlari uchun T_{BEK} ning nazariy qiymatlarini ifodalaydi. Shu bilan birga, yupqa to‘g‘ri va uzilgan chiziqlar LSCO/LSAO va LSCO/STO tizimlari uchun Chen va boshq. (Chen X.J et al., Phys.Rev. B 61, 9782-9785 (2000)) ishidagi keltirilgan T_c ning nazariy qiymatlarini aks ettiradi. Xuddi shu 10-rasmda biz LSAO va STO tagliklarida o‘stirilgan ba‘zi LSCO pardalarining O‘O‘ haroratining T_c ning tajriba natijalaribilan solishtirishni amalga oshirdik. Xususan, quyidagi pardalarning T_c qiymatlari belgilandi: LSAO tagliklarida o‘stirilgan pardalar: ochiq kvadrat: $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$, ochiq yulduzcha:

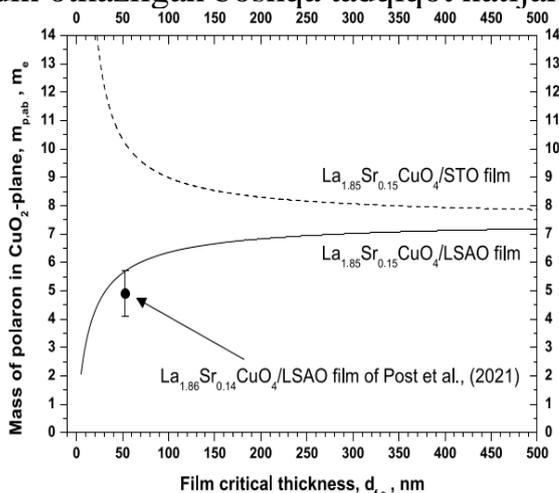
La_{1.9}Sr_{0.1}CuO₄, ochiq chap uchburchak: La_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄, ochiq pastga yoʻnalgan uchburchak : La_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄, ochiq uchburchak: La_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄. STO tagliklarida oʻstirilgan pardalar: toʻldirilgan kvadrat La_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄, toʻldirilgan yulduzcha:La_{1.9}Sr_{0.1}CuO₄, toʻldirilgan chap uchburchak: La_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄, toʻldirilgan romb: La_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄, toʻldirilgan uchburchak: La_{1.86}Sr_{0.14}CuO₄. Tajribadagi kuzatishlar shuni koʻrsatadiki, LSCO pardasining 100 nm gacha boʻlgan qalinlik diapazonida nazariy modelimiz tajriba natijalari bilan mos kelgan. Modelimiz, shuningdek, LSCO/LSAO tizimida parda qalinligi oshishi bilan T_{BEC} ning pasayishini, LSCO/STO tizimida esa oʻsishini bashorat qilmoqda. Tajriba natijalarga miqdoriy muvofiqlik nuqtai nazardan, 10-rasmdagi nazariy hisob kitob natijalari baʼzi tajriba maʼlumotlariga yaqin ekanligini koʻrsatmoqda. Soʻngi tajriba natijalari ham ushbu 10-rasmda aks ettirilgan. Shuni alohida taʼkidlash kerakki, bizning hisob kitob natijalarimiz T_{BEC} tajriba maʼlumotlardagi T_c qiymatlariga nisbatan ancha yaqinroq mos keladi. Muayyan parda qalinligi uchun LSCO/LSAO tizimida T_{BEC} har doim T_c dan kattaroq, LSCO/STO tizimida esa kichikroq boʻlishi kuzatiladi. Tizimning polaron xususiyatlarining parda qalinligiga bogʻliq holda qanday oʻzgarishini tahlil qilish ham qiziq.



10-rasm. Tugunlararo bipolaronlarning ideal gazi T_{BEC} ning parda qalinligiga bogʻliqligi.

Soʻngi xususiyatlarni bilish ayniqsa muhim, chunki ular T_{BEC} ning parda qalinligiga bogʻliqligini boshqaradigan tizimning asosiy parametrlarini aniqlash imkon beradi. Bizning yondashuvimizda ligerlash darajasi $x = 0,15$ ga teng qilib olinadi va parda qalinligiga qarab tashuvchilar konsentratsiyasi n ning oʻzgarishijuda kichik hissaga ega. Shunday qilib, asosiy parametr sifatida polaronning massasi (yoki tugunlararo bipolaron massasi) aniqlanadi. LSCO/LSAO va LSCO/STO tizimlari uchun polaron massalari turli qalinliklar uchun hisoblab chiqilgan. Bunda biz polaron energiyasi E_p qiymatini shunday tanlanganki, T_{BEC} ning hisoblangan qiymati La_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄ ning hajmiy namunasi uchun tajriba OʻOʻ harorati T_c ga mos keladi, yaʼni T_{BEC}=T_c=36 K. Aslida, biz hisob-kitoblarimizda LSCO ning hajmiy namunasi qalinligi 0,1 mm boʻlgan yetarlicha qalin parda bilan modellashtiramiz. Ushbu modelda quyidagi parametrlar qabul qilingan: $E_p = 0,40$ eV, polaron massasi $m_p=40.8m_e$, $m_{p,ab}=7.5$. Tekislikdagi polaron massasi $m_{p,ab}$ quyidagi formulalar yordamida hisoblangan: $m_p = m_{p,ab}^{2/3} m_{p,c}^{1/3}$ va $\gamma_m = \frac{m_{p,c}}{m_{p,ab}} = 160$. Ushbu polaron parametrlarining qiymatlari 50

nm qalinlikdagi LSCO pardalarida T_c ning legirlash darajasiga bog‘liqligi bo‘yicha oldin otkazilgan boshqa tadqiqot natijalari bilan yaxshi mos keladi.



11-rasm. Parda kritik qalinligi d_c ga bog‘liq holda (CuO_2) tekislikdagi polaron massasi $m_{p,ab}$ ning o‘zgarishlari LSCO/LSAO (to‘g‘ri chiziq) va LSCO/STO (uzilgan chiziq) tizimlarida. Juda qalin parda uchun $d_c = 0.1$ mm (deyarli xajmiy) tekislikdagi polaron massasi shunday tanlangan ediki, bizning TBEC, b eksperimental $T_{c,b} = 36$ K ga teng. To‘ldirilgan doira belgi (•) va xato chiziqlari Post va boshq. ning 53 nm qalinlikdagi $\text{La}_{1.86}\text{Sr}_{0.14}\text{CuO}_4$ pardasidagi teshikning tsiklotron massasi qiymatini ifodalaydi.

LSCO/LSAO va LSCO/STO tizimlarida tekislik ichidagi polaron massalarining hisoblangan qiymatlari 11-rasmda ko‘rsatilgan. Ushbu rasmda LSCO/LSAO tizimida polaron massasi kamayishi, LSCO/STO tizimida polaron massasi ortishi kuzatiladi, bu esa parda qalinligining kamayishi bilan bog‘liq. Muayyan parda qalinligi uchun LSCO/LSAO tizimidagi polaron massasi har doim LSCO/STO tizimidagi polaron massasidan kichik bo‘ladi. LSCO/STO tizimidagi holatga o‘xshash tarzda, parda qalinligining kamayishi bilan polaron massasining ortishi katta radiusli polaron holati uchun uzoq vaqtdan beri ma‘lum bo‘lgan hodisadir. LSCO/STO pardalarida $m_{p,ab}$ ning qalinlikka bogliq ozgarishi katta polaron holatiga o‘xshashdir, LSCO/LSAO pardalarida esa buning aksi kuzatiladi. Ya’ni LSCO/LSAO pardalarida parda qalinligi kamayishi bilan $m_{p,ab}$ kamayadi va hajmiy namunadagi qiymatdan ham kichik bo‘ladi. Oxirgi holat pardalarning T_{BEK} qiymatining oshishiga sabab bo‘ladi. LSCO/LSAO pardalaridagi polaron massasi haqidagi xulosa yaqinda Post va boshq. (Phys. Rev. B 103, 134515 (2021)) tomonidan o‘tkazilgan tajriba natijalari bilan tasdiqlangan. Ular tomonidan 53 nm qalinlikdagi $\text{La}_{1.86}\text{Sr}_{0.14}\text{CuO}_4/\text{LSAO}$ pardasida kovakning siklotron massasi o‘lchangan bo‘lib, $m_{h,c} = (4,9 \pm 0,8)m_e$ qiymati aniqlangan. 53 nm qalinlikdagi $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4/\text{LSAO}$ pardasidagi tekislik ichidagi polaron massasi uchun bizning natijamiz $5.7m_e$ ni tashkil etadi, bu esa yuqoridagi tajriba natijasiga juda yaqin ekanligini ko‘rsatadi

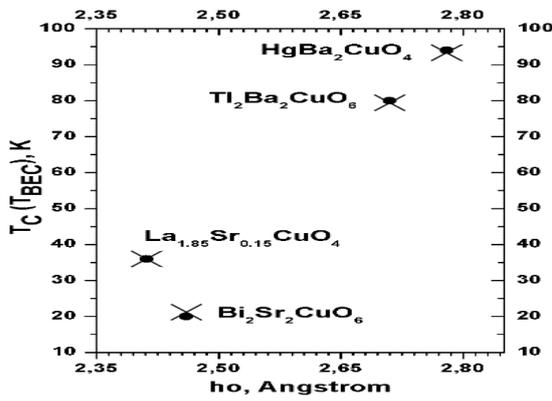
Dissertatsiyaning “**bir qatlamli kupratlar o‘tao‘kazuvchanlik kritik harorati: bipolaron yondashuv**” deb nomlangan bobida bir qatlamli kupratlarning o‘tao‘tkazuvchanligi oldindan shakllangan bipolaronlar tamoyili doirasida qaralgan. Kengaytirilgan Holstein-Hubbard modelini bir qatlamli kupratlarning o‘zaro kuchli ta’sirlashuvchi kovak-panjara tizimi uchun asos sifatida qabul qilib, tugunlararo bipolaronlar ideal gazining BEK harorati T_{BEK} va panjara parametrlari o‘rtasida bog‘liqlik o‘rnatilgan. Bir qatlamli kupratlardagi bipolaronlar BEKharoratining hisoblangan qiymatlari bir qatlamli kupratlarning tekislikdagi Cu ioni va apikal kislorod $O(2)$ ioni orasidagi masofaga mos kelishi (to‘g‘ri proporsional bo‘lishi) ko‘rsatilgan. Bir qatlamli kupratlarning panjara parametrlarining real tajriba

qiymatlaridan foydalanib, biz o'rganilayotgan tizimlarda T_{BEC} va T_c o'rtasida miqdoriy va sifat jihatidan muvofiqligini topdik.

Hozirgacha olingan tajriba ma'lumotlar va turli kupratlar uchun sinovdan o'tkazilgan modellar yuqori haroratli o'taotkazuvchanlik hodisasi murakkab bo'lib turli birikmalar uchun har xil ekanligini ko'rsatadi. Shunga qaramay, umumiy xususiyatlar ham mavjud. Natijada, hozirgi vaqtda barcha tajriba ma'lumotlarni, xususan, umumiy nuqtai nazardan T_c qiymatlaridagi farqlarni tushuntira oladigan modelga ehtiyoj sezilmoqda.

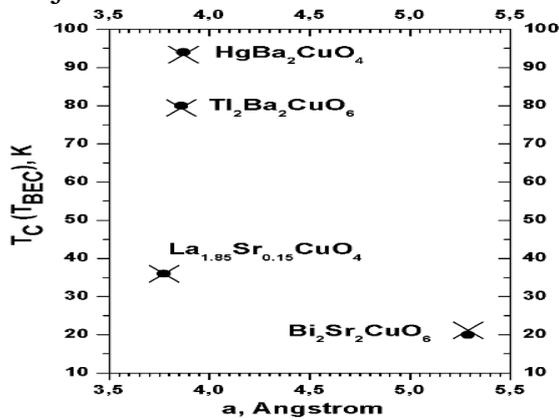
Ushbu ishda mavjud bo'shliqni to'ldirishga harakat qilamiz va tajribalar bilan sifat va miqdoriy jihatdan mos keladigan kupratning panjara parametrlari bilan T_c o'rtasidagi munosabatni kiritamiz. Buni amalga oshirishda YuHO'O' uchun kengaytirilgan Holsteyn-Hubbard (yoki Fröhlich Kulon) modeliga tayanamiz, bu modelga ko'ra tugunlararo bipolyaronlar hosil bo'ladi va natijada, ularning Bose-Eynshteyn kondensatsiyasini (BEK) o'taotkazuvchanlikni keltirib chiqaradi. Shunday qilib, bu erda T_c ni tugunlararo bipolaronlarning BEK harorati T_{BEK} bilan bog'laymiz. Kupratlardagi o'taotkazuvchanlik masalasini bipolaron modeli doirasida ko'rib chiqish foydalidir, chunki tajribaviy dalillar "kupratlarning o'taotkazuvchanlik holatini faza diagrammasining hech bir qismida BKSH nazariyasi bilan tavsiflab bo'lmasligini" ko'rsatadi.

Biz tugunlararo bipolyaronlar T_{BEK} ni (20-formula) tizimning ikkita asosiy parametri orqali ifodaladik: (i) n oraliq bipolyaronlar zichligi va (ii) polaron massasining ko'payishining g^2 ko'rsatkichi. Yuqoridagi tenglamalar yordamida T_{BEC} ning a va h_0 panjara parametrlariga bog'liqligini o'rganish mumkin. Bizning tadqiqotimizda bo'lgani kabi, CuO_2 tekislikdagi zaryad tashuvchilarning apikal kislorod ionlarining c o'qi qutblangan tebranishlari bilan elektron-fononli o'zaro ta'siri muhim rol o'ynaydi. (i) Biz $M=16$ m.a.b ($2,6565032 \cdot 10^{-26}$ kg); (ii) va bipolaron konsentratsiyasi uchun barcha kupratlar uchun umumiy bo'lgan $n_0=1 \cdot 10^{21}$ sm^{-3} qiymatini qabul qilamiz. Bundan tashqari, 12-rasmdagi quyi zanjir ionlari va yuqori zanjirning h_0 ionlari orasidagi masofani kupratning $Cu(1) - O(2)$ bog'lanish uzunligi bilan bog'laymiz. 13-rasmdagi quyi zanjir ionlari orasidagi masofani kupratlarning tetragonal fazasining CuO_2 tekis panjara davri a bilan bog'laymiz.. Raqamli tahlilimizning boshlang'ich nuqtasi $E_p=0,4$ eV va apikal kislorod ionining tebranish chastotasi $\hbar\omega = 0,075$ eV ($1,2016324237 \cdot 10^{-20}J$) qiymatlarini $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ uchun o'rnatishdir. Keyingi tanlovlar $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ panjara parametrlari yordamida hisoblangan T_{BEC} ning yuqoridagi kupratning $T_c=36$ K tajriba qiymati bilan mos kelishini ta'minlaydi.



12-rasm. Eksperimental T_c (to'ldirilgan qora doiralalar •) va nazariy jihatdan hisoblangan T_{BEC} qiymatlari (×) bir qatlamli kupratlar uchun h_0 ga nisbatan.

Keyin boshqa bir qatlamli kupratlar uchun T_{BEC} ni ularning panjara davrlarining aniq tajriba qiymatlaridan foydalangan holda hisoblashni davom ettiramiz. Bizning T_{BEC} apikal kislorod ionining tebranish chastotasining ma'lum qiymatlaridan foydalanganda bir qatlamli kupratlarning T_c eksperimental qiymatlari bilan qoniqarli darajada mos keladi.



13-rasm. Bir qatlamli kupratlar uchun eksperimental T_c (to'ldirilgan qora doiralalar •) va nazariy hisoblangan T_{BEC} (×) ning panjara davri a ga nisbatan qiymatlari.

Ya'ni, $Bi_2Sr_2CuO_{(6+d)}$, $Tl_2Ba_2CuO_6$ va $HgBa_2CuO_4$ bir qatlamli kupratlar uchun hisob-kitoblarimizga mos ravishda 80 meV, 58 meV va 55 meV $\hbar\omega$ ni qo'ydik. Apikal kislorod ionining tebranish chastotasining bu qiymatlari tajribada aniqlangan qiymatlar 40 meV dan 75 meV gacha bo'lgan chastotalar oralig'ida yotadi. 12 va 13-rasmda bir qatlamli $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$, $Bi_2Sr_2CuO_{(6+d)}$, $Tl_2Ba_2CuO_6$ va $HgBa_2CuO_4$ uchun $HgBa_2CuO_4$ ning tajriba qiymatlari taqqoslash maqsadida ko'rsatilgan. 12 va 13-rasmlardan ko'rinib turibdiki, T_{BEC} ning nazariy hisoblangan qiymatlari bir qatlamli kupratlarning T_c tajribada olingan qiymatlarga yaqin. Bundan tashqari, eksperimental kuzatishlar bilan kelishilgan holda, bizning modelimizda T_{BEC} ning yuqori qiymati Cu – O apikal-kislorod masofasining uzunligiga (12-rasm) va tekislik ichidagi panjara davrining qisqaroqligiga (Cu – O masofasi) mos keladi (13-rasm). $Bi_2Sr_2CuO_{(6+d)}$ ning T_{BEC} (va T_c) qiymatiga e'tibor qaratish lozim, u $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ qiymatidan kichik bo'lsa-da, birinchisining h_0 masofasi uzoqroq bo'lishiga qaramay, ikkinchisi. Bu holatni bizning modelimiz doirasida ham tushuntirish mumkin. Gap shundaki, $Bi_2Sr_2CuO_{(6+d)}$ birikmasi mis-kislorod tekisligi bo'ylab $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ birikmasiga qaraganda kattaroq panjara davriga ega. Birikmalarning mis-kislorod tekislikdagi panjara davrlari orasidagi farqning nisbiy mutlaq qiymati 43% gacha, h_0 uchun esa nisbatan kichik, 2%. $Bi_2Sr_2CuO_{(6+d)}$, ning CuO_2 -tekisligi $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ ning CuO_2 -tekisligiga nisbatan keskin kengaytirilgan. Bizning hisob-kitoblarimiz shuni ko'rsatadiki,

panjara ionlarining bunday joylashishi bilan Cu-O apikal-kislorod masofasining uzayishi T_{BEC} (va T_c) ni biroz oshirishiga qaramay, T_{BEC} (va T_c) qiymati kamayadi. Biz bir qatlamli $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$, $Bi_2Sr_2CuO_{(6+d)}$, $Tl_2Ba_2CuO_6$ va $HgBa_2CuO_4$ kupratlarini kengaytirilgan Holsteyn-Hubbard modeli doirasida ko‘rib chiqdik. Ya’ni, biz yuqoridagi kupratlarning T_c qiymatlari bilan qiziqdik. Biz kupratlar uchun o‘ta o‘tkazuvchanlikning bipolaron mexanizmini qabul qildik, bunda T_c oraliq bipolyaronlar ideal gazining Bose-Eynshteyn kondensatsiya harorati T_{BEC} bilan bog‘liq. Bizning T_{BEC} modelimizda biz (1) tenglamadan aniqladik, bunda (bi)polaronning massasi ham, bipolyaronlar konsentratsiyasi ham panjara konstantalari orqali kristall panjara tuzilishiga bog‘liq. Demak, T_{BEC} kupratning panjara parametrlariga bog‘liq. Keyin, biz o‘rganilayotgan kupratlardagi tugunlararo bipolyaronlar ideal gazining Bose-Eynshteyn kondensatsiya harorati T_{BEC} qiymatlarini hisoblab chiqdik. Buni amalga oshirishda biz bir qavatli kupratlarning panjara konstantalarining haqiqiy qiymatlarini hisobga olamiz. tugunlararo bipolaronlar ideal gazining Bose-Eynshteyn kondensatsiya harorati T_{BEC} hisoblangan qiymatlari ko‘rib chiqilayotgan kupratlarning T_c o‘ta o‘tkazuvchanlik harorati qiymatlari bilan qoniqarli mos keladi. Bu yerda keltirilgan yondashuvimiz boshqa kupratlarga ham qo‘llanilishi mumkin.

Ushbu bobda Mis-oksidi (kuprat) yuqori haroratli O‘O‘ lar La–, Bi–, Tl – va Hg asosidagi kupratlarni ko‘rib chiqdik. Kupratlar tarkibida bir-biridan farq qilsa-da, ularning kristall tuzilmalari o‘xshashliklari va bundan tashqari, umumiy strukturaviy birliklarga ega. Shuningdek, kupratlarning O‘O‘ lik xususiyatlari CuO_2 tekisligidan tashqarida bo‘lgan ionlarning holatiga kuchli bog‘liqligi aniqlandi. Hozirgacha olingan eksperimental ma’lumotlar va turli kupratlar uchun sinovdan o‘tgan modellar yuqori T_c O‘O‘ lik fenomeni murakkab va turli birikmalar uchun farq qiladi. Shunga qaramay, umumiy xususiyatlar ham mavjud. Natijada, hozirgi vaqtda barcha tajriba ma’lumotlarni, xususan, T_c qiymatlari orasidagi farqni umumiy nuqtai nazardan tushuntira oladigan modelga ehtiyoj seziladi. Ushbu ishda biz ushbu bo‘shliqni to‘ldirishga harakat qilganmiz.

XULOSA

1. Polaron massasining LSCO pardasi qalinligiga qanday bog‘liq bo‘lishi o‘rganildi. Nazariy munosabatlar, noadiabatik va adiabatik yaqinlashuvlarda, polaron massasi parda qalinligiga bilvosita bog‘liq ekanligini ko‘rsatadi. Sonli ma’lumotlarni tahlil qilish natijasida har ikkala yaqinlashuvda ham polaron massasi parda qalinligi kamayishi bilan LSCO/LSAO tizimda kamayishi va LSCO/STO tizimda ortishi aniqlandi.
2. Polaron massasining nisbiy o‘zgarishlari uchun $\left(\frac{1}{m_p}\right) \partial m_p / \partial \varepsilon_a < 0$, $\left(\frac{1}{m_p}\right) \partial m_p / \partial \varepsilon_c < 0$ natijalar topildi. Panjaraning a -o‘qning siqilishi (cho‘zilishi) polaron massasining kamayishi (ortishi)ga, c -o‘qning siqilishi (cho‘zilishi) esa polaron massasining ortishi (kamayishi) ga olib kelishi aniqlandi.

3. Tugunlararo bipolaronlar ideal gazining BEK harorati (T_{BEK})ni $YBa_2Cu_4O_8$ kuprati O‘O‘ kritik haroratining tajribada aniqlangan qiymati (T_c) bilan mos kelishini ta‘minlovchi polaron energiyasi tanlab olinib, kichik polaronning uch o‘lchamli massasi hisoblandi. Keyin, $YBa_2Cu_4O_8$ kupratida (3÷4)me massali yengil (bi)polyaronlar mavjudligi va nazariy hisoblash natijalar bilan tajribadagi qiymatlar mos kelishi tushuntirildi.
4. LSAO va STO tagliklarida o‘stirilgan LSCO pardalarining O‘O‘ ning kritik harorati parda qalinligiga bog‘liqligini bipolaronik Boze-Eynshteyn kondensatsiyasi holati doirasida o‘rganildi va nazariy natijalar tajribalardagi ma‘lumotlar bilan mos kelishi aniqlandi;
5. Bir qatlamli kupratlar O‘O‘ kritik harorati (T_c) qiymatlarini bipolaron mexanizmi asosida o‘rganildi va ular Boze-Eynshteyn kondensatsiyasi harorati (T_{BEC}) bilan bogliq ekanligi aniqlandi.
6. Boze-Eynshteyn kondensatsiyasi harorati (T_{BEK}) bir mis kislorod tekisligiga ega kupratlarning panjara davri va apikal-kislarod joylashuviga bog‘likligi sonli o‘rganildi, olingan natijalar esa O‘O‘ kritik harorati (T_c) bilan mos kelishi ko‘rsatildi.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ PhD.03/27.02.2020.FM.106.01 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ ФЕРГАНСКОМ ПОЛИТЕХНИЧЕСКОМ
ИНСТИТУТЕ**

**НУКУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ ИМЕНИ АЖИНИЯЗА**

ХАЖИБАЕВ ДОСМУХАММАД ГАНИЕВИЧ

**ПОЛЯРОННЫЙ ЭФФЕКТ В СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВАХ
ПЛЕНОЧНЫХ И ОБЪЁМНЫХ ОБРАЗЦОВ КУПРАТОВ**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

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

Фергана–2025

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Министерстве высшего образования, науки и инноваций Республики Узбекистан под номером № B2023.3.PhD/FM924.

Докторская диссертация выполнена в Нукусском государственном педагогическом институте имени Ажинияза.

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

Научный руководитель: **Явидов Бахрам Янгибаевич**
доктор физико-математических наук, доцент

Официальные оппоненты: **Жумаев Мустахим Рофиевич**
доктор физико-математических наук,
профессор

Сабиров Махмуд Мамарасулович
Кандидат физико-математических наук, доцент

Ведущая организация: **Институт ядерной физики Академии наук
Республики Узбекистан**

Защита диссертации состоится «___» _____ 2025 года в ___ часов на заседании Научного совета PhD.03/27.02.2020.FM.106.01 при Ферганского политехнического институте (Адрес: 150107. г. Фергана, ул. Ферганская, дом 86. Тел.: (+99873) 241-12-06; факс: (+99873) 241-12-16; e-mail: uzferfizika@mail.ru).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Ферганского политехнического института (регистрационный номер _____) (150107. г. Фергана, ул. Ферганская, дом 86. Тел.: (+99873) 241-12-06).

Автореферат диссертации разослан «___» _____ 2025 г.
(Протокол рассылки № _____ от _____ 2025 г.).

Н. Х. Юлдашев
председатель научного совета по присуждению
ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

Б.Ж. Ахмадалиев
ученый секретарь научного совета по присуждению
ученых степеней, PhD ф.-м.н.,

С.М. Отажонов
председатель научного семинара
при научном совете по присуждению
ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

ВВЕДЕНИЕ(аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и необходимость темы диссертации. Сегодня в мире остаются чрезвычайно актуальными проблемы поиска эффективных источников энергии, разработки эффективных методов ее получения, хранения и транспортировки. Одним из путей решения этих проблем видится открытие новых материалов с высокой электропроводностью и дальнейшее улучшение электрофизических свойств существующих материалов. В частности, перспективными для создания энергосберегающих технологий считаются высокотемпературные сверхпроводящие (ВТСП) медно-кислородные соединения (купраты). Купраты уже более 40 лет являются активным объектом исследований в области физики конденсированного состояния. Купраты уже более 40 лет являются активным объектом исследований в области физики конденсированного состояния. В частности, благодаря своим уникальным свойствам купраты в настоящее время используются в производстве микро- и нанoeлектронных приборов (СВЧ-фильтров, смесителей, антенн), магнитных приборов (приборов МРТ, ускорителей частиц, систем накопления энергии), сенсоров (датчиков магнитного поля, генераторов высокочастотных электромагнитных волн), а также сверхпроводников 2-го поколения. Также, согласно многообещающим прогнозам, высокотемпературная сверхпроводимость может найти широкое применение при разработке квантовых процессоров, которые в ближайшем будущем лягут в основу квантовых компьютеров. Одной из главных причин широкого применения высокотемпературных сверхпроводников во всех областях науки, техники и промышленности является постепенное истощение традиционных источников энергии в мире, а следовательно, переход на энергоэффективные и экологически чистые технологии.

Несмотря на проводимые в последние годы в научных учреждениях развитых стран научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы в области высокотемпературной сверхпроводимости и достигнутые результаты, в купратах по-прежнему имеется ряд нерешенных проблем, без решения которых невозможно бурное развитие широкого применения купратов на практике. К числу таких проблем можно отнести отсутствие полной теории высокотемпературной сверхпроводимости купратов, а также тот факт, что существующие теоретические модели не могут в полной мере объяснить изменения свойств высокотемпературной сверхпроводимости купратов в результате изменения кристаллической структуры. В частности, хотя и установлено, что изменение расстояния между плоскостью CuO_2 и апикальным кислородом в кристаллической структуре купратов играет важную роль в определении свойств высокотемпературной сверхпроводимости купратов, до сих пор не существует теоретической модели, описывающей, как критическая температура высокотемпературной сверхпроводимости объемных образцов и тонких пленок купратов зависит от этого расстояния, учитывая сильное электрон-фононное взаимодействие в купратах. Существующие теоретические модели основаны на магнитных

взаимодействиях и не учитывают сильное электрон-фононное взаимодействие, или поляронный эффект, который проявляется в экспериментах и во многих свойствах купратов. Поэтому необходимы теоретические исследования поляронного эффекта в купратах, объемных образцах и тонких пленках, а также свойств высокотемпературной сверхпроводимости. В этой связи крайне важным является теоретическое исследование влияния изменения расстояния между плоскостью CuO_2 и апикальным кислородом в кристаллической структуре купратов на массу носителей заряда в купратах, критическую температуру высокотемпературной сверхпроводимости объемных образцов купратов, а также толщины тонкой пленки купратов на критическую температуру пленки.

В нашей республике проводятся масштабные мероприятия по проведению исследований и внедрению новых технологий, которые позволят открыть энергоэффективные материалы, использовать имеющиеся и расширить перспективы их применения. В указах главы нашего государства особое внимание уделяется использованию энергоэффективных материалов и переходу на «зеленую» энергетику. В частности, в Стратегии развития нового Узбекистана на 2022-2026 годы поставлены конкретные задачи по «...бесперебойному обеспечению экономики электроэнергией, активному внедрению технологий «зеленой экономики» во все сферы жизнедеятельности, повышению энергоэффективности...». В реализации этих задач важное значение имеет открытие новых материалов с высокой электропроводностью или совершенствование существующих, в том числе купратов, их объемных образцов и тонких пленок, а также теоретические исследования поляронного эффекта в свойствах сверхпроводящих материалов.

Диссертация призвана реализовать задачи, изложенные в Указе Президента Республики Узбекистан от 28 января 2022 года № ПФ-60 «О Стратегии развития нового Узбекистана на 2022-2026 годы», от 22 августа 2019 года № ПП-4422 «О неотложных мерах по повышению энергоэффективности отраслей экономики и социальной сферы, внедрению энергосберегающих технологий и развитию возобновляемых источников энергии», от 29 октября 2020 года № ПФ-6097 «Об утверждении Концепции развития науки до 2030 года», от 19 марта 2021 года № ПП-5032 «О мерах по повышению качества образования в области физики и развитию научных исследований» и других нормативно-правовых актах, связанных с данной деятельностью. исследование служит определенной цели.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий республики. Диссертационная работа выполнена в соответствии со II приоритетным направлением развития науки и техники Республики Узбекистан «Энергетика, энергоэффективность и альтернативные источники энергии».

Степень изученности проблемы. Проблема сверхпроводимости в купратах изучалась теоретически и экспериментально многими учеными по всему миру. В том числе: иностранные ученые Ц. Чэнь (Китай), Н.С. Линь

(Китай), Т.Л. Мейер (США), И. Зайцева (Польша), Л. Чен (США), Х. Л. Као (США), М. З. Цеплак (Польша), Л. Ховальд (Швейцария), Ж. П. Лоскуэт (Швейцария), Х. Оянаги (Япония), М. Найто (Япония), Х. Сато (Япония), Й. Бонча (Словения), М. Золи (Германия), К. В. Пост (США), М. Берчу (Канада), А. С. Изучал труды Александрова (Англия), П.Е. Корниловича (США), Х.Дж. Чена (Швейцария), Р. Хасанова (Швейцария). В нашей стране С. Джуманов, Б. Явидов, П.Дж. Байматов, Б. Абдуллаев, Б. Наримбетов, Д. Гуламова, Д. Джураев, М. Ибрагимова, У. Курбанов, Ш. Такие ученые, как Джуманов, О. Ганиев, Э. Каримбоев, А. Жалекешов проводят исследования по изучению различных свойств проводимости в купратах.

В настоящее время существует несколько теоретических моделей высокотемпературной сверхпроводимости, в том числе расширенная модель Хольштейна-Хаббарда, экситонная модель Гинзбурга, модель Хаббарда, модель Хольштейна-Хаббарда, модель Мотта-Хаббарда, модель фермижидкости Ландау, t-J-модель, модель резонансной валентной связи Андерсона и другие. Однако общепринятой теории не существует. В то же время большинство экспериментов показывают, что электрон-фононное взаимодействие в купратах сильнее, чем в других взаимодействиях, и что носители заряда ведут себя как (би)поляроны. Учитывая это, возникает необходимость в интерпретации и теоретическом объяснении экспериментальных результатов, полученных на основе поляронного подхода.

Связь темы диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертация. В соответствии с планами по обеспечению реализации Указа Президента Республики Узбекистан от 29 октября 2020 года № ПФ-6097 «Об утверждении Концепции развития науки до 2030 года» тема «Исследование свойств электронных возмущений в перспективных материалах» (2021-2026 годы) выполнялась в рамках Протокола Ученого совета Нукусского государственного педагогического института имени Ажинёза от 30 ноября 2021 года № 4).

Целью исследования. Состоит в теоретическом исследовании влияния (би)поляронного эффекта, связанного со структурными изменениями в плоскости медь-кислород и апикальным расположением кислорода, на сверхпроводящие свойства купратных пленок и объемных образцов.

Задачи исследования:

- Изучение взаимосвязи параметров полярона и деформаций кристаллической решетки в купратах на основе La;
- Расчет массы полярона в купрате $YBa_2Cu_4O_8$ и сравнение с экспериментальными результатами;
- Предложить теорию влияния толщины завесы на параметры полярона в купратных завесах;
- Изучение влияния толщины пленки на T_c пленочных купратов на основе La;
- Изучение зависимости T_c однослойных купратов от расстояния между плоскостью кислорода меди и апикальным кислородом;

- Численное исследование зависимости T_c от расположения апикального кислорода купратов с одной медно-кислородной плоскостью.

Объектами исследования. Сильно взаимодействующие электрон-фононные системы, полароны и биполароны, а также купраты: $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$, $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$, $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_6$, $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$.

Предметом исследования. Взаимодействие электронов и фононов (ЭФВ), масса носителя заряда (поларона) под воздействием одноосевой деформации, одноосевого давления, конденсации биполаронов Бозе-Эйнштейна (ВЕК), сверхпроводимость, эффект толщины.

Методы исследования. Расширенная модель Холстейн-Хаббарда, метод вторичного квантования, подход биполаронов к сверхпроводимости, численные методы расчёта.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

- Впервые разработана теоретическая модель, позволяющая рассчитать массу носителей заряда в высокотемпературном проводящем купрате $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ на основе биполярного подхода к проводимости с учетом расположения апикального кислорода в кристаллической решетке относительно плоскости медь-кислород;
- Впервые разработана теоретическая модель на основе биполярной модели сверхпроводимости, описывающая зависимость критической температуры проводимости (T_c) высокотемпературных проводящих купратных пленок от толщины пленки и разности постоянных решеток пленки и подложки;
- Впервые на основе биполярной модели проводимости показано, что критическая температура проводимости (T_c) высокотемпературной проводящей пленки купрата LSCO, выращенной на подложке LSAO (STO), увеличивается (уменьшается) с уменьшением толщины пленки;
- Впервые на основе биполярного подхода с учетом расположения апикального кислорода в кристаллической решетке относительно медь-кислородной плоскости получено различие в критической температуре сверхпроводимости высокотемпературных проводящих купратов $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$, $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_6$, $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ одной медь-кислородной плоскостью.

Практические результаты исследования заключается в следующем:

- Изучена зависимость массы поларона в тонких пленках LSCO от одноосевых деформаций кристаллической решётки;
- Рассчитана масса носителя заряда в купрате YBCO;
- Разработана теория, описывающая зависимость критической температуры сверхпроводимости T_c тонкой пленки LSCO от толщины пленки;
- Критическая температура сверхпроводимости T_c купратов с одной медно-кислородной плоскостью объяснена как функция расположения апикального кислорода.

Достоверность результатов исследования. Это объясняется использованием проверенных современных теоретических методов физики конденсированного состояния, в частности, теории биполярной проводимости жидкости (сверхтекучести), основанной на расширенной модели Хольстейна-Хаббарда и принципе конденсации Бозе-Эйнштейна, а также тем, что теоретически полученные результаты и выводы согласуются с экспериментальными данными и соответствуют основным закономерностям, установленным в купратах.

Научная и практическая значимость результатов исследования. Научная значимость результатов исследования заключается в том, что полученные результаты будут полезны при разработке микроскопической теории ВТСП купратов. Купраты Свойства ВТСП, масса носителей заряда и критические температуры сверхпроводимости напрямую зависят от структуры кристалла через поляронный эффект. В частности, свойства ВТСП объемных образцов и тонких пленок купратов определяются расстоянием между плоскостью медь-кислород и апикальным кислородом. Это, в свою очередь, будет способствовать улучшению теоретических знаний, связывающих физические свойства купратов с их кристаллической структурой.

Практическая значимость результатов исследования заключается в том, что изучение влияния толщины тонких пленок купратов, выращенных на различных подложках, на критическую температуру сверхпроводимости пленок может быть использовано в теоретическом моделировании и прикладном материаловедении.

Внедрение результатов исследования. На основании полученных результатов по поляронному эффекту в свойствах проводимости пленочных и объемных образцов купратов:

Полученные результаты по зависимости критической температуры сверхпроводимости от толщины пленки позволили усовершенствовать механизм роста тонких пленок Bi-2212 High Temperature Superconducting золь-гель методом за счет влияния подложки и оптимизировать сверхпроводящие свойства пленок (International Journal of Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects 684, 133-134, 2024);

Научные инновации, такие как объяснение массы носителей заряда в купрате $YBa_2Cu_4O_8$ на основе биполярной модели сверхпроводимости, предложенная теоретическая модель, описывающая зависимость критической температуры сверхпроводимости купратных пленок от толщины пленки, а также качественное и количественное объяснение зависимости критической температуры сверхпроводимости пленок LSCO от толщины пленки на основе биполярной модели, были использованы для сравнения научных результатов программы фундаментальных научных исследований по теме «Электронная теория легированных купратов $YBa_2Cu_4O_8$ и ее применение к изучению образования и разделения диэлектрических/металлических и сверхпроводящих фаз в наномасштабе» в рамках программы научных

исследований Института ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан на 2020-2024 годы. (Справка Академии наук Республики Узбекистан № 2/1255-2555 от 15 ноября 2024 года). Используя эти научные результаты, удалось определить массу носителей заряда в купрате Y124 и определить критическую температуру проводимости тонкой пленки LSCO на основе толщины пленки.

Апробация результатов исследования. Основные результаты диссертации обсуждались на 8 международных и всероссийских конференциях.

Публикация результатов исследования. По теме диссертации опубликовано 14 научных работ. Из них 6 статей опубликованы в научных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией при Министерстве высшего образования, науки и инноваций Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторских диссертаций, 1 из которых опубликована в журналах, входящих в Scopus.

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка опубликованных работ, списка литературы и приложения. Общий объем диссертации составляет 120 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении к диссертации поясняется актуальность и необходимость темы научного исследования. Показана актуальность исследования по отношению к приоритетным направлениям развития науки и техники Республики Узбекистан, доказана научная новизна исследования, доказана достоверность полученных практических результатов. Дается краткая информация об уровне изученности проблемы, цели и задачах исследования, утверждении научной работы, публикации результатов исследования, структуре и объеме диссертации.

В первой главе диссертации под названием «Общие свойства проводимости» дается обзор результатов, опубликованных в литературе. На основе анализа данной литературы были определены цели и задачи диссертации.

Во второй главе диссертации под названием «Масса полярона в решетках купратов на основе La и купрата YBaCu₄O₈» представлены теории решеточных поляронов и расширенная модель Хольстейна-Хаббарда и ее применение к купратам.

Купраты характеризуются как прочно связанный электрон (или дырка) и прочно связанная электрон-фононная система. Расширенная модель Хольстейна-Хаббарда удобна для изучения таких систем. В этой модели полный гамильтониан системы выражается как:

$$H = H_e + H_{ph} + H_V + H_{e-ph} \quad (1)$$

H_e в формуле 1 описывает прыжки электрона между соседними узлами решетки и записывается в следующем виде:

$$H_e = \sum_{n \neq n'} T(n - n') c_n^\dagger c_{n'}, \quad (2)$$

Здесь $T(n - n')$ – интеграл перескока носителей заряда, а n – и n' – операторы рождения (уничтожения) электронов между соседними узлами.

H_{ph} в формуле 1 описывает гамильтониан фононной подсистемы и записывается как:

$$H_{ph} = \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \hbar \omega_{\mathbf{q}\alpha} (d_{\mathbf{q}\alpha}^\dagger d_{\mathbf{q}\alpha} + 1/2). \quad (3)$$

Здесь обозначает $\omega_{\mathbf{q}\alpha}$ – частоту фонона. $d_{\mathbf{q}\alpha}^\dagger$ ($d_{\mathbf{q}\alpha}$) – оператор фонона с поляризацией рождения (уничтожения) α ($\alpha = x, y, z$) и волновым вектором \mathbf{q} .

H_V в формуле 1 обозначает гамильтониан энергии взаимодействия электронов, находящихся в узлах решетки n и n' , посредством кулоновских сил и записывается в следующем виде:

$$H_V = \sum_{n \neq n'} V_C(n - n') c_n^\dagger c_n c_{n'}^\dagger c_{n'} \quad (4)$$

Здесь $V_C(\mathbf{n} - \mathbf{n}')$ – описывает кулоновскую потенциальную энергию двух электронов, расположенных в узлах n и n' . H_{e-ph} в формуле 1 представляет собой гамильтониан электрон-фононного взаимодействия и записывается следующим образом:

$$H_{e-ph} = \sum_{nm\alpha} f_{m\alpha}(n) c_n^\dagger c_n \xi_{m\alpha} \quad (5)$$

Здесь $f_{m\alpha}(n)$ – сила связи типа «сдвиг плотности» между электроном в узле n и ионом в узле m , а $\xi_{m\alpha}$ – нормальная координата колебаний иона в узле m . $\xi_{m\alpha}$ – можно выразить через оператор рождения и уничтожения фонона следующим образом:

$$\xi_{m\alpha} = \sum_{\mathbf{q}} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\mathbf{q}\alpha}}} e^{i\mathbf{q}m} d_{\mathbf{q}\alpha}^\dagger + h.c. \right) \quad (6)$$

в этом N — количество узлов, а M — масса иона. Расширенная модель Хольстейна-Хаббарда позволяет учитывать электронные корреляции, а также дальнедействующие свойства электрон-фононного взаимодействия. В рамках модели масса полярона в купратах рассчитывается по следующей формуле:

$$m_p = m^* \cdot e^{g^2} \quad (7)$$

Здесь m^* — масса носителя заряда в зоне проводимости, а g^2 — экспоненциальный фактор роста массы полярона. g^2 - экспоненциальный фактор роста массы полярона определялся следующим образом:

$$g^2 = \gamma \frac{E_p}{\hbar\omega} \quad (8)$$

Здесь коэффициент γ -числа, а E_p – энергия полярона, которые рассчитываются по следующим формулам:

$$\gamma = 1 - \frac{\sum_m f_m(n) f_m(n+a)}{\sum_m f_m^2(n)} \quad (9)$$

$$E_p = \frac{1}{2M\omega^2} \sum_m f_m^2(n) \quad (10)$$

Подставляя формулы 9-10 в формулу 8, можно также выразить экспоненциальный коэффициент роста массы полярона следующим образом:

$$g^2 = \frac{1}{2M\hbar\omega^3} \sum_{\vec{m}} [f_{\vec{m}}^2(\vec{n}) - f_{\vec{m}}(\vec{n}) \cdot f_{\vec{m}}(\vec{n} + \vec{a})] \quad (11)$$

Здесь M — апикулярная масса кислорода, $\hbar\omega$ — характерная для купратов энергия фононов, которая обычно принимается равной 75 мэВ. $f_{\vec{m}}(\vec{n})$ — сила EFT, которая в некотором смысле описывает взаимодействие носителя заряда в \vec{n} -узле плоскости CuO_2 в купрате с апикулярным ионом кислорода в \vec{m} -узле, а ее аналитическое выражение определяется следующей формулой:

$$f_{\vec{m}}(\vec{n}) = \frac{kc(1-\varepsilon_c)}{(|(\vec{n}-\vec{m})|(1-\varepsilon_a)|^2 - (c(1-\varepsilon_c))^2)^{3/2}}. \quad (12)$$

Здесь k — некоторая константа, a — период решетки вдоль оси a или b в плоскости CuO_2 , c — период кристаллической решетки купрата в направлении, перпендикулярном плоскости ab , а ε_a (ε_c) — относительная деформация (напряжение) периода a - (c -) решетки. Периодические напряжения кристаллической решетки

$$\varepsilon_a = \frac{a_0 - a_t}{a_0} \quad \text{и} \quad \varepsilon_c = \frac{c_0 - c_t}{c_0}. \quad (13)$$

определяется по формуле. Здесь a_0 - и c_0 (a_t - и c_t) — ненапряженные (напряженные) периоды решетки. То есть положительное натяжение означает сжатие, а отрицательное натяжение растяжение. Из приведенных выше соотношений можно определить производную массы полярона по одноосному натяжению ($i=a,c$):

$$\frac{1}{m_p} \frac{\partial m_p}{\partial \varepsilon_i} = \frac{\partial g^2}{\partial \varepsilon_i}. \quad (14)$$

Мы предполагаем, что купратное соединение $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ имеет тетрагональную кристаллическую структуру, а периоды решетки составляют $a=3,8370 \text{ \AA}$ и $c=27,1844 \text{ \AA}$. Положение апикулярного кислорода вне плоскости CuO_2 определяется $z=0,0522$. Тогда расстояние Cu-O_{ap} равно $h_0=1,4190 \text{ \AA}$. В формулах (12) и (13) выше мы используем h_0 вместо c . Полученные значения массы полярона по отношению к одноосному растяжению показаны на рисунке 1. Как видно из рисунка, производные массы полярона по одноосному растяжению сами являются функциями растяжения. Сжатие (растяжение) оси a кристаллической решетки, поскольку $(1/m_p)\partial m_p/\partial \varepsilon_a < 0$, приводит к уменьшению (увеличению) массы полярона. Аналогично, сжатие (растяжение) оси c , поскольку $(1/m_p)\partial m_p/\partial \varepsilon_c > 0$, приводит к увеличению (уменьшению) массы полярона. Для выражений этих производных, соответствующих осям a и c , находим следующие числовые значения: $(1/m_p)\partial m_p/\partial \varepsilon_a \approx -2$ и $(1/m_p)\partial m_p/\partial \varepsilon_c \approx 6.5$. На основе этой вычислительно расширенной модели Хольстейна-Хаббарда мы изучили изменение массы полярона при одноосном растяжении. Результаты расчетов показывают, что масса полярона изменяется под действием одноосного растяжения вдоль осей a — и c —.

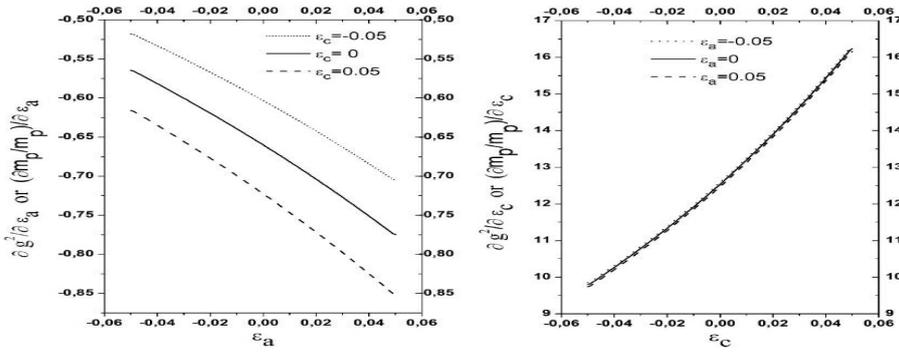


Рисунок 1.
Производные массы
полярона по
одноосному
растяжению (i=a,c)

Полученные результаты могут быть использованы для характеристики деформационных свойств $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ и других купратных соединений.

Цепочечная модель решетки купрата представлена на рисунке 2 ниже и описывается следующим образом: носитель заряда, движущийся вдоль цепочки ионов $\text{Cu}(1)$ относительно плоскости CuO_2 , взаимодействует с апикулярными ионами $\text{O}(2)$ посредством силы $f_{\vec{m}}(\vec{n})$ в уравнении 12 (пунктирные линии). t - межузловой интеграл прыжков носителя заряда. h_0 описывает длину связи между $\text{Cu}(1)$ и апикулярным кислородом $\text{O}(2)$ и рассчитывается с использованием параметра положения атома z и c по формуле $h_0 = c * z$, где ε_a - и ε_h - — относительная деформация (напряжение) решетки, a_0 - и h_0 - соответственно. Мы можем изменить формулу 12 следующим образом:

$$f_{\vec{m}}(\vec{n}) = \frac{kh_0(1-\varepsilon_h)}{(|(\vec{n}-\vec{m})|(1-\varepsilon_a)|^2 - (h_0(1-\varepsilon_h))^2)^{3/2}} \quad (15)$$

Определяем относительную деформацию (напряжение) постоянных решетки по формулам $\varepsilon_a = (a_{unst} - a_{str})/a_{unst}$ и $\varepsilon_h = (h_{0,unst} - h_{0,str})/h_{0,unst}$. «Unst» и «str» в этих выражениях описывают состояние, в котором постоянная решетки недеформирована (деформирована) соответственно. То есть сжатие (растяжение) постоянной решетки характеризуется положительным (отрицательным) натяжением. Когда электрон-фононное взаимодействие сильное, мы можем вывести массу полярона в адиабатическом приближении, рассмотрев уравнение двойного потенциала. В частности, распад основного энергетического уровня носителя заряда в среде с двойным потенциалом равен

$$\Delta E = \Delta \cdot e^{-g^2} \quad (16)$$

Мы можем найти его, используя формулу, а затем определить информацию о массе адиабатического полярона из соотношения $m = \hbar^2/2a^2\Delta E$. (16) в отношении

$$\Delta = (\hbar\tilde{\omega}/\pi) \cdot \sqrt{E_p\kappa^{3/2}/2\hbar\omega} \cdot \left(1 - \sqrt{1 - (E_p\kappa^{3/2}/2\hbar\omega)^{-1}}\right), \quad (17)$$

$$g^2 = (E_p\kappa^{1/2}/2\hbar\omega) \cdot \sqrt{1 - (E_p\kappa^{1/2}/2\hbar\omega)^{-1}}, \quad (18)$$

$\tilde{\omega} = \omega\kappa^{1/2}$ — перенормированная частота ионов, $\kappa = 1 - 1/\lambda^2$, $\lambda = E_p/2t$ — показатель, характеризующий электрон-фононное взаимодействие в

двухузловом случае и называемый константой электрон-фононного взаимодействия. Обычно купратные пленки выращивают на подложке (LaSrAlO₄, SrTiO₃, MgO и т. д.). Сетка занавеса находится в напряженном (сжатом или растянутом) состоянии, поскольку константы сетки занавеса и основания не совпадают. В частности, деформацию, возникающую в плоскости CuO₂ при выращивании купратной пленки в направлении (001), можно рассчитать следующим образом:

$$\varepsilon_{ab} = \frac{2\mu}{4\pi(1-\nu)\bar{B}} \cdot \frac{\ln(h_f/\bar{a})}{(h_f/\bar{a})}. \quad (19)$$

Здесь \bar{B} — модуль упругости (модуль двусосного растяжения) купрата, μ — модуль сдвига купрата, ν — коэффициент Пуассона, h_f — толщина пленки, \bar{a} — среднее значение постоянной решетки плоскости купрата CuO₂ a и постоянной решетки подложки a_s : $\bar{a} = (a + a_s)/2$. Не только плоскость CuO₂ купратной пленки, выращенной на подложке, напряжена, но и постоянная решетки вдоль оси c также напряжена из-за эффекта Пуассона. Если деформированная и недеформированная постоянная решетки купрата вдоль оси c равны c и c_0 соответственно, то деформация постоянной решетки вдоль этой оси определяется выражением $\varepsilon_c = (c_0 - c)/c_0$ и, по определению, коэффициент Пуассона находится из соотношения $\nu = -\varepsilon_c/\varepsilon_{ab}$. Поскольку купраты сильно анизотропны и имеют квазидвумерную структуру, ε_c и ε_h могут не быть равны друг другу. Обычно $\varepsilon_h > \varepsilon_c$. Экспериментально было даже установлено, что $\varepsilon_h \cong 2\varepsilon_c$. Используя установленные выше соотношения, качественно и количественно исследуется зависимость массы полярона от толщины купратного слоя. В качестве объектов исследования рассматриваются пленки LSCO, выращенные в направлении (001) на подложках LSAO и STO. Эксперименты показывают, что постоянные кристаллической решетки веществ, составляющих объект исследования, составляют (нм): $a = 0,37357$, $c = 1,31973$, $h_0 = 0,241115$ (LSCO), $a = 0,3756$ (LSAO) и $a = 0,3905$ (STO), коэффициент Пуассона для LSCO равен $\nu = 0,272$, модуль сдвига $\mu = 67,4$ ГПа, а модуль упругости при двусосном растяжении (упругости) $B = 248$ ГПа для пленки LSCO, выращенной в направлении (001). Зависимость напряжения на плоскости CuO₂ пленок LSCO/LSAO и LSCO/STO, выращенных в направлении (001) по формуле 18, от толщины пленки представлена на рисунке 3. На рисунке 3 шероховатость указана в единицах $\mu/2\pi\bar{B}$, толщина занавеса указана в единицах длины \bar{a} , а толстые и тонкие линии соответствуют значениям коэффициента Пуассона 0,1 и 0,5. Из-за эффекта Пуассона постоянная решетки оси c также будет изменяться соответственно изменению h_f . В результате при изменении h_f изменяются все параметры поляронной системы в завесах LSCO/LSAO и LSCO/STO, включая фактор g^2 , перенормирующий массу полярона в неадиабатическом приближении.

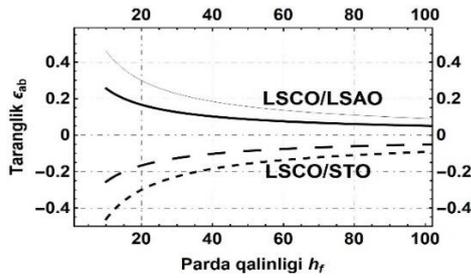


Рисунок 3. Зависимость напряжения на плоскости CuO_2 пленок LSCO/LSAO и LSCO/STO, выращенных в направлении (001), от толщины пленки

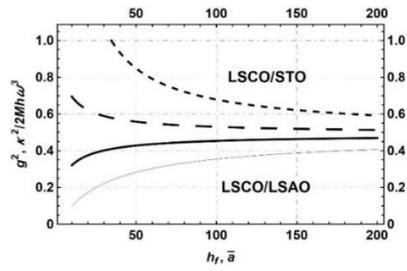


Рисунок 4. Зависимость фактора перенормировки массы от h_f в системе поляронов пленок LSCO/LSAO и LSCO/STO, выращенных вдоль направления (001).

Коэффициент g^2 зависит от толщины занавеса h_f по формуле 11, формуле 15 и формуле 19 (рисунок 4). В изучаемых системах масса неадиабатического полярона косвенно зависит от напряжений (ϵ_{ab} , ϵ_c), создаваемых в шторках, а через них и от толщины шторки h_f . Эта взаимосвязь представлена на рисунке 5. Как видно из зависимости «масса полярона – толщина вуали», по мере уменьшения толщины вуалей LSCO/LSAO и LSCO/STO масса полярона в первой системе уменьшается, тогда как масса полярона во второй системе увеличивается. Когда толщина занавеса чрезвычайно велика, чем постоянные решетки LSCO, $h_f \gg a, b, c$, занавес LSCO не подвержен влиянию базы на свойства сверхпроводимости, а чрезвычайно толстый занавес имеет объемные свойства. По этой причине при получении приведенных выше результатов мы использовали условие, что массы поляронов в обеих системах для пленки толщиной $h_f=500$ нм должны быть равны массе поляронов в объемном образце.

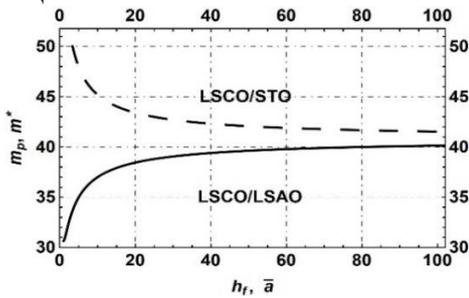


Рисунок 5. Зависимость массы полярона от толщины пленки в пленках LSCO/LSAO и LSCO/STO, выращенных в направлении (001).

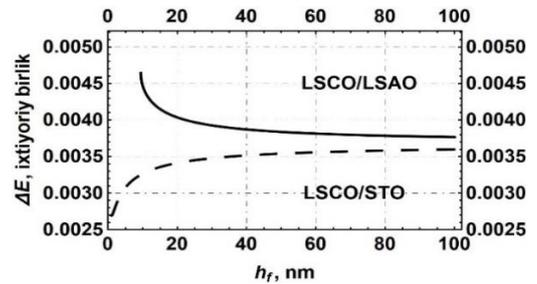


Рисунок 6. Зависимость расщепления энергетических уровней, т.е. ΔE , от h_f в основном состоянии адиабатического полярона в двойной оболочке в пленках LSCO/LSAO и LSCO/STO, выращенных в направлении (001).

То есть для пленки толщиной $h_f=500$ нм мы предположили, что $\hbar\omega \approx 75$ мэВ, $E_p \approx 0,4$ эВ и $m_p \approx 40 m_e$. Температура конденсации Бозе-Эйнштейна биполярного газа (жидкости) с такими параметрами составляет $T_{БЭК} \approx 36$ К, что равно экспериментально наблюдаемой критической температуре сверхпроводимости. Предполагая, что массовая анизотропия в LSCO равна $\gamma_m = \gamma_c/\gamma_{ab} \approx 160$, получаем, что $m_{ab} \approx 7.5 m_e$. Последний найденный результат близок к результату $m_{ab} \approx 4.9 m_e \pm 0.8 m_e$, найденному в оптимально легированном LSCO. Ожидается, что зависимость массы полярона от толщины занавеса LSCO будет аналогична представленной на рисунке 5 даже в адиабатическом приближении. Действительно, численные данные, полученные с использованием соотношений (16)-(19), показывают, что даже в

адиабатическом приближении, например, $\hbar\omega/t=0,8$, масса полярона зависит от толщины занавеса так же, как и в неадиабатическом приближении (рис. 6). С уменьшением толщины экрана в системах LSCO/LSAO (LSCO/STO) увеличивается (уменьшается) расщепление основного энергетического уровня полярона в двойной оболочке. В результате массы поляронов и биполяронов уменьшаются (увеличиваются). Это, в свою очередь, увеличивает (уменьшает) температуру конденсации Бозе-Эйнштейна $T_{БЭК}$ (критическую температуру T_c биполярного газа (жидкости)). Подобные случаи наблюдались на практике. Согласно биполярной модели проводимости, высокотемпературные проводящие купраты зависят от БЭК межузлового биполярного газа (или жидкости). В купратах (i) межузловые биполяроны образуют идеальный газ; (ii) масса биполярона равна массе двух поляронов, т.е. $m_{bp}=2m_p$, и можно предположить, что купраты находятся (iii) в сильном электрон-фононном взаимодействии (ЭФВ) и (iv) в неадиабатическом состоянии. Тогда идеальный газ межузловых биполяронов $T_{БЭК}$ можно записать в виде:

$$T_{БЭК} = \frac{3.31\hbar^2 n^{2/3}}{2k_B m^*} e^{-g^2}, \quad (20)$$

Здесь \hbar — постоянная Планка, k_B — постоянная Больсмана, m^* — масса (равная массе свободного электрона), n — плотность межузловых биполяронов. Применим теперь вышеприведенный формализм к купрату $YBa_2Cu_4O_8$. Для этого рассмотрим квазидвумерную решетку, состоящую из пирамид CuO_5 , как в $YBa_2Cu_4O_8$. Мы предполагаем, что плоскость медь-кислород (CuO_2) пирамид CuO_5 представляет собой квадратную решетку с постоянной решетки $a = 0,193$ нм, что интерпретирует расстояния плоскостей $Cu(2)$ - $O(2)$ и/или $Cu(2)$ - $O(3)$. Длина связи $Cu(2)$ - $O(1)$ $YBa_2Cu_4O_8$ составляет $0,2276$ нм, что мы связываем с $\hbar\omega$. Все эти параметры решетки измерены при температуре 85 К. Кроме того, мы принимаем $\hbar\omega = 75$ мэВ, что является обычным для купратов, для частоты фонона и устанавливаем $M = 16$ м.а.б. для апикальной массы кислорода. Прежде всего выбираем значение энергии полярона $E_p = 0,75$ эВ. При этих условиях температура горения БЭК $T_{БЭК}$ соответствует критической температуре сверхпроводника $T_c = 80$ К, что соответствует экспериментальным результатам для соединения $YBa_2Cu_4O_8$. Затем, полагая $T_{БЭК} = T_c$, вычисляем параметры полярона согласно сделанным выше предположениям и формулам (15)-(20). Рассчитанная масса полярона, соответствующая выбранной энергии полярона, составляет $m_p = 18,3m_e$. Последнюю массу следует интерпретировать как трехмерную массу полярона в массе $YBa_2Cu_4O_8$. Вычислим массу полярона в плоскости, то есть массу полярона в плоскости CuO_2 , $m_{p,ab}$. Для расчета массы плоского полярона $m_{p,ab}$ используются следующие формулы:

$$m_p = m_{p,ab}^{2/3} * m_{p,c}^{1/3} \text{ и } \gamma_{(p,m,cab)} = m_{p,c}/m_{p,ab}$$

γ_m описывает анизотропию транспортных свойств $YBa_2Cu_4O_8$ вдоль плоскости CuO_2 и направления c . Значение коэффициента $\gamma_{(m,cab)}$ можно найти экспериментально. Цех и др. экспериментально определили коэффициент анизотропии массы $\gamma_{(m,cab)} = \sqrt{m_c^*/m_{ab}^*} = 12,3$. Используя значение

коэффициента анизотропии масс, массу носителя заряда (полярона) в плоскости CuO_2 можно легко рассчитать как $m_{p,ab}=3,489m_e$. Согласно данным работ Хуссей и др., а также Тейлора и др., отношение анизотропии масс $\gamma_{m,cb}=\sqrt{m_c^*/m_b^*}=15$ и $\gamma_{m,cb}=\sqrt{m_c^*/m_b^*}=9\pm 0,3$. Если предположить, что $\gamma_{m,ca}=\gamma_{m,cb}$, то для приведенных выше соотношений Хасси и др. получим $m_{p,ab}=3,00673m_e$ и $m_{p,ab}=4,22663m_e$, а по мнению Тейлора и др., последние два результата соответствуют случаю, когда $\gamma_{m,ca}=\gamma_{m,cb}$. На самом деле между ними есть небольшая разница: $\gamma_{m,ca}\neq\gamma_{m,cb}$. $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ $\gamma_{m,ca}=m_c/m_a$ и $\gamma_{m,cb}=m_c/m_b$ дают коэффициенты анизотропии масс. Таким образом, получается одно из следующих соотношений: $\gamma_{m,ca}=13$ и $\gamma_{m,cb}=14$.

$$\gamma_{m,cab} = \frac{m_c}{m_{ab}} = \frac{m_c}{(m_a \cdot m_b)^{1/2}} = \sqrt{\frac{m_c}{m_a}} \cdot \sqrt{\frac{m_c}{m_b}} = \gamma_{m,ca} \cdot \gamma_{m,cb} = 182.$$

Тогда, используя приведенное выше соотношение анизотропии масс, масса носителя заряда (полярона) в плоскости CuO_2 равна $m_{p,ab}=3,227m_e$. Полученные результаты обобщены в таблице 1.

Соединение	Температура БЭК идеального газа междуузловых биполяронов, $T_{\text{ВЭК}} (T_c)$, КК	Энергия полярона, E_p , эВ	Трехмерная масса полярона, m_p, m_e	Коэффициент анизотропии массы, $\gamma_{m,cab}$	Масса полярона CuO_2 -плоскости внутри, $m_{p,ab}, m_e$ (теоретическая)	Масса полярона CuO_2 -плоскости внутри, $m_{p,ab}, m_e$ (эксперимент)
$\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$	80	0.75	18.3	144	3.489	$2,7 \pm 0,3$
				225	3.00673	
				81	4.22663	$3 \pm 0,3$
				182	3.227	

Видно, что масса носителя заряда (полярона) в плоскости CuO_2 не так сильно перенормирована, как ожидалось в простой модели Холстейна. Александров сообщил о существовании легких и подвижных (би)поляронов в купратах. Бангура и др. (Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 047004) и Йелланд и др. (Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 047003) сообщили об экспериментальных значениях $(2,7\pm 0,3)m_e$ и $(3,0\pm 0,3)m_e$ для масс квазичастиц в $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$, которые достаточно близки к нашим теоретическим расчетам.

Подводя итог, мы изучили купрат $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ в рамках расширенной модели Хольштейна-Хаббарда и биполярного механизма высокотемпературной проводимости. Используя аналитическую формулу для температуры БЭК, мы выбрали энергию полярона, которая обеспечивает соответствие температуры БЭК идеального газа экспериментальному значению $T_{\text{ВЭК}}$ для купрата $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$, и рассчитали трехмерную массу малого полярона. Мы рассчитали массу полярона в плоскости CuO_2 , взяв экспериментальные значения анизотропии масс в купрате $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$. Полученные нами результаты свидетельствуют о наличии легких (би)поляронов с массами $(3\div 4)m_e$ в купрате $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ и согласуются со значениями масс квазичастиц, определенными в экспериментах. В третьей

главе диссертации под названием «Критическая температура проводимости купратных пленок на основе La: влияние толщины» в рамках модели утверждается следующее: Объясняется зависимость критической температуры проводимости тонких пленок купрата LSCO, выращенных на подложках LSAO и STO, от толщины пленки. Мы предположили, что межузловые биполяроны образуют идеальный бозе-газ, и связали напряжение с температурой конденсации Бозе-Эйнштейна с помощью формулы 20. Напряжение влияет на $T_{\text{ВЭК}}$ через g^2 и n . Под действием растяжения первоначальный объем образца изменяется и рассчитывается по выражению $V(\varepsilon_a, \varepsilon_b, \varepsilon_c) = V_0(1 + \varepsilon_a)(1 + \varepsilon_b)(1 + \varepsilon_c)$. В результате концентрация биполяронов рассчитывается по следующей формуле

$$n = n_0(1 - \varepsilon_a)(1 - \varepsilon_b)(1 - \varepsilon_{ho}) \quad (21)$$

Согласно нашей теоретической модели, при выращивании завесы на подложке с малым периодом (SP) или большим периодом (LP) ожидается, что значение $T_{\text{ВЭК}}$ будет уменьшаться или увеличиваться с увеличением толщины завесы. Наша модель может ясно показать, что такая связь существует между $T_{\text{ВЭК}}$ и h_f . Для доказательства этого мы проанализировали расчетные результаты отношения $T_{\text{БЭК}}(h_f)/T_{\text{БЭК}}(\infty)$ для межузловых биполяронов в системах LSCO/LSAO и LSCO/STO в зависимости от толщины занавеса. Здесь $T_{\text{БЭК}}(h_f)$ или $T_{\text{БЭК}}(\infty)$ представляют собой температуры БЭК завес LSCO с h_f и бесконечной толщиной соответственно. Значение $h_f = \infty$ соответствует объемному состоянию купрата LSCO. Значение $T_{\text{ВЭК}}(\infty)$ установлено равным 36 К, что соответствует энергии полярона $E_p = 0,5667$ эВ.

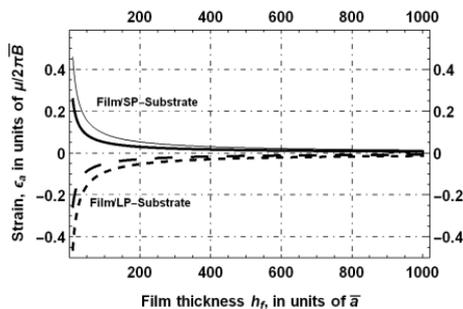


Рисунок 7. Зависимость натяжения (ε_a) вдоль оси a от толщины пленки (h_f)

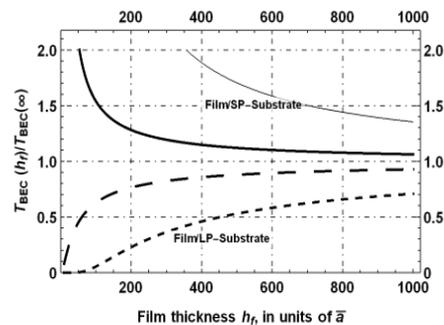


Рисунок 8. Зависимость температуры Бозе-Эйнштейна $T_{\text{БЭК}}$ от толщины пленки (h_f)

Результаты расчета отношения $T_{\text{БЭК}}(h_f)/T_{\text{БЭК}}(\infty)$ в зависимости от толщины завесы графически представлены на рисунке 8 для значений коэффициента Пуассона $\nu=0,1$ и $\nu=0,5$. Интересно, что было обнаружено, что критическая температура сверхпроводимости тонких пленок LSCO и температура БЭК межузловых биполяронов в тонких пленках LSCO зависят от толщины пленки одинаковым образом. Мы изучили зависимость $T_{\text{БЭК}}$ от толщины пленки и обнаружили, что критическая температура T_c тонких пленок LSCO и температура ВЭК межузловых биполяронов в тонких пленках LSCO зависят от толщины пленки одинаковым образом. Эти результаты наглядно демонстрируют существование глубокой корреляции между сверхпроводящими свойствами тонких пленок LSCO и БЭК межузловых

биполярнон. Сравниваем результаты с экспериментальными данными. На рисунке 9 представлена зависимость натяжения в плоскости ε_{ab} от толщины пленки h_f . Здесь сплошные и пунктирные линии принадлежат LSCO/LSAO и LSCO/STO соответственно. Для сравнения также приведены некоторые экспериментальные данные: открытые (заполненные) символы соответствуют системе LSCO/LSAO (LSCO/STO). Символы квадрата и круга взяты из работ Сато и Найто и Мейера соответственно, а символы треугольника взяты из работы Зайцевой (Acta Physica polonica A 111(1), 185-188 (2007)). Все обозначения соответствуют фактической толщине занавеса h_f , согласно экспериментальным данным.

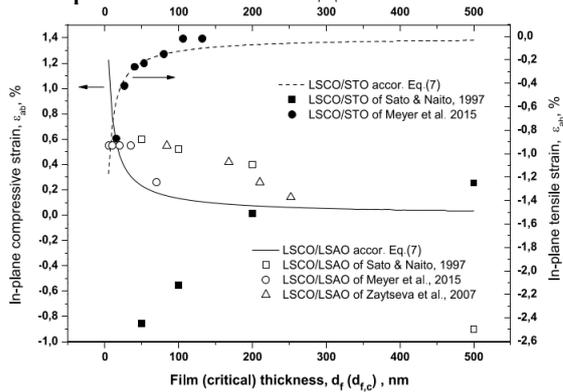


Рисунок 9. Зависимость плоскостного натяжения ε_{ab} от толщины занавеса h_f

Результаты расчета температуры БЭК $T_{БЭК}$ межузлового биполярнонного идеального газа в зависимости от критической толщины завесы h_f представлены на рисунке 10. Толстые прямые и пунктирные линии представляют теоретические значения $T_{БЭК}$ для систем LSCO/LSAO и LSCO/STO. Между тем, тонкие прямые и пунктирные линии соответствуют системам LSCO/LSAO и LSCO/STO, как сообщают Чен и др. (Chen X.J et al., Phys.Rev. B 61, 9782-9785 (2000)) отражает теоретические значения T_c , приведенные в работе. На том же рисунке 10 мы сравнили температуру сверхпроводимости T_c некоторых пленок LSCO, выращенных на подложках LSAO и STO, с экспериментальными результатами. В частности, были определены значения T_c следующих пленок: пленки, выращенные на подложках LSAO: открытый квадрат: $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$, открытая звездочка: $La_{1.9}Sr_{0.1}CuO_4$, открытый левый треугольник: $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$, открытый треугольник, направленный вниз: $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$, открытый треугольник: $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$. Занавески, выращенные на подложках STO: заполненный квадрат: $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$, заполненная звездочка: $La_{1.9}Sr_{0.1}CuO_4$, заполненный левый треугольник: $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$, заполненный ромб: $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$, заполненный треугольник: $La_{1.86}Sr_{0.14}CuO_4$. Экспериментальные наблюдения показывают, что в диапазоне толщин пленок LSCO до 100 нм наша теоретическая модель согласуется с экспериментальными результатами. Наша модель также предсказывает уменьшение $T_{БЭК}$ с увеличением толщины завесы в системе LSCO/LSAO и увеличение в системе LSCO/STO. С точки зрения количественного согласия с экспериментальными результатами результаты теоретических расчетов на рисунке 10 показывают, что они близки к некоторым экспериментальным данным. Результаты последнего эксперимента также показаны на рисунке 10. Стоит отметить, что результаты наших

расчетов гораздо лучше соответствуют значениям $T_{\text{БЭК}}$, чем значения T_c в экспериментальных данных. Замечено, что для заданной толщины пленки $T_{\text{БЭК}}$ всегда больше T_c в системе LSCO/LSAO и меньше в системе LSCO/STO. Интересно также проанализировать, как изменяются поляронные свойства системы в зависимости от толщины экрана.

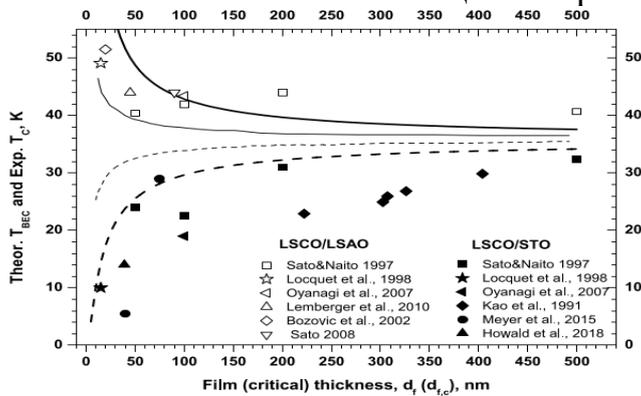


Рисунок 10. Зависимость идеального газа $T_{\text{БЭК}}$ межузловых биполяронов от толщины занавески.

Знание последних свойств особенно важно, поскольку они позволяют определить ключевые параметры системы, определяющие зависимость $T_{\text{БЭК}}$ от толщины завесы. В нашем подходе степень легирования принимается равной $x = 0,15$, а изменение концентрации носителей n в зависимости от толщины мембраны имеет очень малый вклад. Таким образом, в качестве основного параметра определяется масса полярона (или масса межузлового биполярона). Массы поляронов для систем LSCO/LSAO и LSCO/STO были рассчитаны для различных толщин. Здесь мы выбираем значение энергии полярона E_p таким образом, чтобы расчетное значение $T_{\text{БЭК}}$ соответствовало экспериментальной температуре сверхпроводимости T_c для объемного образца $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$, т.е. $T_{\text{БЭК}}=T_c=36$ К. Фактически в наших расчетах мы моделируем объемный образец LSCO с достаточно толстой вуалью толщиной $0,1$ мм. В данной модели предполагаются следующие параметры: $E_p=0,40$ эВ, масса полярона $m_p=40,8m_e$, $m_{(p,ab)}=7,5$. Масса плоского полярона $m_{(p,ab)}$ рассчитывалась по следующим формулам: $m_p = m_{p,ab}^{2/3} m_{p,c}^{1/3}$ и $\gamma_m = \frac{m_{p,c}}{m_{p,ab}} = 160$. Значения этих поляронных параметров хорошо согласуются с результатами других предыдущих исследований зависимости T_c от уровня легирования в пленках LSCO толщиной 50 нм.

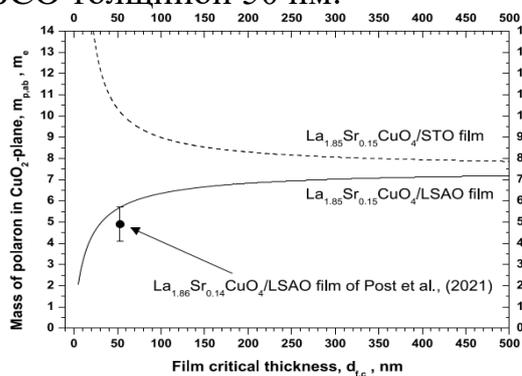


Рисунок 11. Изменения массы полярона $m_{p,ab}$ в плоскости (CuO_2) в зависимости от критической толщины пленки $d_{f,c}$ в системах LSCO/LSAO (сплошная линия) и LSCO/STO (штриховая линия). Для очень толстого экрана масса полярона в плоскости $d_f = 0,1$ мм (почти объемная) была выбрана такой, чтобы наша $T_{\text{БЭК},b}$ была равна экспериментальной $T_{c,b} = 36$ К. Символ заполненного круга (\bullet) и планки погрешностей взяты из работы Поста и др. представляет собой значение циклотронной массы дырки в пленке $\text{La}_{1.86}\text{Sr}_{0.14}\text{CuO}_4$ толщиной 53 нм.

Рассчитанные значения масс поляронов в плоскости в системах LSCO/LSAO и LSCO/STO показаны на рисунке 11. На этом рисунке наблюдается уменьшение массы полярона в системе LSCO/LSAO и увеличение массы

полярона в системе LSCO/STO, что связано с уменьшением толщины завесы. При заданной толщине занавеса масса полярона в системе LSCO/LSAO всегда меньше массы полярона в системе LSCO/STO. Подобно случаю в системе LSCO/STO, увеличение массы полярона с уменьшением толщины занавеса является давно известным явлением для состояния полярона с большим радиусом. В пленках LSCO/STO изменение $m_{p,ab}$ в зависимости от толщины аналогично случаю объемного полярона, тогда как в пленках LSCO/LSAO наблюдается противоположное. То есть в завесах LSCO/LSAO по мере уменьшения толщины завесы $m_{p,ab}$ уменьшается и становится меньше значения в объемном образце. В последнем случае значение $T_{\text{ВЭК}}$ штор увеличивается. Вывод о массе полярона в завесах LSCO/LSAO был недавно сделан Постом и др. (Phys. Rev. B 103, 134515 (2021)) подтверждено результатами эксперимента, проведенного. Они измерили циклотронную массу полости в пленке $\text{La}_{1.86}\text{Sr}_{0.14}\text{CuO}_4/\text{LSAO}$ толщиной 53 нм и определили значение $m_{h,c} = (4.9 \pm 0.8)m_e$. Наш результат для массы полярона в плоскости в пленке $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4/\text{LSAO}$ толщиной 53 нм составляет $5,7m_e$, что очень близко к приведенному выше экспериментальному результату.

В главе диссертации «Критическая температура сверхпроводимости однослойных купратов: биполярный подход» рассматривается проводимость однослойных купратов в рамках принципа преформированных биполяронов. Принимая расширенную модель Хольштейна-Хаббарда за основу сильно взаимодействующей системы полость-решетка монослойных купратов, установлена связь между температурой БЭК $T_{\text{ВЭК}}$ и параметрами решетки идеального газа межузловых биполяронов. Показано, что рассчитанные значения температуры БЭК биполяронов в монослойных купратах соответствуют (прямо пропорциональны) расстоянию между плоскостным ионам Cu и апикальным ионом кислорода O(2) монослойных купратов. Используя реалистичные экспериментальные значения параметров решетки монослойных купратов, мы обнаружили количественное и качественное соответствие между $T_{\text{ВЭК}}$ и T_c в исследуемых системах. Полученные к настоящему времени экспериментальные данные и проверенные модели для различных купратов показывают, что явление высокотемпературной проводимости является сложным и различным для разных соединений. Тем не менее, есть и общие черты. В результате в настоящее время существует потребность в модели, которая могла бы объяснить все экспериментальные данные, особенно различия в значениях T_c , с общей точки зрения. В данной работе мы пытаемся заполнить существующий пробел и ввести связь между параметрами решетки купрата и T_c , которая качественно и количественно согласуется с экспериментами. Для этого мы полагаемся на расширенную модель Хольштейна-Хаббарда (или Fröhlich Kulon) для ВТСП, согласно которой образуются межузловые биполяроны и, как следствие, их Бозе-Эйнштейновская конденсация (БЭК) приводит к проводимости. Итак, здесь мы связываем T_c с температурой БЭК $T_{\text{ВЭК}}$, межузловых биполяронов. Полезно рассмотреть вопрос о проводимости купратов в рамках биполярной модели, поскольку экспериментальные

данные показывают, что «состояние проводимости купратов не может быть описано теорией БКШ ни в одной части фазовой диаграммы».

Мы выразили межузловой биполярон $T_{БЭК}$ (формула 20) через два основных параметра системы: (i) плотность межузлового биполярона n и (ii) показатель умножения массы полярона g^2 . Используя приведенные выше уравнения, мы можем изучить зависимость $T_{ВЭК}$ от параметров решетки a и h_0 . Как и в нашем исследовании, важную роль играет электрон-фононное взаимодействие носителей заряда в плоскости CuO_2 с поляризованными колебаниями оси с апикальных ионов кислорода. (i) Имеем $M=16$ м.а.б. ($2,6565032 \cdot 10^{-26}$ кг); (ii) и мы предполагаем значение $n_0=1 \cdot 10^{21}$ см^{-3} для концентрации биполяронов, которое является общим для всех купратов. Кроме того, мы связываем расстояние между ионами нижней цепи и ионами верхней цепи h_0 на рисунке 12 с длиной связи $\text{Cu}(1)\text{-O}(2)$ купрата. Расстояние между ионами нижней цепочки на рисунке 13 мы связываем с периодом плоской решетки a тетрагональной фазы купратов CuO_2 . Начальной точкой нашего численного анализа является задание значений $E_p=0,4$ эВ и частоты колебаний апикального иона кислорода $\hbar\omega=0,075$ эВ ($1,20163242 \cdot 10^{-20}$ Дж) для $\text{La}_{1,85}\text{Sr}_{0,15}\text{CuO}_4$. Следующий выбор гарантирует, что $T_{ВЭК}$, рассчитанная с использованием параметров решетки $\text{La}_{1,85}\text{Sr}_{0,15}\text{CuO}_4$, согласуется с экспериментальным значением $T_c=36$ К для вышеуказанного купрата.

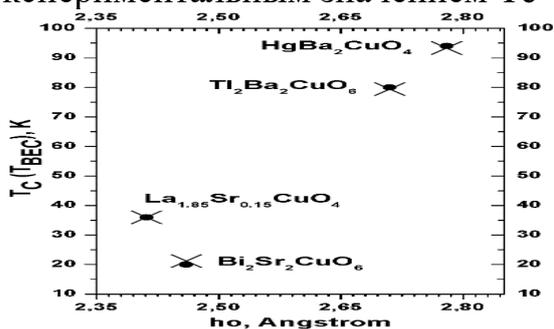


Рисунок 12. Экспериментальные значения T_c (заполненные черные кружки \bullet) и теоретически рассчитанные значения $T_{БЭК}$ (\times) в зависимости от h_0 для однослойных купратов.

Затем мы приступаем к расчету $T_{БЭК}$ для других однослойных купратов, используя точные экспериментальные значения периодов их решеток. Наше значение $T_{БЭК}$ удовлетворительно согласуется с экспериментальными значениями T_c монослойных купратов при использовании известных значений частоты колебаний апикального иона кислорода.

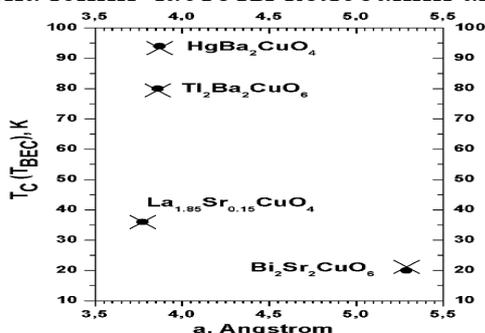


Рисунок 13. Экспериментальные значения T_c (заполненные черные кружки \bullet) и теоретически рассчитанные значения $T_{ВЭК}$ (\times) в зависимости от периода решетки a для однослойных купратов.

В наших расчетах мы устанавливаем значение $\hbar\omega$ равным 80 мэВ, 58 мэВ и 55 мэВ для однослойных купратных материалов $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_{6+d}$, $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_6$ и $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$ соответственно. Эти значения, относящиеся к частоте колебаний апикального иона кислорода, лежат в экспериментально определенном

диапазоне частот от 40 мЭВ до 75 мЭВ. Рассчитанные значения $T_{БЭК}$ для рассматриваемых купратов представлены на рисунках 12 и 13. На тех же рисунках 12 и 13 для сравнения представлены экспериментальные значения T_c однослойных купратов $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$, $Bi_2Sr_2CuO_{6+d}$, $Tl_2Ba_2CuO_6$ и $HgBa_2CuO_4$. Как видно из рисунков 12 и 13, теоретически рассчитанные значения $T_{БЭК}$ близки к экспериментальным значениям T_c однослойных купратов. Кроме того, в соответствии с экспериментальными наблюдениями, более высокое значение $T_{БЭК}$ в нашей модели соответствует большему расстоянию $Cu-O_{арех}$ (рисунок 12) и меньшему периоду решетки в плоскости (расстояние $Cu-O$) (рисунок 13). Стоит отметить значения $T_{БЭК}$ (и T_c) соединения $Bi_2Sr_2CuO_{6+\delta}$. Это значение мало по сравнению с соединением $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$, и хотя расстояние h_0 соединения $Bi_2Sr_2CuO_{6+d}$ больше, эту ситуацию также можно объяснить в рамках нашей модели. Дело в том, что период решетки вдоль медно-кислородной плоскости соединения $Bi_2Sr_2CuO_{6+d}$ больше, чем у соединения $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$. Относительная абсолютная величина разницы между периодами решеток в медно-кислородной плоскости соединений составляет около 43%, тогда как для h_0 эта разница сравнительно невелика 2%. Плоскость CuO_2 соединения $Bi_2Sr_2CuO_{6+d}$ значительно расширена по сравнению с плоскостью CuO_2 соединения $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$. Наши расчеты показывают, что при таком расположении ионов решетки значение $T_{БЭК}$ (и T_c) уменьшается, хотя удлинение расстояния $Cu-O_{арех}$ несколько увеличивает $T_{БЭК}$ (и T_c).

Мы рассмотрели однослойные купраты $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$, $Bi_2Sr_2CuO_{6+d}$, $Tl_2Ba_2CuO_6$ и $HgBa_2CuO_4$ в рамках расширенной модели Холстейна-Хаббарда (или Фрелиха-Кулона). В частности, нас интересовали значения T_c перечисленных выше купратов. Мы приняли биполярный механизм сверхпроводимости для купратов, где T_c связана с температурой конденсации Бозе-Эйнштейна $T_{БЭК}$ идеального газа межузельных биполяронов. В нашей модели мы определили $T_{БЭК}$ с помощью формулы 20, где масса (би)полярона и концентрация биполярона зависят от структуры кристаллической решетки через постоянные решетки. Таким образом, $T_{БЭК}$ зависит от параметров решетки купрата. Затем мы рассчитали значения температуры конденсации Бозе-Эйнштейна $T_{БЭК}$ для идеального газа межузельных биполяронов в исследуемых купратах. Для этого мы рассмотрели значения реальных постоянных решетки однослойных купратов. Рассчитанные для идеального газа межузловых биполяронов значения температуры бозе-эйнштейновской конденсации $T_{БЭК}$ удовлетворительно согласуются со значениями температуры сверхпроводимости T_c рассматриваемых купратов. Представленный здесь подход можно применить и к другим купратам.

В этой главе мы рассмотрели купраты на основе высокотемпературных сверхпроводников на основе оксидов меди (купратов) La , Bi , Tl и Hg . Хотя купраты различаются по составу, их кристаллические структуры схожи и, более того, они имеют общие структурные единицы. Также было обнаружено, что сверхпроводящие свойства купратов сильно зависят от положения ионов вне плоскости CuO_2 . Полученные к настоящему времени экспериментальные

данные и проверенные модели для различных купратов показывают, что явление сверхпроводимости с высокой T_c является сложным и различается для разных соединений. Тем не менее, есть и общие черты. В результате в настоящее время существует потребность в модели, которая могла бы объяснить все экспериментальные данные, в частности разницу между значениями T_c , в общем виде. В данной работе мы попытались восполнить этот пробел.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Изучена зависимость массы полярона от толщины завесы LSCO. Теоретические соотношения показывают, что как в неадиабатическом, так и в адиабатическом приближении масса полярона косвенно зависит от толщины занавеса. В результате численного анализа данных установлено, что в обоих приближениях масса полярона уменьшается в системе LSCO/LSAO с уменьшением толщины шторы и увеличивается в системе LSCO/STO.
2. Для относительных изменений массы полярона были получены результаты $\left(\frac{1}{m_p}\right) \partial m_p / \partial \varepsilon_a < 0$, $\left(\frac{1}{m_p}\right) \partial m_p / \partial \varepsilon_c < 0$. Было обнаружено, что сжатие (растяжение) оси a решетки приводит к уменьшению (увеличению) массы полярона, тогда как сжатие (растяжение) оси c приводит к увеличению (уменьшению) массы полярона.
3. Трехмерная масса малого полярона была рассчитана путем выбора энергии полярона, которая обеспечивает соответствие температуры БЭК ($T_{БЭК}$) идеального газа межузловых биполяронов экспериментально определенному значению (T_c) критической температуры сверхпроводимости купрата $YBa_2Cu_4O_8$. Затем было объяснено, что в купрате $YBa_2Cu_4O_8$ присутствуют легкие (би)поляроны с массами $(3 \div 4)m_e$ и что результаты теоретических расчетов согласуются с экспериментальными значениями.
4. В контексте биполярной Бозе-Эйнштейновской конденсации исследована зависимость критической температуры сверхпроводимости пленок LSCO, выращенных на подложках LSAO и STO, от толщины пленки. Установлено, что теоретические результаты согласуются с экспериментальными данными.
5. Значения критической температуры сверхпроводимости (T_c) однослойных купратов были изучены на основе биполярного механизма и обнаружено, что они связаны с температурой конденсации Бозе-Эйнштейна ($T_{БЭК}$).
6. Численно исследована зависимость температуры конденсации Бозе-Эйнштейна ($T_{БЭК}$) от периода решетки и расположения апикального кислорода купратов с одной медно-кислородной плоскостью, и показано, что полученные результаты согласуются с критической температурой сверхпроводимости (T_c).

**SCIENTIFIC COUNCIL PhD.03/27.02.2020.FM.106.01 ON AWARD
OF SCIENTIFIC DEGREES AT THE FERGHANA POLYTECHNIC
INSTITUTE**

NUKUS STATE PEDAGOGICAL INSTITUTE NAMED AFTER AJINIYAZ

KHAJIBAEV DUSMUKHAMMAD G'ANIYEVICH

**POLARONIC EFFECT IN THE SUPERCONDUCTING PROPERTIES OF
THE CUPRATE'S FILM AND BULK SAMPLES**

01.04.07 – Condensed matter physics

**DISSERTATION ABSTRACT
of the doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences**

Ferghana – 2025

The theme of the doctor of philosophy (PhD) dissertation in physical and mathematical sciences is registered with the Higher Attestation Commission of the Ministry of Higher Education, science and Innovation of the Republic of Uzbekistan under the No. B2023.3.PhD/FM924.

The doctoral (PhD) dissertation was carried out at the Nukus state pedagogical institute named after Ajiniyaz.

The abstract of the dissertation was posted in three (Uzbek, Russian, English (resume)) languages on the website of the Scientific Council at www.ferpi.uz and on the website of “Ziyonet” Information and Educational portal at www.ziyonet.uz.

Scientific supervisor:	Yavidov Bakhram Yangibaevich Doctor of Physical and Mathematical Sciences, docent
Official opponents:	Jumayev Mustaqim Rofiyevich Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor Sobirov Makhmud Mamarasulovich Candidate of Physical and Mathematical Sciences, docent
Leading organization:	Institute of Nuclear Physics of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan

The defense of the dissertation will be held on “___” _____ 2025, at ___ at the meeting of the Scientific Council No. PhD.03/27.02.2020.FM.106.01 at the Fergana polytechnic institute (Address: 150107, Ferghana street 86, Ferghana city. tel. (+99873) 241-12-06; fax (+99873) 241-12-06; e-mail: uzferfizika@mail.ru).

The doctoral (PhD) dissertation can be looked through at the Information Resource Centre of the FerPI (registered under No. _____) Address: 150107, FerPI, Ferghana street 86, Fergana city, tel. (+99873) 241-12-06.

The abstract of dissertation was distributed on “___” _____ 2025.
(Registry record No. ___ dated “___” _____ 2025.)

N.Kh. Yuldashev

Chairman of the Scientific Council for Awarding
Doctor of physical and mathematical sciences, Professor

B.J. Axmadaliev

Scientific Secretary of the Scientific Council for Awarding
Doctor of physical and mathematical sciences

S.M. Otajonov

Chairman of the Scientific Seminar of the Scientific
Council on Award of Scientific Degrees,
Doctor of physical and mathematical sciences, Professor

INTRODUCTION (annotation the Doctor of Philosophy (PhD) dissertation)

Relevance and necessity of the dissertation topic. Today, the world is facing such urgent problems as finding efficient energy sources, developing efficient methods of energy production, and storing and transporting energy. The discovery of new materials with high electrical conductivity and further improvement of the electrophysical properties of existing materials are seen as one of the solutions to these problems. In particular, high-temperature superconducting (HTS) copper-oxygen compounds (cuprates) are considered promising in the creation of energy-saving technologies. Cuprates have been an object of active research in the physics of HTS condensed matter for the past 40 years. In recent years, the further increase in the study of the HTS properties of cuprates is due to their widespread introduction into practice. In particular, due to their unique properties, cuprates are currently used in the manufacture of micro- and nanoelectronic devices (microwave filters, mixers, antennas), magnetic devices (MRT devices, particle accelerators, energy storage systems), sensors (magnetic field sensors, high-frequency electromagnetic wave generators) and 2nd generation semiconductors. Also, according to prospective predictions, HTS can be widely used in the development of quantum processors, which will form the basis of quantum computers in the near future. One of the main reasons for the widespread use of HTS in all areas of science, technology and production is the gradual depletion of traditional energy sources in the world, and therefore the transition to energy-efficient and environmentally friendly technologies.

Despite the research and development work carried out in the field of HTS in scientific institutions of developed countries in recent years and the results achieved, there are still a number of unresolved problems related to cuprates, without which the widespread use of cuprates in practice cannot be rapidly developed. Among such problems, one can cite the lack of a complete theory of cuprate HTS, and the existing theoretical models cannot fully explain the change in the HTS properties of cuprates as a result of changes in the crystal structure. In particular, despite the fact that it has been established that the change in the distance between the CuO_2 plane and the apical oxygen in the crystal structure of cuprates is of great importance in determining the HTS properties of cuprates, there is still no theoretical model that describes the dependence of the HTS critical temperature of cuprates on this distance, taking into account the strong electron-phonon interaction in cuprates. Existing theoretical models are based on magnetic interactions, and do not take into account the strong electron-phonon interaction, i.e. the polaron effect, which is manifested in many experimental and thin film properties of cuprates. Therefore, there is a need for theoretical studies of the polaron effect in the HTS properties of cuprates, bulk samples and thin films. In this regard, it is extremely important to theoretically study the effect of changing the distance between the CuO_2 plane and the apical oxygen in the crystal structure of cuprates on the charge carrier mass in cuprates, the HTS critical temperature of bulk cuprates, and the thickness of the thin film of cuprates on the HTS critical temperature of the film.

In our republic, large-scale measures are being taken to conduct research and develop new technologies that will help in the discovery of energy-efficient materials, the use of existing ones and the expansion of their prospects. The decrees issued by the head of our state also pay attention to the use of energy-efficient materials and the transition to green energy. In particular, the Strategy for the Development of New Uzbekistan for 2022-2026 sets out specific tasks for "... uninterrupted supply of the economy with electricity, active implementation of "Green Economy" technologies in all spheres of life, and increasing energy efficiency...". In implementing these tasks, it is important to discover new materials with high electrical conductivity or improve existing ones, including cuprates, volumetric samples and thin films, and theoretical research on the polaron effect in HTS properties.

The Decree of the President of the Republic of Uzbekistan No. PF-60 dated January 28, 2022 "On the Development Strategy of New Uzbekistan for 2022-2026", No. PQ-4422 dated August 22, 2019 "On urgent measures to increase the energy efficiency of economic sectors and the social sphere, introduce energy-saving technologies and develop renewable energy sources", No. PF-6097 dated October 29, 2020 "On approval of the Concept for the Development of Science until 2030", No. PQ-5032 dated March 19, 2021 "On measures to improve the quality of education in the field of physics and develop scientific research" and other regulatory legal acts related to this activity are implemented in accordance with the tasks set out in this Decree. dissertation research serves a certain purpose.

Relevance of the research to the priority areas of science and technology development of the Republic of Uzbekistan. The dissertation work was carried out in accordance with the II priority area of the development of science and technology of the Republic of Uzbekistan "Energy, energy efficiency and alternative energy sources".

Degree of study of Problem. The problem of conductivity in cuprates has been studied theoretically and experimentally by many scientists around the world. In particular, it has been studied in the works of foreign scientists C. Chen (China), H.Q. Lin (China), T.L. Meyer (USA), I. Zaytseva (Poland), L. Chen (USA), H.L. Kao (USA), M.Z. Cieplak (Poland), L. Howald (Switzerland), J.P. Locquet (Switzerland), H. Oyanagi (Japan), M. Naito (Japan), H. Sato (Japan), J. Bonča (Slovenia), M. Zoli (Germany), K.W. Post (USA), M. Berciu (Canada), A.S. Alexandrov (England), P.E. Kornilovitch (USA), H.J. Chen (Switzerland), R. Khasanov (Switzerland). In our country, scientists such as S. Djumanov, B. Yavidov, P.J. Baymatov, B. Abdullaev, B. Narimbetov, D. Gulamova, D. Djuraev, M. Ibragimova, U. Kurbanov, Sh. Djumanov, O. Ganiev, E. Karimboev, A. Zhalekeshov are conducting research to study various properties of conductivity in cuprates.

Currently, there are several theoretical models of high-temperature superconductivity, including the extended Holstein-Hubbard model, Ginzburg's exciton model, Hubbard model, Holstein-Hubbard model, Mott-Hubbard model, Landau's Fermi-liquid model, t-J model, Anderson's resonant valence bond model, etc. However, there is no generally accepted theory. At the same time, many

experiments show that the electron-phonon interaction is stronger than other interactions in HTS cuprates and that the charge carriers behave like (bi)polarons. In view of this, there is a need to interpret and theoretically explain the experimental results collected based on the polaron approach.

Connection of dissertational research with the plans of scientific research works of the scientific research institution, where the dissertation was conducted. In accordance with the plans to ensure the implementation of the Decree of the President of the Republic of Uzbekistan No. PF-6097 dated October 29, 2020 "On Approval of the Concept of the Development of Science until 2030", the topic "Study of the Properties of Electronic Disturbances in Promising Materials" (2021-2026) was carried out within the framework of the Minutes of the Scientific Council of the Nukus State Pedagogical Institute named after Ajinyoz dated November 30, 2021 No. 4).

The aim of the Research. The aim of this work is to theoretically investigate the influence of the (bi)polaron effect associated with structural changes in the copper-oxygen plane and apical oxygen location on the superconducting properties of cuprate films and bulk samples.

The tasks of the research:

Study of the relationship between polaron parameters and crystal lattice strains in La-based cuprates;

Calculation of the polaron mass in $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ cuprate and comparison with experimental results;

Proposing a theory of the effect of curtain thickness on polaron parameters in cuprate curtains;

Study of the effect of film thickness on T_c of film-like La-based cuprates;

Study of the dependence of T_c of single-layer cuprates on the distance between the copper oxygen plane and the apical oxygen;

Numerical study of the dependence of T_c on the apical oxygen location of cuprates with one copper oxygen plane.

The objects of the research. The strong interacting electron-phonon system, polaron and bipolaron, including $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$, $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_6$, and $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$.

The subject of the research. The mass of the charge carrier (polaron) in the electron-phonon interaction (EPI) affected by uniaxial strain, uniaxial pressure, the Bose-Einstein condensation (BEC) of bipolarons, superconductivity, and thickness effects.

The methods of the research. Extended Holstein-Hubbard model, Second quantization method, Bipolaron approach to superconductivity, Numerical computational methods.

The scientific novelty of the research.

For the first time, a theoretical model has been developed that allows calculating the charge carrier mass in the high-temperature superconducting $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ cuprate based on the bipolaron approach to conductivity, taking into account the location of the apical oxygen in the crystal lattice relative to the copper-oxygen plane;

For the first time, a theoretical model has been developed based on the bipolaron model of superconductivity, describing the dependence of the critical superconductivity temperature (T_c) of high-temperature superconducting cuprate films on the film thickness and the difference between the film and substrate lattice constants;

The superconductivity critical temperature (T_c) of a high-temperature superconducting LSCO cuprate film grown on an LSAO (STO) substrate increases (decreases) with decreasing film thickness, based on the bipolaron model of superconductivity for the first time;

For the first time, the difference in the critical superconducting temperatures of the high-temperature superconducting $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$, $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_6$, and $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ cuprates with one copper-oxygen plane is based on the bipolaron approach, taking into account the location of the apical oxygen in the crystal lattice relative to the copper-oxygen plane.

Practical results of the research:

The dependence of the polaron mass in a thin film of LSCO on the uniaxial strains arising in the crystal lattice has been studied;

The charge carrier mass in YBCO cuprate was calculated;

A theory has been developed describing the dependence of the critical temperature T_c of a thin LSCO film on the film thickness;

The critical temperature of superconductivity T_c of cuprates with one copper oxygen plane has been explained as a function of the location of the apical oxygen.

The reliability of the research results: The conclusions derived theoretically, including the use of the Hubbard model, are confirmed by their alignment with the main laws governing the dependence of T_c on film thickness and uniaxial strain. The use of modern, proven methods in condensed matter physics, tested over many years, supports this. The results of the calculations performed using validated methods of theoretical physics are consistent with the experimental data.

Scientific and practical significance of the research results: The scientific significance of the research results is that the obtained results will be useful in developing a microscopic theory of HTS of cuprates. The HTS properties of cuprates, the charge carrier mass, and the critical temperature of conductivity values vary directly depending on the crystal structure through the polaron effect. In particular, the HTS properties of bulk samples and thin films of cuprates are determined by the distance between the copper-oxygen plane and the apical oxygen. This, in turn, will help improve theoretical knowledge linking the physical properties of cuprates with their crystal structure.

The practical significance of the research results is that studying the effect of the thickness of cuprate thin films grown on different substrates on the critical temperature of the film superconductivity can be used in theoretical modeling and applied materials science.

Implementation of the research results: Based on the results obtained from studying the polaron effect in the superconducting properties of films and bulk samples of cuprates:

The results obtained on the dependence of the critical temperature of superconductivity on the thickness of the film allowed to improve the mechanism of growth of thin films of Bi-2212 HTS by the sol-gel method through the substrate effect and optimize the superconducting properties of the films (International Journal of Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects 684, 133134, 2024);

Scientific innovations such as the explanation of the charge carrier mass in $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ cuprate based on the bipolaron model of superconductivity, the proposed theoretical model describing the dependence of the critical temperature of superconductivity of cuprate films on the film thickness, and the qualitative and quantitative explanation of the dependence of the critical temperature of superconductivity of LSCO films on the film thickness based on the bipolaron model were used to compare the scientific results of the fundamental scientific research program on the topic "Electronic theory of doped $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ cuprates and its application to the study of the formation and separation of dielectric/metallic and superconducting phases at the nanoscale" within the framework of the research program of the Institute of Nuclear Physics of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan for 2020-2024. (Reference No. 2/1255-2555 of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan dated November 15, 2024). The use of these scientific results made it possible to determine the mass of charge carriers in Y124 cuprate and determine the critical temperature of the conductivity of a thin film of LSCO based on the film thickness.

Testing of the Research Results: The main results of the dissertation have been discussed and reviewed at 8 international and national conferences.

Publication of the research results: A total of 14 scientific papers have been published on the dissertation topic. Of these, 6 articles have been published in scientific journals recommended by the Higher Attestation Commission under the Ministry of Higher Education, Science, and Innovation of the Republic of Uzbekistan for publishing the main scientific results of doctoral dissertations. Additionally, 1 of these articles was published in a journal indexed in the Scopus database.

Structure and volume of the dissertation: The dissertation consists of an introduction, four chapters, a conclusion, a list of published works, a list of references, and appendices. The total volume of the dissertation is 120 pages.

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

I bo'lim (I часть; Part I)

1. Xajibayev D.G', Yavidov B.Ya. Polaron massasining taranglik (bosim) bo'yicha hosilalari // Fan va Jamiyat. – Nukus (O'zbekiston), – 2022. – №3. 15-17-b (01.00.00; №15).
2. Xajibayev D.G', Yavidov B.Ya. $YBa_2Cu_4O_8$ kupratida zaryad tashuvchisi massasi // Ilmiy axborotnoma. – Namangan(O'zbekiston), – 2023. – №7. 14-17-b. (01.00.00; № 7).
3. Bakhrom Yavidov, Dismukhammad Khajibaev. Film Thickness Dependence of the Critical Temperature of Superconductivity of LSCO Films: A Bipolaron Model Approach // Journal of Low Temperature Physics, – 2023. – V.213, №5. –pp. 291–305. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10909-023-03002-z>. (USA, Springer, IF-1.1, Q3)
4. Xajibayev D.G', Yavidov B.Ya. Kupratlar pardalarida polaron massasi: parda qalinligi samarasi // Fan va Jamiyat. – Nukus (O'zbekiston), 2023. – №2. 7-10-b (01.00.00; №15);
5. Khajibayev D.G', Yavidov B.Ya. On correlation of Cu-O_{apex} distance and T_c of single layered cuprates // Scientific Bulletin Physical and Mathematical Research. – Andijan (Uzbekistan), 2023. Special Issue . – pp. 97-101.(01.00.00; №13)
6. Khajibayev D.G', Yavidov B.Ya., Jalekeshov A.S. On doping and Thickness dependence of T_c of La_{2-x}Sr_xCuO₄ thin films // Scientific Bulletin. – Namangan(Uzbekiston), – 2024. – №5. – pp. 56-61. (01.00.00; № 7).

II bo'lim (II часть; Part II)

7. Khajibayev D.G', Nurimbetov K., Yavidov B.Ya., On thickness dependence of T_c of La_{2-x}Sr_xCuO₄ films // Proceedings of XV International Scientific Conference «Solid State Physics» December 8-10, 2022, Astana, Kazakhstan. p. 78-80.
8. Xajibayev D.G', Otajonov S.M., Yavidov B.Ya. La_{2-x}Sr_xCuO₄ yuqqa pardasi o'taotkazuvchanlik kritik harorati T_c ning parda qalinligiga bog'liqligi// Сборник тезисов международной конференции «Классический и квантовый релятивистский идеальный газ» 28 февраля-1 марта 2023 года, Бухара (Узбекистан). с. 40-42
9. B.Ya. Yavidov., D.G', Khajibaev., S.M. Otajonov. Mass of small polaron in La_{2-x}Sr_xCuO₄ films: effect of film's thickness // Abstract book of the 8th International Conference on Superconductivity and Magnetism (ICSM2023), 4-11 May 2023, Ölüdeniz-Fethiye Türkiye. p.162.
10. D.G'. Khajibaev., S.M. Otajonov., B.Ya. Yavidov., On the effect of film's thickness on T_c of La_{2-x}Sr_xCuO₄ films // Abstract book of The 8th International Conference on Superconductivity and Magnetism (ICSM2023), 4-11 May 2023, Ölüdeniz-Fethiye Türkiye. p.465

11. D.G'. Khajibaev, B.Ya. Yavidov, S.M. Otajonov, K.K. Nurimbetov. Charge carrier's mass and critical temperature of superconductivity in LSCO films: The effect of film thickness // Сборник докладов XIII Иссик-кульской Международной школа-конференции по радиационной физике, посвященная 90-летию А.А.Алыбакова – основателя физики твердого тела в Кыргызской Республике, 31-июля – 6-августа 2023 года, Иссик-Куль (Кыргызская Республика). с. 59-61
12. B.Ya. Yavidov, D.G'. Khajibaev, S.M. Otajonov, K.K. Nurimbetov. On correlation of Cu-O_{арех} distance and T_C of single layer cuprates // Сборник докладов XIII Иссик-кульской Международной школа-конференции по радиационной физике, посвященная 90-летию А.А.Алыбакова – основателя физики твердого тела в Кыргызской Республике, 31-июля – 6-августа 2023 года, Иссик-Куль (Кыргызская Республика). с. 50-54
13. B.Ya. Yavidov, D.G'. Khajibaev, S.M. Otajonov, K.K. Nurimbetov. Mass of polaron in YBa₂Cu₄O₈ cuprate // Сборник докладов XIII Иссик-кульской Международной школа-конференции по радиационной физике, посвященная 90-летию А.А.Алыбакова – основателя физики твердого тела в Кыргызской Республике, 31-июля – 6-августа 2023 года, Иссик-Куль (Кыргызская Республика). с. 47-50.
14. D.G'. Хажібайев , B.Ya. Yavidov, A.S. Jalekeshov, A.N. Kurmantayev. Polaron massasining taranglik bo'yicha hosilalari // Материалы международной научно-практической конференции “Физика и экология” 15-16 сентября 2023 года Нукус (Узбекистан). с. 79-81.