

**АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН**  
**ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ**

---

На правах рукописи

УДК 538.913;538.915;538.958

**ЯВИДОВ БАХРАМ ЯНГИБАЕВИЧ**

**МАССА НОСИТЕЛЯ ЗАРЯДА И ОПТИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ  
ПОЛЯРОНОВ В РАСШИРЕННОЙ МОДЕЛИ ХОЛСТЕЙНА**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

**А В Т О Р Е Ф Е Р А Т**

диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

**Ташкент - 2012**

## Работа выполнена в Институте ядерной физики АН РУз

Научный консультант: доктор физико-математических наук,  
профессор **Джуманов Сафарали**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор **Лейдерман Ада Юльевна**

доктор физико-математических наук,  
профессор **Имамов Эркин  
Зуннунович**

доктор физико-математических наук,  
**Мищенко Андрей Сергеевич**

Ведущая организация: Научно-исследовательский институт  
прикладной физики Национального  
университета Узбекистана имени Мирзо  
Улугбека

Защита состоится «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2012 г. в \_\_\_ часов на заседании Объединенного специализированного совета Д.015.23.01 при Институте электроники имени У.А. Арифова и Институте ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан по адресу: г. Ташкент, пос. Улугбек, ИЯФ АН РУз.  
тел: (8-10-998-71) 2893464, факс (8-10-998-71) 1503080

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИЯФ АН РУз и Фундаментальной библиотеке АН РУз.

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2012 г.

Ученый секретарь  
Объединенного специализированного совета  
доктор физико-математических наук, профессор

Хидиров И.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность работы.** Развитие различных отраслей науки, техники и промышленности не представляется возможным без создания новых материалов с оригинальными свойствами. Созданные материалы требуют тщательного изучения их свойств и надлежащего их объяснения. Синтезированные более четверти века назад высокотемпературные сверхпроводящие материалы [1], позднее получившие название купраты, несмотря на всевозрастающее их применение, все еще остаются объектами интенсивных исследований физиков-теоретиков и экспериментаторов. Несмотря на большие усилия ученых и достигнутые успехи в понимании некоторых свойств купратов, микроскопический механизм высокотемпературной сверхпроводимости остается все еще неясным [2], в частности, свойства нормального состояния купратов, которые зависят от уровня легирования. Сложность состава, сильная анизотропия самой кристаллической решетки и, вследствие этого, сильная анизотропия всех остальных свойств купратов, многообразие фазовых состояний и присутствие примесей, дефектов и различных неоднородностей кристаллической решетки сильно усложняют изучение купратов в теоретическом и экспериментальном планах. Кроме того, купраты являются веществами, в которых электронная подсистема сильно коррелирована и взаимодействие этой подсистемы с фононной подсистемой является довольно сильным [3]. Последнее обстоятельство еще более усложняет теоретическое изучение купратов, ибо на сегодняшний день физики-теоретики не располагают каким-либо математическим аппаратом (или моделью), способным точно и аналитически решить проблему взаимодействующих подсистем. Имеющиеся теории и модели применимы в частных случаях и в ограниченной области параметров модели. Большинство моделей, предлагаемых для теоретического изучения купратов, основаны на доминирующей роли какого-то отдельного вида взаимодействия. В основном все модели можно условно разделить на три группы: модели, основанные на флуктуации плотности (вибронные взаимодействия, (би)поляроны и т.д.), модели, основанные на флуктуации заряда (химический механизм, механизм переноса заряда, экситоны и т.д.), и модели, основанные на флуктуации спина (модель Хаббарда и её разновидности: анионный механизм, модель резонирующих валентных связей, магнетонный механизм и т.д.). Многие предложенные модели не учитывают электрон-фононную составляющую полного взаимодействия. Как убедительно показывают экспериментальные данные, электрон-фононное взаимодействие в купратах сильное, оно по величине на порядок превышает другие виды взаимодействия. Более того, те же эксперименты дают основание полагать, что носителями заряда в купратах являются поляроны, куперовские пары поляронов или биполяроны. В связи с этим ощущается острая необходимость объяснения и правильного истолкования уже накопленных экспериментальных данных в свете поляронных представлений. Имеющиеся поляронные модели (модель Фрëлиха и квазимолекулярная модель Холстейна), несмотря на правильное истолкование свойств полярных веществ и молекулярных кристаллов, не в состоянии в полной мере охватить всё многообразие свойств купратов и испытывают трудности при их объяснении. Так модель Фрëлиха испытывает трудности при объяснении размера биполарона, а модель

Холстейна - при объяснении значения эффективной массы носителей заряда в купратах. То же можно сказать про оптическую проводимость носителей заряда в купратах, которая по-разному интерпретируется в моделях Фрелиха и Холстейна. Все эти трудности связаны с односторонностью рассмотрения вопроса о поляроне и биполяроне в купратах. В модели Фрелиха, которая справедлива в приближении эффективной массы, игнорируется детальная структура кристаллической решетки. Модель Холстейна ограничивается рассмотрением взаимодействия носителя заряда только с внутримолекулярными высокочастотными колебаниями (то есть локальное взаимодействие) и не учитывает остальные виды взаимодействия. Эти обстоятельства стимулируют усилия, направленные на создание новой модели или модификации уже имеющихся моделей, с тем, чтобы в рамках одной модели можно было охватить особенности уже имеющихся моделей. На роль такой модели заслуженно претендует развиваемая в последнее время (с 1999 года) расширенная модель Холстейна [4]. Расширенная модель Холстейна (РМХ) позволяет учитывать детальную структуру кристаллической решетки и взаимодействие носителя заряда со всеми структурными единицами решетки. Однако, многие свойства расширенной модели Холстейна еще не изучены и конкретное применение модели к купратам не выполнено. К таким мало изученным вопросам модели относится вопрос о массе носителя заряда и оптической проводимости решеточных поляронов, обусловленной далекодействующим электрон-фононным взаимодействием. Изучение этих вопросов очень важно как с теоретической, так и с экспериментальной точки зрения. Если первое обстоятельство позволит развить теорию поляронов, и вследствие этого теорию конденсированного состояния, и обнаружить новые закономерности модели, то второе ценно ввиду его прикладного характера для объяснения конкретных экспериментов по купратам. Предлагаемое исследование разрешит кроме чисто фундаментальной проблемы о вышесказанных вопросах ещё и прикладную проблему о применимости идей малых решеточных поляронов [4], обусловленных далекодействующими электрон-фононными взаимодействиями для описания свойств купратов. Масса малого полярона остаётся камнем преткновения для применения теории (би)поляронной сверхпроводимости в купратах. Все эти обстоятельства свидетельствуют о чрезвычайной актуальности предлагаемой темы и проблемы исследования.

**Степень изученности проблемы.** Происхождение идеи полярона восходит к 30-годам XX столетия, когда Ландау в своей работе выдвинул идею автолокализованного электрона, а сам термин "полярон" был введен в науку Пекаром. В последующие годы исследования теории поляронов развивались, в основном, на основе двух моделей: модели поляронов большого радиуса и модели поляронов малого радиуса. В настоящее время имеется обширная литература по поляронам, это как оригинальные статьи, так и обзорные статьи или монографии [5]. Исследование свойств малого полярона в рамках модели Холстейна началось с оригинальной работы самого Холстейна в 1959 году. Модель Холстейна позволила объяснить свойства многих веществ с низкой подвижностью носителя заряда  $\sim 1 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$  и концентрацией носителей  $10^{20} \text{ см}^{-3}$ . Вопрос о массе полярона и его оптической проводимости изучался в работах многих авторов как в чисто теоретическом аспекте, так и в прикладном аспекте на конкретных материалах. Открытие высоко-

температурной сверхпроводимости заставило по-новому взглянуть на проблемы поляронной физики и стимулировало дальнейшие исследования в этой области. Общеизвестно, что основной идеей И.Г.Беднорца и К.А.Мюллера в поиске материалов с высоким значением критической температуры сверхпроводящего перехода была идея о поляроне. Однако применение идей малого полярона к купратам натолкнулось на серьёзные трудности. В первую очередь это связано с массой малого полярона, которая оценивается примерно как  $(100 \div 1000)m_e$ . В то же время, по оценкам многочисленных экспериментов, масса носителя заряда в купратах  $\sim (1 \div 5)m_e$  [6,7]. В 1999 году в журнале «Phys. Rev. Lett.» была опубликована статья А.С.Александрова и П.Е.Корниловича, которая открыла новую эпоху в развитии теории малого полярона Холстейна. Авторы статей по-новому сформулировали задачу малого полярона, учитывая особенности купратов, и решили её в ограниченной области параметров модели. В последующем эта модель получила общее признание и была названа «Расширенной моделью Холстейна» [8]. Имеющиеся в литературе работы [8-23] затрагивают различные аспекты расширенной модели Холстейна в ограниченной области параметров. Поэтому сказать, что все аспекты модели изучены и исследованы, нельзя. Не изученным остается вопрос о перенормировке массы носителя заряда в особо интересных областях параметров. Не изучена также оптическая проводимость поляронов в расширенной модели Холстейна. Расширенная модель Холстейна, учитывающая детальную структуру решетки и эффект экранирования электрон-фононного взаимодействия, применена к конкретным купратам с использованием аналитической формулы, которая описывает только асимптотическое поведение силы электрон-фононного взаимодействия на расстояниях много больших, чем расстояния между носителем заряда и удаленным апексным ионом<sup>1</sup> [19,20]. Также не изученным остается вопрос об образовании поляронных пар с различными типами симметрии волновой функции в расширенной модели Холстейна-Хаббарда. Такого рода проблема исследовалась в рамках модели Хаббарда с отрицательной корреляционной энергией в работе [24]. Однако «микроскопический» вывод исходного гамильтониана и его обоснование не были даны. Кроме того, не учитывалось электрон-фононное взаимодействие, которое по данным экспериментов, является доминирующим. К не изученным вопросам модели относится также вопрос о связи параметров расширенной модели Холстейна со сверхпроводящими параметрами купратов. Указанные выше обстоятельства заставляют всесторонне изучить и проанализировать свойства малого полярона в рамках расширенной модели Холстейна, а именно: изучить закономерности расширенной модели Холстейна и её отличительные особенности; теоретически вывести аналитическую формулу для перенормированной массы носителя заряда и оптической проводимости поляронов; обосновать применимость расширенной модели Холстейна к купратам, установить взаимосвязь параметров расширенной модели Холстейна с критической температурой сверхпроводящего перехода.

---

<sup>1</sup> Апексный ион в решетке купратов – это ион кислорода находящийся вне медно-кислородной плоскости.

**Связь диссертационной работы с тематическими планами НИР.** Тема диссертационной работы связана с научными исследованиями, выполненными в рамках программы фундаментальных исследований АН РУ по темам: «Исследования аномальных транспортных, тепловых и упругих свойств легированных высокотемпературных сверхпроводников  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ » (№ ФА-Ф2-Ф070, 2007-2011 гг.), «Исследование кристаллической структуры и свойств монокристаллических образцов и тонких пленок ВТСП оксидов и органических молекулярных соединений» (№ Ф-2.1.60, 2003-2007 гг.), фонда поддержки фундаментальных исследований АН РУ по теме «Межузельные электронные (дырочные) пары в сильно коррелированной фонон-фермионной системе купратных оксидов» (№ 73-06, 2006-2007 гг.) и научной стажировки в университете Лафборо (Loughborough University, UK) по теме «Trapped and self-trapped (bi)polaronic carriers in underdoped cuprates and manganites» (NATO/Royal Society postdoctoral fellowship, № РНУ-ТЗ, 2003-2004 гг.).

**Целью диссертационной работы** является развитие модели малого полярона Холстейна с учетом дальнедействующего электрон-фононного взаимодействия для установления возможности существования полярона с малой массой и объяснения значения массы носителя заряда, инфракрасного поглощения и высоких значений критической температуры сверхпроводящего перехода в купратных высокотемпературных сверхпроводниках.

**Для достижения поставленной цели ставились следующие задачи:**

- вывести аналитические формулы для массы полярона в расширенной модели Холстейна в пределе сильного электрон-фононного взаимодействия и в адиабатическом и неадиабатическом пределах;
- исследовать влияние линейно поляризованных колебаний ионов решетки на массу полярона в расширенной модели Холстейна;
- изучить оптическую проводимость поляронов в расширенной модели Холстейна в пределе сильного электрон-фононного взаимодействия;
- изучить влияние экранирования электрон-фононного взаимодействия на массу и оптическую проводимость полярона в расширенной модели Холстейна;
- изучить спаривание двух поляронов, притяжение между которыми обусловлено апексными ионами, и определить условия образования двухузельного биполярона с волновыми функциями различной симметрии;
- получить фазовые диаграммы существования двухузельных биполяронов с различными типами симметрии волновой функции;
- исследовать влияние внешнего одноосного давления (напряжения) на температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных двухузельных биполяронов;
- теоретически объяснить значения критических температур сверхпроводящего перехода пленок лантановых купратов в рамках биполярной модели сверхпроводимости.

**Объект и предмет исследования.** Объектами исследования являются носитель заряда, сильно взаимодействующий с колебаниями апексных ионов купратов, и высокотемпературные сверхпроводящие купраты:  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ . Предметом исследования являются сильно взаимодействующие

электрон-фононные системы, установление закономерностей образования решеточных поляронов и биполяронов, обусловленных дальнедействующим электрон-фононным взаимодействием, изучение влияния экранирования электрон-фононного взаимодействия на параметры решеточных поляронов, закономерности влияния одноосного давления (напряжения) на температуру Бозе-конденсации решеточных двухузельных биполяронов.

**Методы исследования.** Метод вторичного квантования, метод унитарных преобразований Ланга-Фирсова, метод теорий возмущения, квазиклассическое приближение (метод ВКБ), принцип Франка-Кондона, неадиабатическое и адиабатическое приближения.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Расширенная модель Холстейна, учитывающая дальнедействующую природу электрон-фононного взаимодействия носителей заряда, принадлежащую медно-кислородным слоям, с апексными ионами решетки купратов, которая в пределе сильного электрон-фононного взаимодействия и адиабатического приближения дала значение массы полярона очень близкое к экспериментальному.

2. Аналитические формулы на основе потенциала Юкавы для сил экранированного электрон-фононного взаимодействия носителя заряда с различно поляризованными колебаниями апексных ионов решетки купратов, которые дают меньшие значения массы полярона, чем в других моделях.

3. Положение о том, что влияние дальнедействующего электрон-фононного взаимодействия на оптическую проводимость решеточных поляронов сводится к сдвигу пика кривой оптической проводимости в сторону меньших значений энергии фотона и к более асимметричной форме кривой поглощения.

4. Применимость теории оптической проводимости поляронов в расширенной модели Холстейна для объяснения экспериментальных данных по инфракрасному поглощению купратов.

5. Расширенная модель Холстейна-Хаббарда, учитывающая кулоновское взаимодействие двух поляронов в медно-кислородном слое и их взаимодействие с апексными ионами решетки купратов, и позволяющая получить критерии образования и фазовые диаграммы состояний двухузельных решеточных биполяронов с симметрией волновой функции s-, p- и d- типов.

6. Модель, описывающая влияние одноосного давления (напряжения) на температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных двухузельных биполяронов, которая объясняет экспериментальные значения критической температуры сверхпроводящего перехода пленок лантановых купратов в зависимости от степени напряжения на интерфейсе пленка-подложка.

**Научная новизна** результатов диссертации связана с развитием теории сильно взаимодействующих систем электронов и фононов, в частности, теории решеточных поляронов Холстейна с дальнедействующим электрон-фононным взаимодействием. Кроме того, в работе развита теория спаривания двух поляронов и предложена новая теория влияния внешнего давления (напряжения) на температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных биполяронов. В результате выполненных теоретических исследований получены следующие новые результаты:

1. Впервые в модели малого полярона Холстейна рассмотрено влияние дальнедействующего электрон-фононного взаимодействия на параметры полярона, что позволило показать возможность образования малого полярона с малой массой, значения, которых близки к экспериментальным значениям в пределе сильного электрон-фононного взаимодействия и адиабатическом приближении.

2. Получена аналитическая формула для оптической проводимости поляронов малого радиуса в условиях дальнедействующего электрон-фононного взаимодействия, которая удовлетворительно объясняет данные по инфракрасному поглощению купратов.

3. Впервые выведены аналитические формулы для сил экранированного электрон-фононного взаимодействия между носителем заряда и апексными ионами решетки купратов, для различных значений радиуса экранировки, которые позволили объяснить экспериментальные данные по инфракрасному поглощению купратов в интервале энергии  $0.1 \div 0.5$  эВ от степени легирования.

4. Определены критерии образования двухузельных биполяронов с волновыми функциями s-, p- и d- симметрии и установлены их фазовые диаграммы состояний в рамках расширенной модели Холстейна-Хаббарда, учитывающие кулоновское взаимодействие между двумя носителями заряда в медно-кислородном слое и взаимодействие носителей заряда с апексными ионами решетки купратов.

5. Предложена новая модель, объясняющая влияние внешнего давления (напряжения) на температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных двухузельных биполяронов, которая связывает температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных двухузельных биполяронов с деформацией решетки посредством массы (би)полярона.

6. Впервые объяснены значения критической температуры сверхпроводящего перехода пленок лантановых купратов на основе предложенной модели влияния внешнего давления (напряжения) на температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных двухузельных биполяронов.

**Научная и практическая значимость результатов исследования** заключается в возможности их использования для развития теории конденсированного состояния, теории взаимодействующих электрон-фононных систем, в частности, теории решеточных поляронов Холстейна. Кроме того, с практической точки зрения развитые методы позволяют вычислить массу носителя заряда в купратах, вычислить оптическую проводимость поляронов, оценить условия существования двухузельных биполяронов и критическую температуру сверхпроводящего перехода, опираясь на биполярную модель сверхпроводимости.

**Реализация результатов.** Результаты, изложенные в диссертации, могут быть использованы в физике купратных высокотемпературных сверхпроводников для теоретической интерпретации результатов экспериментальных данных по определению эффективной массы носителей заряда, оптическому (инфракрасному) поглощению, симметрии параметра порядка сверхпроводимости, влиянию внешнего давления (напряжения) на критическую температуру сверхпроводящего перехода купратов, а также в материаловедении купратных высокотемпературных сверхпроводников.



**Достоверность и обоснованность полученных результатов** определяется использованием общеизвестных методов исследования теоретической физики и квантовой теории твердого тела, а также согласием предлагаемых моделей и полученных результатов с имеющимися экспериментальными фактами и выводами ранних работ.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях: Республиканская конференция «Фундаментальные и прикладные проблемы современной физики» (Ташкент, 2007), IV Республиканская научная конференция «Рост, свойства и применение кристаллов» (Андижан, 2008), Республиканская конференция «Оптические методы в современной физике» (Ташкент, 2008), II Республиканская конференция молодых физиков Узбекистана (Ташкент, 2008), II научная конференция «Актуальные проблемы современной физики и астрономии» (Карши, 2010), Международная конференция «Фундаментальные и прикладные вопросы физики», посвящённая 80-летию академика М.С.Саидова (Ташкент, 2010), VI Международная научно-техническая конференция «Актуальные вопросы теоретической и прикладной биофизики, физики и химии» БФФХ-2010 (Севастополь, 2010) и XI Международная конференция «Физика твердого тела» ФТТ-XI (Усть-Каменогорск, 2010).

**Опубликованность результатов.** Общее количество опубликованных научных работ по материалам диссертации составляет 27, из них 10 статей в зарубежных реферируемых журналах, 7 статей в республиканской печати, 10 тезисов докладов в сборниках республиканских и международных конференций.

**Личный вклад диссертанта.** Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в выполненную работу. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, 5 глав (содержащих выводы), заключения, библиографии и 5 приложений. Содержание работы изложено на 246 страницах текста и представлено на 49 рисунках и в 8 таблицах. Список цитируемой литературы содержит 261 наименование.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

**Во введении** подчеркивается важность выдвигаемой проблемы исследования и обосновывается её актуальность, определяются объекты, предметы и методы исследования, сформулированы цель и задачи исследований, научные положения, которые выносятся на защиту, приводятся новизна и практическая значимость полученных в диссертации результатов.

**В первой главе** приводится обзор различных поляронных моделей: оптический полярон Пекара, полярон Фрëлиха, полярон промежуточной связи Ли-Лоу-Пайнса и решеточный полярон Холстейна. Излагаются аналитические вычисления массы полярона в различных моделях и анализируется применимость этих моделей к купратам, указываются их преимущества и недостатки. Делается лите-

ратурный обзор работ по расширенной модели Холстейна с момента её появления (1999 г.) по настоящее время. Так подчеркивается, что в литературе отсутствуют исследования поляронов расширенной модели Холстейна в особо интересной области параметров, а именно в адиабатическом приближении. В этой области параметров не изучены масса и оптическая проводимость поляронов расширенной модели Холстейна. Кроме того, отмечено, что исследования свойств поляронов расширенной модели Холстейна с экранированным электрон-фононным взаимодействием выполнены некорректно и их выводы неточны при рассмотрении малых расстояний. В литературе также мало работ по изучению возможности образования биполяронов обусловленного колебаниями апексных ионов решетки купратов. Практически отсутствуют работы, связывающие параметры расширенной модели Холстейна со структурными параметрами (периодом решетки) и сверхпроводящими параметрами купратов.

Вышеуказанные и другие обстоятельства позволили сформулировать и определить цели и задачи настоящего исследования.

**Во второй главе** работы излагаются теоретические основы расширенной модели Холстейна. Гамильтониан взаимодействующей системы электронов и фононов в рамках расширенной модели Холстейна пишется в виде:

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

где первый член есть гамильтониан электронной подсистемы, второй член - гамильтониан фононной подсистемы и, наконец, третий член описывает взаимодействие электронов с фононным полем. Они определяются следующими формулами:

$$H_e = - \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} t_{\vec{n}, \vec{n}'} c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{n}'}, \quad (2)$$

$$H_{ph} = \sum_{\vec{m}, \alpha} \left( \frac{\hbar \omega^2}{2M\alpha \xi_{\vec{m}, \alpha}^2} + \frac{M\omega^2 \xi_{\vec{m}, \alpha}^2}{2} \right), \quad (3)$$

$$H_{e-ph} = - \sum_{\vec{n}, \vec{m}, \alpha} f_{\vec{m}, \alpha}(\vec{n}) c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{n}} \xi_{\vec{m}, \alpha}. \quad (4)$$

В формулах (2 - 4)  $t_{\vec{n}, \vec{n}'}$  - интеграл перескока носителя заряда с узла решетки  $\vec{n}$  в узел решетки  $\vec{n}'$ ,  $\omega$  - частота фононов,  $M$  - масса ионов решетки,  $c_{\vec{n}}^{\dagger}$  ( $c_{\vec{n}}$ ) - операторы рождения (уничтожения) фермионов на узле решетки  $\vec{n}$ ,  $\xi_{\vec{m}, \alpha}$  -  $\alpha$ - поляризованные нормальные координаты колебаний узла решетки  $\vec{m}$ . Величина  $f_{\vec{m}, \alpha}(\vec{n})$  в (4) характеризует взаимодействие носителя заряда, находящегося на узле решетки  $\vec{n}$  с  $\alpha$ - поляризованным колебанием узла решетки  $\vec{m}$ . Свойства системы (1) и решение уравнения Шредингера

$$(5)$$

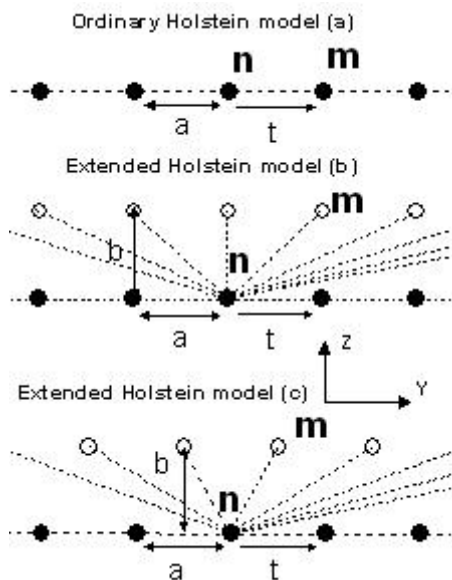
сильно зависят от константы электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ), которая определяется как  $\lambda = E_p/zt$  ( $z$  - координационное число узла решетки,  $t$  - интеграл пе-

рескока на ближайший узел решетки,  $E_p = (1/2M\omega^2)\sum_{\vec{m},\alpha} f_{\vec{m},\alpha}^2(\vec{n})$  - энергия полярона). При  $\lambda \geq 1$  и неадиабатическом пределе зона носителя заряда опускается на величину  $E_p$ , а ее ширина сильно сужается. Вследствие этого перенормированный интеграл перескока станет равным  $\tilde{t} = t \exp[-g^2]$ , где

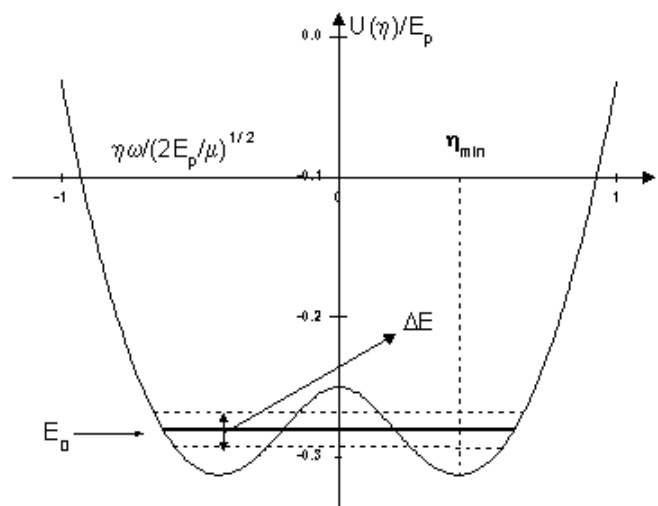
$$g^2 = \frac{1}{2M\hbar\omega^3} \sum_{\vec{m},\alpha} (f_{\vec{m},\alpha}^2(\vec{n}) - f_{\vec{m},\alpha}(\vec{n}) \cdot f_{\vec{m},\alpha}(\vec{n} + \vec{a})). \quad (6)$$

Образовавшийся полярон будет двигаться в узкой зоне с некой эффективной массой ( $m^*$  - зонная масса носителя заряда)

$$m_p = m^* e^{g^2} \text{ или } m_p = m^* \exp[\gamma(E_p / \hbar\omega)] = m^* \exp[2\lambda\gamma(t / \hbar\omega)]. \quad (7)$$



**Рис.1.** Решетка для обычной модели Холстейна (а), две решетки для расширенной модели Холстейна (b,c)



**Рис. 2.** Двухямный потенциал

В формуле (7) величина  $\gamma$  - числовой коэффициент, зависящий от типа электрон-фононного взаимодействия и детальной структуры решетки:

$$\gamma = 1 - \frac{\sum_{\vec{m},\alpha} f_{\vec{m},\alpha}(\vec{n}) \cdot f_{\vec{m},\alpha}(\vec{n} + \vec{a})}{\sum_{\vec{m},\alpha} f_{\vec{m},\alpha}^2(\vec{n})} \quad (8)$$

В обычной модели Холстейна с локальным электрон-фононным взаимодействием  $\gamma=1$ . Поэтому масса полярона Холстейна получается чрезмерно большой, чтобы можно было применить идеи поляронов Холстейна к купратам. Модель Холстейна является частным случаем (1) и получается при  $f_{\vec{m},\alpha}(\vec{n}) = k_\alpha \delta_{\vec{m},\vec{n}}$ . В расширенной

модели Холстейна ЭФВ имеет дальнедействующую природу, а именно: сила ЭФВ берется в виде

$$f_{\bar{m},z}(\bar{n}) = \frac{bk_z}{(|\bar{n} - \bar{m}|^2 + b^2)^{3/2}} \text{ и } f_{\bar{m},y}(\bar{n}) = \frac{|\bar{n} - \bar{m}| k_y}{(|\bar{n} - \bar{m}|^2 + b^2)^{3/2}}. \quad (9)$$

В отличие от обычной модели Холстейна (МХ) в РМХ носитель взаимодействует со всеми ионами верхней цепочки (рис.1(b,c)). Такие решетки были введены в рассмотрение в работах [4,12], чтобы имитировать ситуацию в купратах, где носители заряда, принадлежащие  $\text{CuO}_2$  плоскости, сильно взаимодействуют с  $c$ -поляризованными колебаниями *апексных* ионов [25]. В РМХ  $\gamma < 1$ , что обеспечит малую массу полярона по сравнению с массой полярона, вычисленной с локальным ЭФВ. При  $\lambda \geq 1$  и в адиабатическом приближении уравнение Шредингера (5) сводится к уравнению

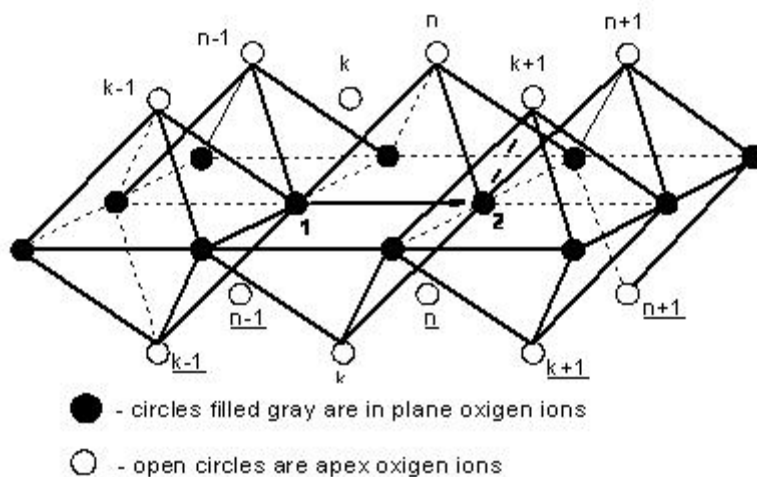
$$(E - 2\hbar\omega + \frac{3}{4}E_p + \frac{\hbar^2\partial^2}{2\mu\partial\eta_1^2} - U(\eta_1))\Phi(\eta_1) = 0, \quad (10)$$

где  $\Phi(\eta_1)$ - волновая функция, описывающая колебания атомов,  $\eta_1 = \xi_1 - \xi_{-1}$ ,  $\mu = M/2$ ,  $U(\eta_1)$ - двухямный потенциал (рис.2). Если бы потенциальный барьер, разделяющий две ямы, не был прозрачен, электрон находясь в одной из ям имел бы энергию  $E_0$ . Однако, из-за прозрачности барьера энергетический уровень электрона расщепляется и величина этого расщепления дается формулой  $\Delta E = \Delta \exp[-g_F^2]$ , где

$$\Delta = \frac{\hbar\omega}{\kappa} \sqrt{\frac{E_p}{2\hbar\omega} \kappa^{3/2} \left( 1 - \sqrt{1 - \left(\frac{E_p}{2\hbar\omega} \kappa^{3/2}\right)^{-1}} \right)}, \quad (11)$$

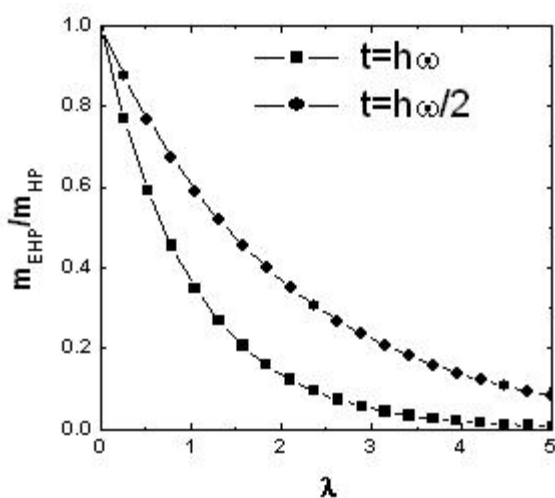
$$g_F^2 = \frac{E_p}{2\hbar\omega} \kappa^{3/2} \sqrt{1 - \left(\frac{E_p}{2\hbar\omega} \kappa^{3/2}\right)^{-1}}, \quad (12)$$

$\omega = \omega\sqrt{\kappa}$  и  $\kappa = 1 - \lambda^{-2}$ . Чтобы получить расщепление энергии для модели Холстейна, мы должны заменить в уравнениях (11) и (12)  $E_p$  на  $2E_p$ . Вычисления массы полярона расширенной модели Холстейна в различных модельных решетках (рис.1), в частности, в купратах (рис.3), показывают, что она сильно зависит от природы электрон-фононного взаимодействия и структуры решетки посредством параметра  $\gamma$ . Значение параметра  $\gamma$  может меняться в широких пределах в зависимости от периодов решетки  $a$  и расстояния между цепочками  $b$ . Кроме того, значение  $\gamma$  зависит от типа поляризации колебаний апексных ионов, которые обуславливают поляронный эффект. Обычно в РМХ  $0 < \gamma < 1$ . Вследствие этого, в пределе сильного ЭФВ масса полярона РМХ на много меньше, чем масса полярона МХ в неадиабатическом и адиабатическом приближениях (например, рис. 4 и рис. 5). Найдено, что на массу полярона РМХ существенное влияние оказывает расположение ионов ближайшего окружения полярона.



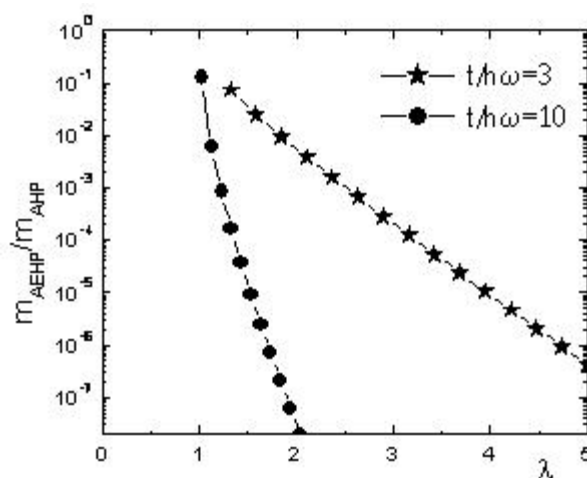
**Рис.3** Фрагмент кристаллической решетки купратов

**Третья глава** посвящена изучению оптического поглощения поляронов РМХ в пределе сильного ЭФВ. Различие МХ и РМХ состоит в природе ЭФВ. В МХ носитель заряда взаимодействует с локальными внутримолекулярными колебаниями узла решетки, а в РМХ носитель заряда взаимодействует со многими ионами решетки посредством дальнодействующих сил. В результате оптические проводимости поляронов МХ и РМХ различаются количественно и качественно.



неадиабатический предел,  $\gamma=0.5$

**Рис.4.** Отношение массы полярона РМХ к массе полярона МХ



адиабатический предел,  $\gamma=0.5$

**Рис.5** Отношение массы полярона РМХ к массе полярона МХ

Окончательная формула для оптической проводимости поляронов РМХ имеет вид

$$\sigma(\nu) = \sigma(0) \frac{\sinh(\hbar\nu/2k_B T)}{(\hbar\nu/2k_B T)} \exp\left[-\frac{1}{4}\nu^2(\delta t)^2\right], \quad (13)$$

где

$$\delta\tau = \left[ \frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} |\gamma(\vec{q})|^2 [1 - \cos(\vec{q} \cdot \vec{d})] \frac{\omega_{\vec{q}}^2}{\sinh(\hbar\nu/2k_B T)} \right]^{-1}, \quad (14)$$

а

$$\sigma(0) = ne^2 a^2 \frac{\sqrt{\pi t^2(a)}}{2k_B T \sqrt{E_a k_B T}} e^{-E_a/k_B T} \quad (15)$$

есть статическая проводимость;  
энергия активации же дается формулой

$$E_a = \frac{k_B T}{N} \sum_{\vec{q}} |\gamma(\vec{q})|^2 [1 - \cos(\vec{q} \cdot \vec{d})] \tanh \frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{4k_B T} \quad (16)$$

В РМХ безразмерный коэффициент ЭФВ  $\gamma(\vec{q})$  определяется согласно формуле

$$\gamma(\vec{q}) = - \frac{1}{\sqrt{M \omega_{\vec{q}}^3}} \sum_{\vec{m}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{m}} \vec{e}_{\vec{q}} \cdot \nabla_{\vec{m}} U_{\vec{m}}(\vec{0}), \quad (17)$$

где  $U_{\vec{m}}(\vec{0}) = k(|\vec{m} - \vec{0}|^2 + b^2)^{-1/2}$  - потенциал электрон-ионного взаимодействия кулоновской природы. При достаточно высоких температурах  $T \gg \hbar\omega/2k_B$  формула (13) примет вид

$$\sigma(\nu) = ne^2 a^2 \frac{\sqrt{\pi t^2(a)} (1 - e^{-\hbar\nu/k_B T})}{2\hbar\nu \sqrt{E_a k_B T}} \exp \left[ - \frac{(\hbar\nu - 4E_a)^2}{16E_a k_B T} \right], \quad (18)$$

а при температуре абсолютного нуля (13) приводится к виду

$$\sigma(\nu) = \frac{\sigma_0 t^2(a)}{\hbar\nu \sqrt{2E_a \hbar\omega}} \exp \left[ - \frac{(\hbar\nu - 4E_a)^2}{(2\sqrt{E_a \hbar\omega})^2} \right], \quad (19)$$

где  $\sigma_0$  - некоторая постоянная. При  $T \gg \hbar\omega/2k_B$  кривая оптической проводимости поляронов РМХ имеет максимум при энергии фотонов  $\hbar\nu = 4E_a$  с полушириной  $4\sqrt{E_a k_B T}$ , а при низких температурах  $T \ll \hbar\omega/2k_B$  конфигурация ионов решетки определяется энергиями нулевых колебаний  $\hbar\omega/2$ . Поэтому полуширина кривой оптической проводимости поляронов РМХ будет равна  $4\sqrt{E_a \hbar\omega/2}$ . Кривые оптической проводимости поляронов МХ и РМХ приведены на рис. 6. Как видно из рисунка максимум кривой оптической проводимости в РМХ сдвинут в сторону меньших значений энергии фотонов и более асимметричен, чем кривая оптической проводимости МХ. Такое различие, главным образом, обусловлено дальнедействующим характером ЭФВ. На рис.7 схематически показан переход электрона на соседний узел решетки, при поглощениях фотонов поляроном двух моделей: МХ и РМХ. В МХ поглощение фотона сопровождается переходом электрона с деформированного узла с энергией  $2E_p$  на недеформированный узел. Энергия активации такого процесса равна  $E_a = E_p/2$ .

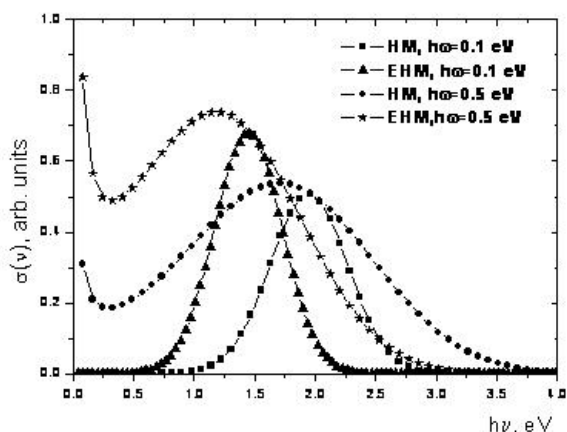


Рис. 6. Оптические проводимости поляронов MX и PMX при  $E_p = 1$  эВ

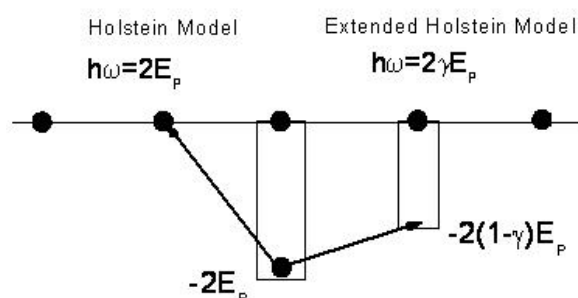


Рис. 7. Оптические переходы электрона при поглощении поляроном фотона в MX (слева) и PMX (справа)

В PMX электрон переходит на уже деформированный узел с энергией  $-2(1-\gamma)E_p$ . Энергия активации при этом равна  $E_a = \gamma E_p / 2$ . В рамках PMX можно объяснить экспериментальные данные по инфракрасному поглощению купратов. В частности, известный широкий максимум в интервале энергии (0.1÷0.5) эВ в спектре инфракрасного поглощения [26] (рис. 8 и 9).

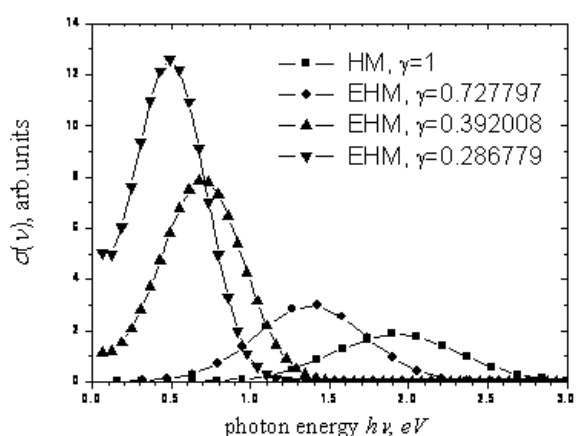


Рис. 8. Оптические проводимости поляронов MX и PMX при  $E_p = 1$  эВ и  $\hbar\omega = 75$  МэВ

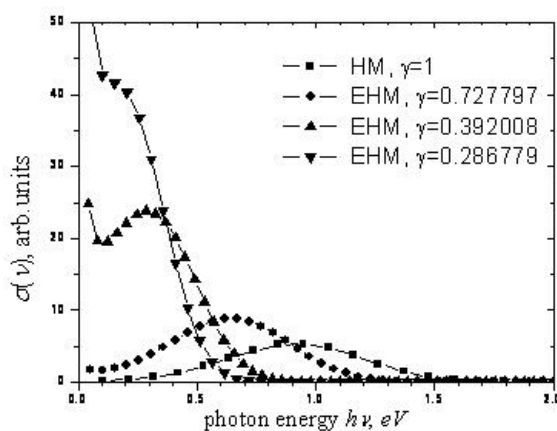


Рис. 9. Оптические проводимости поляронов MX и PMX при  $E_p = 0.5$  эВ и  $\hbar\omega = 75$  МэВ

**Четвертая глава** посвящена изучению влияния экранировки ЭФВ на параметры полярона PMX, в частности, на массу и оптическую проводимость. При этом подчеркнута, что изучение влияния экранирования ЭФВ на параметры полярона PMX в работах [10,19,20,23] выполнены с использованием приближенного выражения экранированной силы ЭФВ. Чтобы описать различные режимы легирования купратов, предлагается использовать наиболее общую форму потенциала ЭФВ, а именно: предлагается использовать потенциал Юкавы, который для дискретной решетки пишется в виде

$$U_{\vec{m}}(\vec{n}) = \frac{k}{\sqrt{|\vec{n} - \vec{m}|^2 + b^2}} \exp\left[-\frac{\sqrt{|\vec{n} - \vec{m}|^2 + b^2}}{R}\right], \quad (20)$$

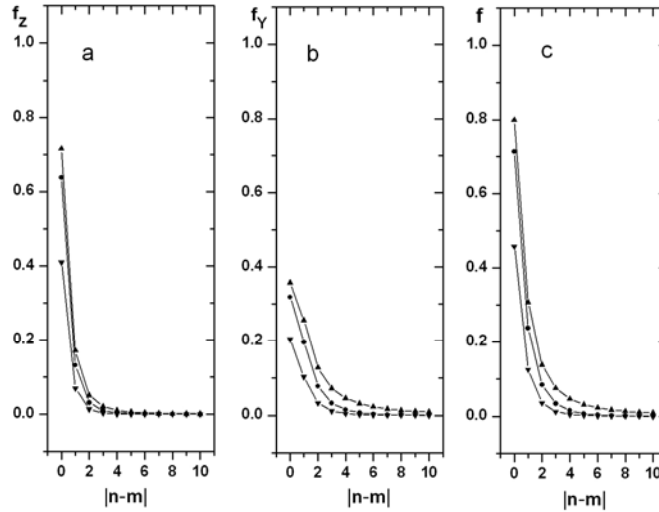
где  $R$  - радиус экранировки. Из (20) получим

$$f_{\vec{m},z}(\vec{n}) = \frac{k}{(|\vec{n} - \vec{m}|^2 + b^2)^{3/2}} \left(1 + \frac{\sqrt{|\vec{n} - \vec{m}|^2 + b^2}}{R}\right) \exp\left[-\frac{\sqrt{|\vec{n} - \vec{m}|^2 + b^2}}{R}\right] \quad (21)$$

и

$$f_{\vec{m},y}(\vec{n}) = \frac{k|\vec{n} - \vec{m}|}{(|\vec{n} - \vec{m}|^2 + b^2)^{3/2}} \left(1 + \frac{\sqrt{|\vec{n} - \vec{m}|^2 + b^2}}{R}\right) \exp\left[-\frac{\sqrt{|\vec{n} - \vec{m}|^2 + b^2}}{R}\right] \quad (22)$$

Экранированная сила ЭФВ авторов работ [10,19,20,23] является частным случаем силы, определенной согласно формуле (21). Действительно, при выполнении условия  $R \gg \sqrt{|\vec{n} - \vec{m}|^2 + b^2}$  в среднем множителе (21) можно пренебречь вторым слагаемым, тогда мы получим силу экранированного ЭФВ авторов [10,19,20,23]. В то же время, если при  $R=\infty$  мы получим неэкранированную силу ЭФВ (9). Сравнение сил ЭФВ приведено на рис.10.



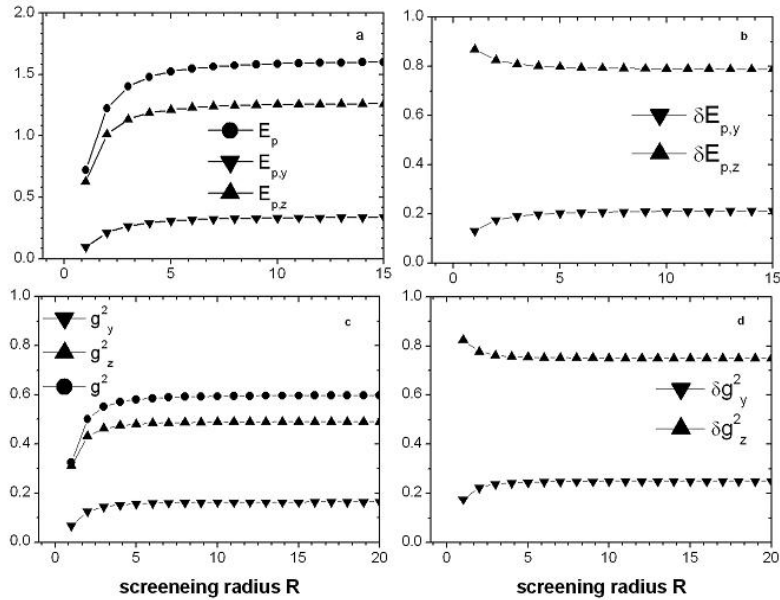
Верхняя (нижняя) кривая соответствует неэкранированной (экранированной) силе ЭФВ, рассмотренной в работах [4,10,19,20,23]. Средняя кривая характеризует экранированные силы, рассмотренные в настоящей работе. Значения сил даны в единицах  $k$  и экранированные силы вычислены при  $R=2$ .

**Рис. 10. Значения силы ЭФВ как функция  $|\vec{n} - \vec{m}|$  для решетки рис.1(с)**

Как видно из рис.10 при  $|\vec{n} - \vec{m}| \gg a$  экранированные и неэкранированные силы мало различаются. Однако, при рассмотрении расстояний, сравнимых с постоянной решетки, эти силы сильно расходятся по значению. Зависимость силы ЭФВ от



радиуса экранировки имеет серьезные последствия. Из-за этой зависимости все параметры полярона РМХ, такие как, например,  $E_p$ ,  $g^2$ ,  $\gamma$ ,  $m_p$  и их составляющие также зависят от  $R$ . Зависимости  $E_p$ ,  $g^2$ ,  $\gamma$  от  $R$  показаны на рис. 11 и 12, а зависимость массы полярона РМХ от  $\lambda$  при различных значениях  $R$  дана на рис.13.



**Рис. 11.** Энергия полярона  $E_p$  (в единицах  $k^2/2M\omega^2$ ) и составляющие, обусловленные  $z$ - ( $y$ -) поляризованными колебаниями ионов  $E_{p,z}$  ( $E_{p,y}$ ) (a); удельные составляющие энергии полярона  $\delta E_{p,z}$  и  $\delta E_{p,y}$  (b); показатель перенормировки массы носителя заряда  $g^2$  (в единицах  $k^2/2M\hbar\omega^3$ ) и составляющие, обусловленные  $z$ - ( $y$ -) поляризованными колебаниями ионов  $g_z^2$  ( $g_y^2$ ) (c); удельные составляющие показателя перенормировки массы носителя заряда  $\delta g_z^2$  и  $\delta g_y^2$  (d).

Общая закономерность такова, что локализация ЭФВ обуславливает появление поляронов с тяжелой массой. Использование потенциала Юкавы для экранированного ЭФВ обеспечивает малую массу полярона РМХ по сравнению с массой полярона, полученного в работах [10,19,20,23] при одних и тех же режимах экранирования. Оптическая проводимость поляронов РМХ также зависит от радиуса экранировки силы ЭФВ и структуры решетки посредством параметра  $\gamma$ . Оценка значения этого параметра для купратов дает значения  $\sim 0.2 \div 0.3$ . С помощью этих значений  $\gamma$  мы в состоянии воспроизвести аномальное инфракрасное поглощение купратов с максимумами кривых поглощения от энергии фотонов 0.1 эВ вплоть до 0.5 эВ. При этом мы учитываем взаимодействие носителей заряда, принадлежащее медно-кислородной ( $\text{CuO}_2$ ) плоскости купратов с колебаниями ионов, принадлежащих «резервуару зарядов» решетки купратов.

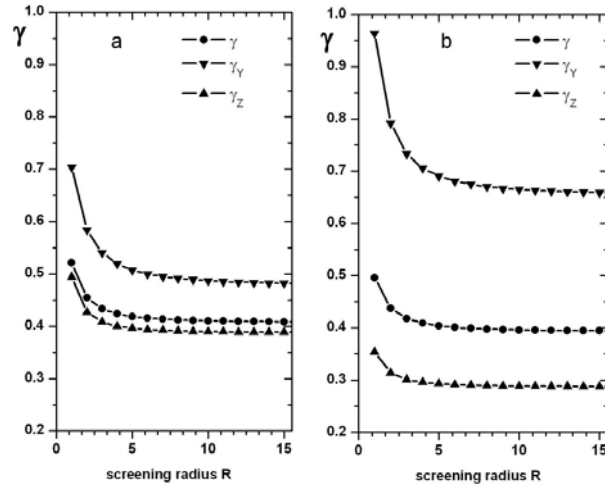


Рис. 12. Значения множителя  $\gamma_z$ ,  $\gamma_y$  и  $\gamma$  как функции для решеток (а) рис.1(b) и (b) рис. 1(c).

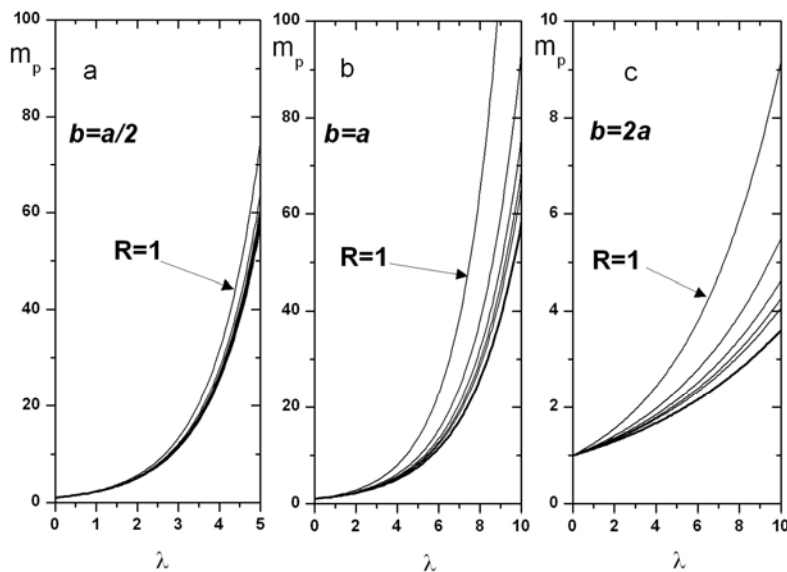
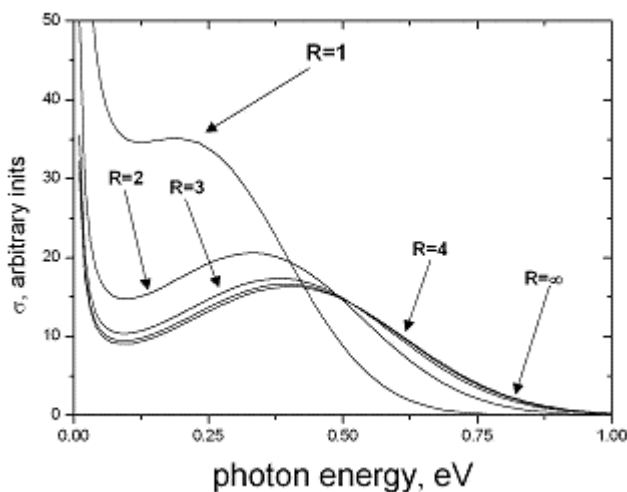


Рис. 13. Масса полярона РМХ как функция  $\lambda$  для решетки рис. 1(c) при различных значениях радиуса экранирования  $R=1,2,3,4,5$  и  $\infty$

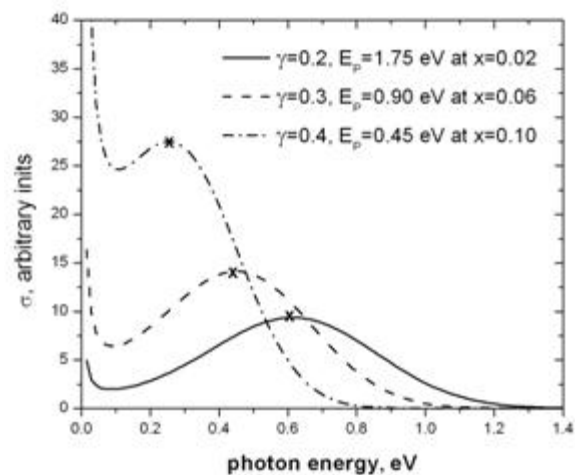
И в самом деле, эксперименты показывают сильное взаимодействие носителей заряда со многими модами фононов, энергии которых равны 27 МэВ, 45 МэВ, 61 МэВ и 75 МэВ [25,27]. Более того, интенсивность взаимодействия носителей заряда с фононной модой, энергия которой равна 75 МэВ, возрастает по мере легирования купратов [28]. Энергия полярона, оцененная с использованием только дальнедальнодействующей Фрелиховской составляющей ЭФВ, равняется  $\approx 0,65$  эВ [29]. Тогда находим энергию  $E_m = 2\gamma E_p$ , соответствующую максимуму кривой оптической проводимости поляронов РМХ 0.27 эВ и 0.39 эВ для значений  $\gamma=0.2$  и

$\gamma=0.3$ , соответственно. В частности, найденное значение 0.39 эВ находится в удовлетворительном согласии с данными по оптической проводимости соединения  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$  с  $E_m=0.35$  эВ [30]. На рис.14 приведены кривые оптической проводимости поляронов РМХ для различных значений радиуса экранировки. Как видно из рис.14 оптическая проводимость поляронов РМХ не так уж чувствительна к изменению радиуса экранировки (то есть экранированию ЭФВ), когда радиус экранировки  $R$  намного больше, чем постоянная решетки  $|\bar{a}|$ . Однако, при  $R \approx a$  кривые сильно чувствительны к малым вариациям радиуса экранировки  $R$ . Как и следовало ожидать, наши вычисления показывают, что экранировка электрон-фононного взаимодействия уменьшает значение энергии полярона (см. рис.11). Это вызовет, в свою очередь, уменьшение значения  $E_m$ . Однако, это уменьшение происходит по-разному в обычной и расширенной модели Холстейна. В обычной модели Холстейна с локальным электрон-фононным взаимодействием  $\gamma$  не зависит от структуры решетки и считается постоянной, равной единице, поэтому уменьшение  $E_m$  связано только с уменьшением  $E_p$ . В РМХ ЭФВ дальнедействующее, и поэтому  $\gamma < 1$  зависит от структуры решетки и радиуса экранировки  $R$ .



$E_p=0.65$  эВ при  $R=\infty$  и  $\hbar\omega=75$  мэВ

**Рис.14.** Зависимость оптической проводимости поляронов РМХ от энергии фотона  $\hbar\nu$  при различных значениях  $R$



Экспериментальные точки оптической проводимости соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  помечены знаком «x»

**Рис.15** Оптическая проводимость поляронов РМХ при различных значениях  $E_p$  и  $\gamma$

Экранирование ЭФВ ведет к увеличению значения параметра  $\gamma$  (рис.12) и уменьшению значения  $E_p$  (см. рис.11). Тем не менее общий эффект экранирования ЭФВ на произведение  $\gamma E_p$  таково, что оно уменьшается при уменьшении  $R$ . В результате этого значение энергии  $E_m$  сдвигается в сторону меньших значений при легировании купратов. Объяснение зависимости оптической проводимости купратов от уровня легирования в рамках РМХ сделано в работе [31]. Однако, это сделано без учета возможности изменения  $\gamma$  от того же уровня легирования. Более детальный анализ и объяснение экспериментальных данных по оптической проводимости

купратов (или их инфракрасному поглощению) могут быть достигнуты только при одновременном учете зависимости  $E_p$  и  $\gamma$  от уровня легирования (или радиуса экранирования  $R$ ). Результаты наших исследований для оптической проводимости поляронов РМХ хорошо согласуются с теоретическими результатами более ранних исследований и с результатами эксперимента [26]. В работе [26] показано уменьшение  $E_m$  при легировании соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . Так, согласно этой работе энергия  $E_m$ , соответствующая максимуму кривой оптической проводимости, равняется 0.6 эВ, 0.44 эВ и 0.24 эВ для уровней легирования ( $x$ ) 0.02, 0.06 и 0.10, соответственно. Такое поведение  $E_m$  с легированием объяснимо в рамках РМХ совместным влиянием параметров  $\gamma$  и  $E_p$  на  $E_m$ . Кривые оптической проводимости поляронов РМХ, вычисленные с учетом вышесказанных факторов представлены на рис.15. На том же рисунке экспериментальные точки работы [26] помечены символом «х» при различных уровнях легирования.

**Пятая глава** состоит из двух параграфов. В первом параграфе излагается теория образования двухузельных решеточных биполяронов и определяются пороговые энергии образования биполяронов с s-, p- и d- типами симметрии волновой функции. При этом предполагается, что носители, принадлежащие медно-кислородной плоскости, сильно взаимодействуют с апексными ионами решетки купратов. Во втором параграфе предложена новая теория влияния внешнего одноосного давления (напряжения) на температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных биполяронов и дано теоретическое объяснение критических температур сверхпроводящего перехода тонких пленок купратов на основе биполярной модели сверхпроводимости.

Купраты имеющие сильно коррелированную фермионную подсистему и сильно взаимодействующие электрон-фононные подсистемы могут быть рассмотрены в рамках расширенной модели Холстейна-Хаббарда. Полный гамильтониан системы напишем в виде

$$H = H_e + H_{ph} + H_V + H_{e-ph} , \quad (23)$$

где  $H_e = \sum_{\vec{n} \neq \vec{n}'} T(\vec{n} - \vec{n}') c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{n}'}$  - описывает перескоки электронов между соседними узлами решетки,  $H_{ph} = \hbar\omega \sum_{\vec{m}, \alpha} (d_{\vec{m}}^{\dagger} d_{\vec{m}} + 1/2)$  - гамильтониан фононной подсистемы,  $H_e = \sum_{\vec{n} \neq \vec{n}'} V_C(\vec{n} - \vec{n}') c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{n}'} c_{\vec{n}'}^{\dagger} c_{\vec{n}}$  - гамильтониан кулоновского взаимодействия между двумя носителями заряда, находящимися на узлах решетки  $\vec{n}$  и  $\vec{n}'$ ,

$$H_{e-ph} = \hbar\omega \sum_{\vec{n} \neq \vec{m}, \alpha} f_{\alpha}(\vec{n} - \vec{m}) (\vec{e}_{\vec{m}, \alpha} \cdot \vec{u}_{\vec{m} - \vec{n}}) c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{n}} (d_{\vec{m}}^{\dagger} + d_{\vec{m}}) \quad (24)$$

гамильтониан электрон-фононного взаимодействия. Здесь  $T(\vec{n} - \vec{n}')$  - интеграл перескока носителя заряда из узла  $\vec{n}$  в узел  $\vec{n}'$ ,  $V_C(\vec{n} - \vec{n}')$  - кулоновская энергия взаимодействия двух электронов, находящихся на узлах  $\vec{n}$  и  $\vec{n}'$ ,  $f_{\alpha}(\vec{n} - \vec{m})$  - безразмерная сила взаимодействия электронов и фононов,  $\vec{e}_{\vec{m}, \alpha}$  - вектор поляризации колебаний атома узла  $\vec{m}$ ,  $\alpha=x, y, z$  и  $\vec{u}_{\vec{m} - \vec{n}}$  - единичный вектор, направленный из

узла  $\vec{n}$  в узел  $\vec{m}$ . Когда электрон-фононное взаимодействие сильное мы можем использовать преобразование Ланга-Фирсова, которое исключает гамильтониан электрон-фононного взаимодействия (24). Так, выполняя преобразование Ланга-Фирсова  $\hat{H} = \exp(-S)H \exp(S)$  с генератором преобразования

$$S = \sum_{\vec{n} \neq \vec{m}, \alpha} f_{\alpha}(\vec{n} - \vec{m}) (\vec{e}_{\vec{m}, \alpha} \cdot \vec{u}_{\vec{m} - \vec{n}}) c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{n}} (d_{\vec{m}}^{\dagger} - d_{\vec{m}}) \quad (25)$$

получим следующий гамильтониан

$$\hat{H} = \sum_{\vec{n} \neq \vec{n}'} \sigma(\vec{n} - \vec{n}') c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{n}'} - E_p \sum_{\vec{n}} c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{n}} + H_{ph} + \sum_{\vec{n} \neq \vec{n}'} V(\vec{n} - \vec{n}') c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{n}} c_{\vec{n}'}^{\dagger} c_{\vec{n}'},$$

где  $E_p = \hbar \omega \sum_{\vec{m}, \alpha} f_{\alpha}^2(\vec{n} - \vec{m}) (\vec{e}_{\vec{m}, \alpha} \cdot \vec{u}_{\vec{m} - \vec{n}})^2$  - энергия полярона,  $V(\vec{n} - \vec{n}') = V_c(\vec{n} - \vec{n}') - V_{pa}(\vec{n} - \vec{n}')$  - эффективное кулоновское взаимодействие,  $\sigma(\vec{n} - \vec{n}') = T(\vec{n} - \vec{n}') \exp[-F^2(\vec{n} - \vec{n}')] -$  перенормированный интеграл перескока,

$$V_{pa}(\vec{n} - \vec{n}') = 2\hbar\omega \sum_{\vec{m}, \alpha} f_{\alpha}(\vec{n} - \vec{m}) f_{\alpha}(\vec{n}' - \vec{m}) (\vec{e}_{\vec{m}, \alpha} \cdot \vec{u}_{\vec{m} - \vec{n}}) (\vec{e}_{\vec{m}, \alpha} \cdot \vec{u}_{\vec{m} - \vec{n}'}) \quad (26)$$

- межполяронное притяжение, обусловленное ЭФВ и

$$F^2(\vec{n} - \vec{n}') = \sum_{\vec{m}, \alpha} [f_{\alpha}(\vec{n} - \vec{m}) (\vec{e}_{\vec{m}, \alpha} \cdot \vec{u}_{\vec{m} - \vec{n}}) - f_{\alpha}(\vec{n}' - \vec{m}) (\vec{e}_{\vec{m}, \alpha} \cdot \vec{u}_{\vec{m} - \vec{n}'})] \times (d_{\vec{m}, \alpha}^{\dagger} - d_{\vec{m}, \alpha})$$

В пределе сильной связи  $E_p \gg T(\vec{n} - \vec{n}')$  перенормированный интеграл перескока  $T(\vec{n} - \vec{n}')$  может быть рассмотрен как малое возмущение. При достаточно низких температурах, когда имеется ярко выраженная зона полярона, мы можем усреднить преобразованный гамильтониан  $\hat{H}$  по вакуумному состоянию фононов и получить следующий гамильтониан:

$$H_{pol} = H_0 + H_{pert} \quad (27)$$

Здесь

$$H_0 = -E_p \sum_{\vec{n}} c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{n}} + H_{ph} + \sum_{\vec{n} \neq \vec{n}'} V(\vec{n} - \vec{n}') c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{n}} c_{\vec{n}'}^{\dagger} c_{\vec{n}'},$$

$$H_{pert} = \sum_{\vec{n} \neq \vec{n}'} t(\vec{n} - \vec{n}') c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{n}'},$$

где

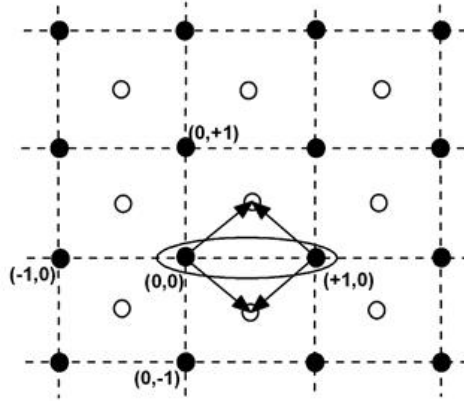
$$t(\vec{n} - \vec{n}') = \langle 0 | \sigma(\vec{n} - \vec{n}') | 0 \rangle_{phonon} = T(\vec{n} - \vec{n}') \exp[-F^2(\vec{n} - \vec{n}')],$$

$$F^2(\vec{n} - \vec{n}') = \sum_{\vec{m}, \alpha} f_{\alpha}(\vec{n} - \vec{m}) (\vec{e}_{\vec{m}, \alpha} \cdot \vec{u}_{\vec{m} - \vec{n}}) \times [f_{\alpha}(\vec{n} - \vec{m}) (\vec{e}_{\vec{m}, \alpha} \cdot \vec{u}_{\vec{m} - \vec{n}}) - f_{\alpha}(\vec{n}' - \vec{m}) (\vec{e}_{\vec{m}, \alpha} \cdot \vec{u}_{\vec{m} - \vec{n}'})]$$

Основное состояние двух связанных поляронов находится из уравнения Шредингера  $H_{pol}\Psi = E\Psi$ , где  $E$ - и  $\Psi$  - энергия связи и волновая функция биполарона, соответственно. Мы рассмотрим спаривание двух поляронов, принадлежащих медно-кислородной плоскости. При этом мы не ограничиваем взаимодействие поляронов только пределами медно-кислородной плоскости, а наоборот предполагаем, что они взаимодействуют с удаленными апексными ионами (то есть ионами вне медно-кислородной плоскости, рис.16). Волновая функция поляронной пары в дискретной решетке дается выражением

$$\Psi = \sum_{\vec{n}_1, \vec{n}_2} \varphi(\vec{n}_1, \vec{n}_2) c_{\vec{n}_1}^\dagger c_{\vec{n}_2}. \quad (28)$$

Здесь функция  $\varphi(\vec{n}_1, \vec{n}_2)$  имеет смысл амплитуды вероятности нахождения одного электрона на узле решетки  $\vec{n}_1$ , а другого электрона на узле решетки  $\vec{n}_2$ . Мы также предполагаем, что два электрона не могут занимать один и тот же узел решетки (энергия Хаббарда на узле  $V(0,0) \rightarrow \infty$ ).



Темные кружки - атомы кислорода на медно-кислородной плоскости, светлые кружки - апексные ионы кислорода вне медно-кислородной плоскости. Стрелки показывают, колебания каких апексных ионов обуславливает межполяронное притяжение

**Рис.16. Квадратная решетка атомов кислорода в медно-кислородной  $\text{CuO}_2$  плоскости купратов**

Переходя к Фурье представлению в уравнение Шредингера, получим

$$(\hat{T} + E)\varphi(\vec{q}, \vec{Q}) = -\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}', \vec{n}} \hat{V}(0, \vec{n}) e^{i\vec{n}(\vec{q} + \vec{Q}/2)} e^{-i\vec{n}\vec{q}'} \varphi(\vec{q}', \vec{Q} - \vec{q}'), \quad (29)$$

где  $\vec{Q} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$  и  $\vec{q} = (\vec{k}_1 - \vec{k}_2)/2$  - полный и относительный импульс пары, соответственно,  $\hat{V}(0,0) = 4E_p - 2U$ ,  $\hat{V}(0, \vec{n}) = 2V_{pa}(0, \vec{n})$  и

$$\hat{T} = 2 \sum_{\vec{l} \neq 0} t(\vec{l}) (e^{i(\vec{Q}/2 + \vec{q}) \cdot \vec{l}} + e^{i(\vec{Q}/2 - \vec{q}) \cdot \vec{l}}). \quad (30)$$



Аналитическое решение уравнения Шредингера (29) при произвольных  $\vec{Q}$  и далекодействующем притягивающем потенциале  $V_{pa}$  не существует. Однако, мы можем получить некоторые результаты из этого уравнения при  $\vec{Q} = 0$  ( $\Gamma$ - точка) и с усеченным потенциалом  $V_{pa}$ . Исследования показывают, что даже при этих условиях можно оценить пороговые энергии образования двухузельного биполярона с s-, p- и d- типами симметрии волновых функции. Решая уравнение (29) при допущенных предположениях находим пороговые энергии межполяронного притяжения для s-, p- d- состояний двухузельного биполярона. Так для s- биполярона:

$$V_{pa} > V_s = \frac{10t(2U-4E_p)}{40t+2U-4E_p}, \quad (31)$$

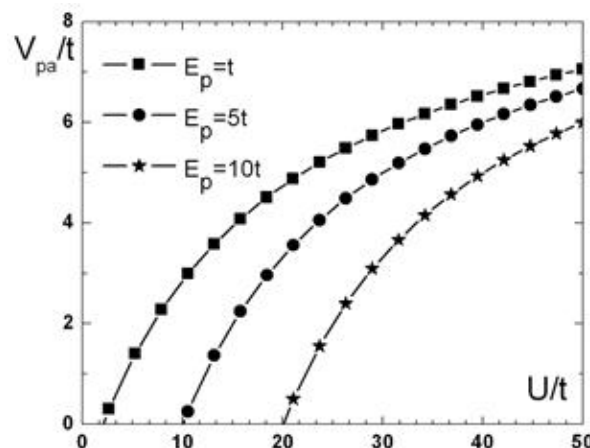
для p- биполярона:

$$V_{pa} > V_p = \frac{\pi}{\pi-2} t, \quad (32)$$

для d- биполярона:

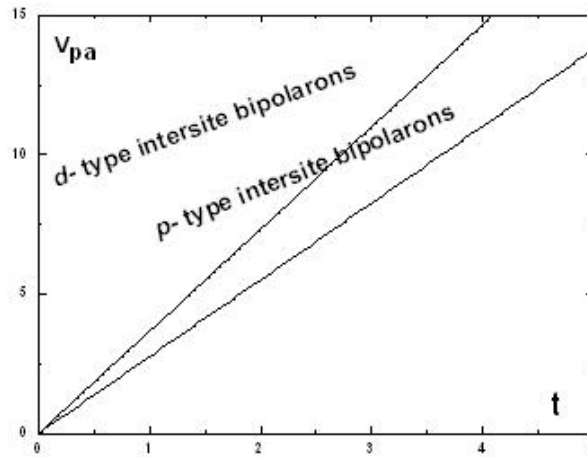
$$V_{pa} > V_d = \frac{\pi}{4-\pi} t. \quad (33)$$

Как видно из уравнения (31), пороговая энергия образования двухузельного биполярона с s- симметрией волновой функции зависит от энергии кулоновского отталкивания двух поляронов, сидящих на соседних узлах решетки  $U$ , энергии полярона  $E_p$  и интеграла перескока  $t$ . В то же время пороговые энергии двухузельного биполярона с волновыми функциями p- и d- типов симметрии (32) и (33), соответственно зависят только от двух параметров  $t$  и  $V_{pa}$ . Фазовая диаграмма состояний двухузельного s- биполярона показана на рис.17, а фазовая диаграмма состояний двухузельного биполярона с p- и d- типами симметрии волновых функции приведена на рис.18.



Образование двухузельного биполярона с s- типом симметрии волновой функции возможно в областях, лежащих сверху кривых.

**Рис.17. Фазовая диаграмма для s- биполярона в координатном пространстве  $(V_{pa}/t, U/t)$  для различных значений  $E_p/t$**



**Рис.18. Фазовая диаграмма существования р- и d- типов двухузельных биполяронов в пространстве параметров ( $V_{pa}, t$ )**

При благоприятных условиях, что имеется в купратах, биполяроны образуют идеальный газ частиц и могут претерпеть Бозе-Эйнштейновскую конденсацию. Если предположить, что масса биполярона равна двум массам полярона  $2m_p$  (это не ведет к потере общности), то температура их конденсации определяется по формуле (с учетом формулы (7))

$$T_{BEC} = \frac{3.31n^2 n^{2/3}}{2k_B m^*} e^{-g^2}, \quad (34)$$

где  $n$  - концентрация биполяронов,  $k_B$  - постоянная Больцмана и  $g^2$  определяется согласно формуле (6). Формула (34) выражает температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации  $T_{BEC}$  через два основных параметра системы: 1) концентрацию биполяронов; 2) показатель экспоненты  $g^2$ , характеризующий перенормировку массы полярона. Здесь мы применим формулу (34) для интерпретации результатов экспериментов по изучению влияния напряжений вдоль кристаллографических осей на критическую температуру  $T_C$  тонких пленок соединения  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ , выращенного на различных подложках. Выбор соединения  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  довольно прост и оправдан. В отличие от других соединений купратов, надо сказать, что  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  имеет сравнительно простую кристаллическую структуру и обычно служит тестовым материалом для множества различных теоретических моделей.

Кроме того, имеется твердое убеждение, что модель «переноса заряда под давлением» [32] не применима к соединению  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  ввиду отсутствия у последней цепочечной структуры. При этих обстоятельствах формула (34) позволяет изучить зависимость температуры Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных биполяронов  $T_{BEC}$  от относительной деформации решетки  $\epsilon_a$  или  $\epsilon_c$  при постоянном  $n$ . Очевидно, что эта зависимость обусловлена поляронными эффектами. Для того, чтобы учесть деформацию решетки под внешним давлением (напряжением) и ее влияние на температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных двухузельных биполяронов аналитическая формула

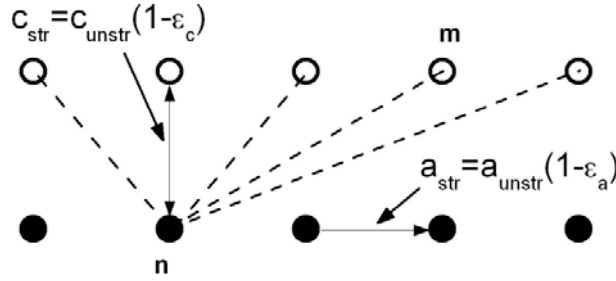


$$f_{\vec{m}}(\vec{n}) = \frac{k\epsilon(1-\epsilon_c)}{[(\vec{n}-\vec{m})(1-\epsilon_a)]^2 + (c(1-\epsilon_c))^2]^{3/2}} \quad (35)$$

для силы ЭФВ будет принята. Здесь относительные деформации решетки определены по формулам

$$\epsilon_a = \frac{s_{unstr} - s_{str}}{s_{unstr}} \text{ и } \epsilon_c = \frac{s_{unstr} - s_{str}}{s_{unstr}} \quad (36)$$

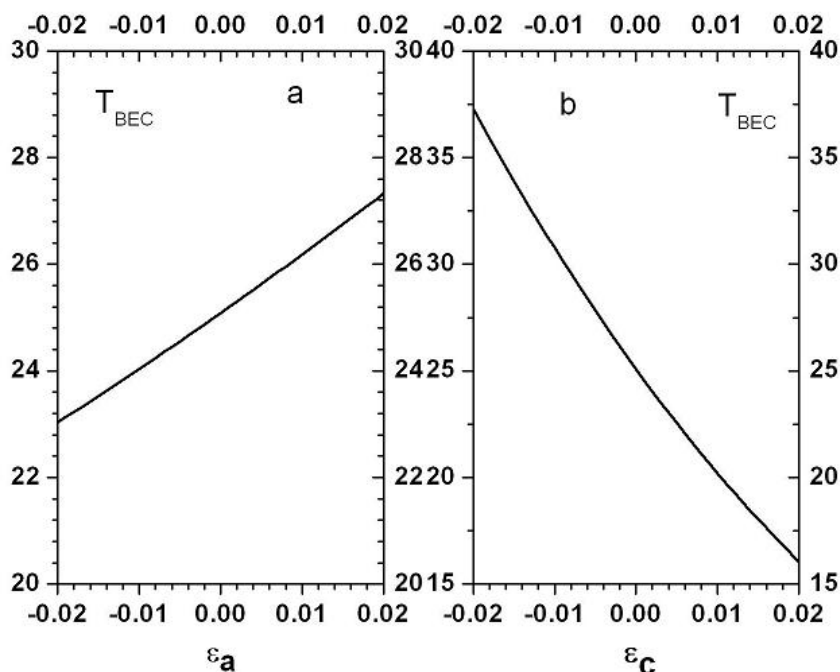
Формула (35) является обобщением силы, введенной в работе [4], и позволяет связать температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных биполяронов с деформацией решетки посредством массы биполяронов.



Периоды решетки в отсутствии внешнего давления (напряжения) равны  $a_{unstr} = 1$  и  $c_{unstr} = 1$ . Внешнее давление меняет период решетки:  $a_{str} = a_{unstr}(1 - \epsilon_a)$  и  $c_{str} = c_{unstr}(1 - \epsilon_c)$

Рис.19. Цепочечная модель решетки купратов в РМХ

Вычисленные значения температуры Бозе-Эйнштейновской конденсации  $T_{BEC}$  решеточных биполяронов для модельной решетки (рис.19) как функция напряжения  $\epsilon_a$  или  $\epsilon_c$  вдоль осей  $a$  или  $c$ , соответственно, приведены на рис.20. При этом, для того, чтобы совместить значение  $T_{BEC}$  в отсутствие напряжения с  $T_C=25\text{K}$  объемного образца соединения  $\text{La}_{1.9}\text{Sr}_{0.1}\text{CuO}_4$  [33] мы приняли следующие значения параметров системы:  $n = 1 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$  и  $k^2/(2M\hbar\omega^2) = 8.15$ . Как видно из рис. 20а напряжение сжатия вдоль оси  $a$  увеличивает температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации  $T_{BEC}$  решеточных биполяронов, в то время, то же самое напряжение сжатия вдоль оси  $c$  уменьшает значение  $T_{BEC}$  (рис.20b). Для изучаемой модельной решетки (рис.19) производные от  $T_{BEC}$  по одноосным напряжениям равны:  $\partial T_{BEC}/\partial \epsilon_a \cong 112 \text{ K}$  и  $\partial T_{BEC}/\partial \epsilon_c \cong -450 \text{ K}$ . Имеются несколько экспериментальных работ, где приведены значения  $\partial T_C/\partial \epsilon_i$  ( $i=a,b,c$ ) для соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . Так, в работе [34] изучалась серия кристаллических образцов  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  высокого качества методом дилатометрии высокой разрешающей способности. Согласно этой работе значение  $\partial T_C/\partial \epsilon_i$  сильно зависит от уровня легирования ( $x$ ) и лежит в пределах  $70 \div 470 \text{ K}$ ,  $280 \div 580 \text{ K}$  и  $(-2440 \div -1090) \text{ K}$  для  $i=a$ ,  $i=b$  и  $i=c$ , соответственно.



**Рис.20.** Зависимость температуры Бозе-Эйнштейновской конденсации  $T_{BEC}$  решеточных двухузельных биполяронов от (а) напряжения  $\epsilon_a$  вдоль оси  $a$  и (б) напряжения  $\epsilon_c$  вдоль оси  $c$

Сравнение этих данных с нашими данными показывает, что значение  $\partial T_{BEC} / \partial \epsilon_a \cong 112 K$  нашей модели лежит в пределах изменения  $\partial T_C / \partial \epsilon_a$  работы [34]. Однако, значение  $\partial T_{BEC} / \partial \epsilon_a$  нашей модели не попадает в интервал значений  $\partial T_{BEC} / \partial \epsilon_b$  работы [34], а абсолютное значение  $\partial T_{BEC} / \partial \epsilon_c$  приблизительно в четыре раза меньше, чем абсолютное значение  $\partial T_C / \partial \epsilon_c$ . Еще в одной работе [35] приводятся значения производных критической температуры сверхпроводящего перехода  $T_C$  соединения  $La_{1.91}Sr_{0.09}CuO_4$  от значения напряжения  $\epsilon_{ab}$  медно-кислородной  $CuO_2$  плоскости и напряжения  $\epsilon_c$  вдоль оси  $c$ . Согласно работе [35]  $\partial T_C / \partial \epsilon_{ab} = 284 K$  и  $\partial T_C / \partial \epsilon_c = -851 K$ . Отсюда, мы можем легко извлечь значения  $\partial T_C / \partial \epsilon_i$  ( $i=a,b$ ) из  $\partial T_C / \partial \epsilon_{ab}$  если предположим, что медно-кислородная  $CuO_2$  плоскость есть изотропная квадратная решетка, напряжения вдоль осей  $a$  и  $b$  приблизительно равны  $\epsilon_a \approx \epsilon_b$  и  $\epsilon_{ab} = \epsilon_a + \epsilon_b$ . Тогда находим  $\partial T_C / \partial \epsilon_i = 142 K$  ( $i=a,b$ ), что близко к нашему результату  $\partial T_{BEC} / \partial \epsilon_a$ . Между тем, значение  $\partial T_C / \partial \epsilon_c$  в работе [35] по абсолютной величине превосходит абсолютное значение  $\partial T_{BEC} / \partial \epsilon_c$  нашей модели в два раза.

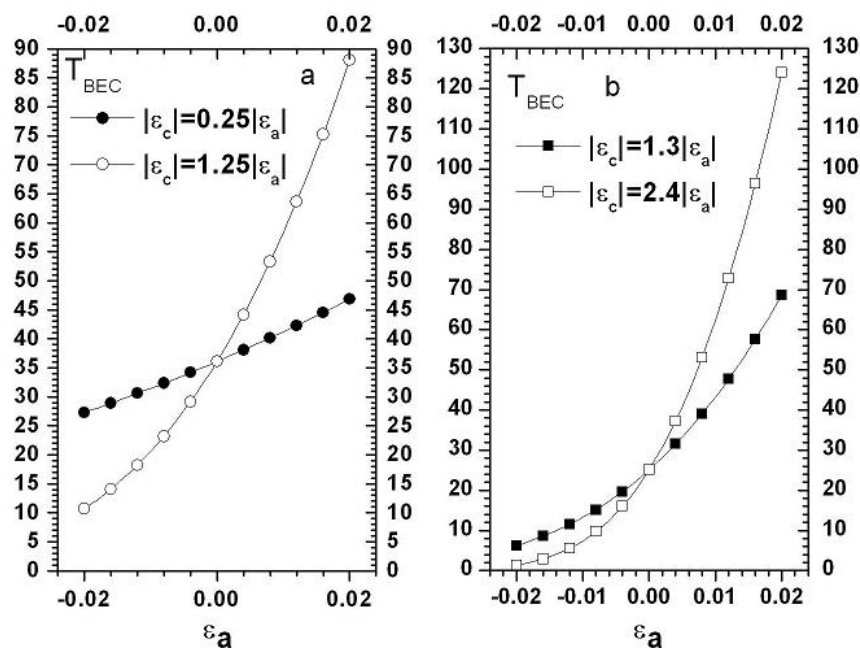
В экспериментах [33,36] показано получение тонких пленок соединения  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  в различных подложках и влияние неравенства периодов решеток пленки и подложки на их критические температуры сверхпроводящего перехода. Хотя наши результаты производной от  $T_{BEC}$  по напряжениям не точно совпадают со значениями  $\partial T_C / \partial \epsilon_i$  для объемных образцов, наша модель в состоянии удовлетворительно объяснить результаты этих экспериментов [33,36]. Сато и Наито [36] получили (001) ориентированные тонкие пленки соединения  $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$  (LSCO) на подложках  $LaSrAlO_4$  (LSAO) и  $SrTiO_3$  (STO) методом вакуумного напыления. В не напряженном состоянии периоды решеток кристаллов LSCO, LSAO и STO в плоскости, параллельной медно-кислородной плоскости, были

равны 3.777 Å, 3.756 Å и 3.905 Å, соответственно. Критическая температура  $T_C$  пленок LSCO, выращенных на подложках LSAO, равнялась почти 44 К, что на 7 К выше, чем  $T_C$  объемного образца LSCO под атмосферным давлением, а критическая температура  $T_C$  пленок LSCO, выращенных на подложках STO равнялась 29 К. Рентгеноструктурный анализ показал, что периоды решеток пленок LSCO, выращенных на подложках LSAO и STO, изменены по сравнению с таковыми объемных образцов. Так период решетки пленки LSCO, выращенной на подложке LSAO (STO) сжат в медно-кислородной  $\text{CuO}_2$ - плоскости на 0.4% (растянут на 1.6%), а период решетки вдоль оси  $c$ - растянут на 0.5% (сжат на 0.4%).

На основе анализа экспериментальных данных Сато и Наито пришли к выводу, что увеличение (уменьшение) значения  $T_C$  прямо связано с сжатием (растяжением) решетки в медно-кислородной  $\text{CuO}_2$  плоскости, обусловленным неравенством периодов решеток пленки и подложки, и увеличением (уменьшением) периода решетки вдоль  $c$ - оси из-за эффекта Пуассона. Отношения значения напряжения вдоль оси  $c$  к напряжению вдоль оси  $a$  составляли  $\epsilon_c/\epsilon_a = 1.25$  и  $\epsilon_c/\epsilon_a = 0.25$  для пленок, выращенных на подложках LSAO и STO, соответственно.

Мы вычислили  $T_{BEC}$  нашей модели при  $\epsilon_c/\epsilon_a = 1.25$  и  $\epsilon_c/\epsilon_a = 0.25$ . Результаты

представлены на рис.21а в виде зависимости  $T_{BEC}$  от  $\epsilon_a$ .



а - для двух пленок купратов из эксперимента [42],  $k^2/(2M\hbar\omega^3) = 7.77$ ;

б - для двух пленок купратов из эксперимента [39],  $k^2/(2M\hbar\omega^3) = 8.15$ .

**Рис.21. Зависимость температуры Бозе-Эйнштейновской конденсации  $T_{BEC}$  решеточных двухузельных биполяронов от напряжения  $\epsilon_a$  вдоль оси  $a$**

Для напряжения сжатия  $\epsilon_a = 0.4\%$  наша модель дает  $T_{BEC}=44.1$  К, что практически совпадает с наблюдаемым значением  $T_C=44$  К пленки LSCO, выращенной на подложке LSAO. Для напряжения растяжения  $\epsilon_a = -1.6\%$  наша модель дает

$T_{BEC}=28.9$  К, что также близко к наблюдаемому значению  $T_C=29$  К для пленки LSCO, выращенной на STO подложке. Стоит заметить, что наша модель прекрасно описывает эксперимент Сато и Найто [36]. Рост пленок соединения  $La_{1.9}Sr_{0.1}CuO_4$  (LSCO) на подложках  $LaSrAlO_4$  (LSAO) и  $SrTiO_3$  (STO) методом молекулярно-лучевой эпитаксии и значение  $T_C$  этих пленок представлены в работе авторов Лоскует и др.[33]. Рентгеноструктурный  $\theta - 2\theta$  анализ показал, что решетка выращенных пленок сильно напряжена в медно-кислородной плоскости и вне ее. Для пленки, выращенной на LSAO (STO) подложке, были найдены следующие значения напряжений:  $\epsilon_{ab} = 0.63\%$  и  $\epsilon_c = -0.76\%$  ( $\epsilon_{ab} = -0.54\%$  и  $\epsilon_c = 0.35\%$ ). Отношения напряжений  $\epsilon_c/\epsilon_{ab}$  для пленок, выращенных на подложках LSAO и STO, равны соответственно 1.2 и 0.65. Учитывая соотношение  $\epsilon_{ab} = 2\epsilon_a$ , перепишем последние отношения как  $\epsilon_c/\epsilon_a = 2.4$  и  $\epsilon_c/\epsilon_a = 1.3$  для пленок на LSAO и STO подложках, соответственно. Результаты вычисления  $T_{BEC}$  для этих значений отношения  $\epsilon_c/\epsilon_a$  даны графически на рис.21b. Как видно из рис.21b для напряжения сжатия  $\epsilon_a = 0.63\%$  и отношения  $\epsilon_c/\epsilon_a = 2.4$  наша модель дает значение  $T_{BEC} = 46$ К, в то время как для напряжения растяжения  $\epsilon_a = -0.54\%$  и отношения  $\epsilon_c/\epsilon_a = 1.3$  мы находим  $T_{BEC} \approx 18$ К. Наш результат  $T_{BEC} = 46$ К близок к значению  $T_C=49$ К для пленки LSCO на LSAO подложке. Однако, имеется некоторое расхождение  $T_{BEC} \approx 18$ К от наблюдаемой  $T_C=10$ К для пленки LSCO на STO подложке. Эти расхождения могут быть обусловлены несколькими причинами: простотой изучаемой модельной решетки (в реальности должна быть рассмотрена структура с более сложной решеткой); выбором аналитической формулы для силы электрон-фононного взаимодействия; предположением, что биполярны образуют идеальный Бозе-газ (в реальности, из-за других факторов может случиться отклонение от идеальности и образование неидеального Бозе-газа или Бозе-жидкости); сверхпроводимость купратов может быть обусловлена не только электрон-фононным взаимодействием, но иметь вклад и от других взаимодействий. Эти обстоятельства предполагают более тщательное и детальное исследование изучаемой проблемы. Хотя мы рассмотрели простую модельную решетку, ее общие характеристики качественно согласуются со многими экспериментальными наблюдениями. В самом деле, наша модель предсказывает увеличение  $T_C$  при сжатии  $ab$ - плоскости купратов и ее уменьшение при сжатии вдоль оси  $c$ . Такие вариации критической температуры сверхпроводящего перехода в зависимости от напряжения обнаружены во многих лантоновых купратах. Эти свойства относятся как к тонким пленкам, так и к объемным образцам. Теоретически наша модель в состоянии оценить  $T_{BEC}$  при любом значении  $\epsilon_i$ , хотя получение пленок с большими напряжениями, обусловленными неравенством периодов пленки и подложки, может иметь технологические ограничения. Кроме того, следует иметь в виду, что наше рассмотрение относится только к пленкам оптимальной толщины. Наша модель служит общим подходом для изучения зависи-

мости  $T_C$  от напряжения (давления) в купратах. При этом, применение модели к конкретным купратам должно быть выполнено с учетом особенностей соединения (пленки или объемного образца).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертация посвящена изучению свойств системы, состоящей из носителей зарядов (электронов или дырок) и фононов колебаний кристаллической решетки (бозонного поля). При этом предполагалось, что электрон-фононное взаимодействие в системе сильное и имеются благоприятные условия для устойчивого существования поляронов или биполяронов. Для описания и объяснения свойств купратов была использована расширенная модель Холстейна, а при необходимости рассмотрения биполяронов работали в рамках расширенной модели Холстейна-Хаббарда. В частности, в диссертации проведено исследование вопроса о массе полярона и о его оптической проводимости в рамках расширенной модели Холстейна. Кроме того, был изучен вопрос об образовании двухузельного решеточного биполарона и о влиянии одноосного напряжения на температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации биполяронов. На основе проделанной работы сделаны следующие выводы:

1. Расширенная модель Холстейна является вполне адекватной и последовательной моделью, способной описывать поляронные эффекты в купратах, в которых носители заряда, находящиеся в медно-кислородной ( $\text{CuO}_2$ ) плоскости, сильно взаимодействуют с апексными ионами.

2. Масса и оптическая проводимость поляронов в расширенной модели Холстейна сильно зависят от детальной структуры решетки и природы электрон-фононного взаимодействия. При этом, на параметры полярона (массу, энергию, оптическую проводимость) существенное влияние оказывает структура ближайшего окружения полярона. В пределе сильной связи масса полярона в расширенной модели Холстейна намного порядков меньше, чем масса полярона в обычной модели Холстейна при одинаковой энергии поляронов. Кривая оптической проводимости в расширенной модели Холстейна отличается от таковой в обычной модели Холстейна. В частности, максимум кривой оптической проводимости смещен в сторону меньших энергий и сама кривая более асимметрична, что обусловлено дальнедействующей природой электрон-фононного взаимодействия.

3. На основе исследований установлено, что результаты, полученные для массы и оптической проводимости поляронов в расширенной модели Холстейна, находятся в удовлетворительном согласии со значениями массы носителей заряда в купратах и инфракрасного поглощения купратов. В частности, наблюдаемый максимум в спектре инфракрасного поглощения в интервале энергии  $\approx(0.1\div 0.5)$  эВ может быть интерпретирован как поглощение фотона поляроном в расширенной модели Холстейна.

4. В результате развития теории малых поляронов расширенной модели Холстейна с экранированным электрон-фононным взаимодействием, введения потенциала Юкавы в качестве потенциала экранированного электрон-фононного взаимодействия в рамках расширенной модели Холстейна показано, что ранее исполь-

зованные выражения силы экранированного электрон-фононного взаимодействия являются приближенными и справедливы при условии, когда радиус экранировки намного больше, чем рассматриваемые расстояния.

5. Масса полярона, вычисленная с использованием выражений для сил, выведенных из потенциала Юкавы, меньше по значению, чем масса полярона, вычисленная ранее другими авторами при одних и тех же режимах экранирования.

6. Оптическая проводимость поляронов в расширенной модели Холстейна также зависит от экранирования электрон-фононного взаимодействия. С уменьшением радиуса экранирования пик кривой (как и кривая в целом) оптической проводимости поляронов в расширенной модели Холстейна сдвигается в сторону меньших значений энергии фотона. Причем, влияние экранирования на оптическую проводимость поляронов в расширенной модели Холстейна наиболее сильно, когда радиус экранировки сравним с постоянной решетки.

7. Оптическое (инфракрасное) поглощение купратов может быть объяснено в рамках расширенной модели Холстейна, которая учитывает природу электрон-фононного взаимодействия, структуру решетки и экранирование электрон-фононного взаимодействия.

8. На основе решения уравнения Шредингера в квадратной решетке для двух поляронов, взаимодействующих посредством кулоновского потенциала отталкивания  $U$  и притягивающего потенциала  $V_{pa}$ , обусловленных электрон-фононным взаимодействием, определены пороговые энергии образования и получены фазовые диаграммы двухузельных решеточных биполяронов с волновыми функциями s-, p- и d- симметрии.

9. Развита новая теория о влиянии одноосных деформаций решетки на температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных двухузельных биполяронов.

10. Предложена новая формула для силы электрон-фононного взаимодействия, которая является обобщением ранее введенного выражения для силы и способна явно учитывать деформацию решетки.

11. На основе расширенной модели Холстейна и биполярного механизма сверхпроводимости объяснены эксперименты по одноосному сжатию купратов и влиянию этого сжатия на критическую температуру сверхпроводящего перехода, в частности, результаты экспериментов [33,36].

## ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Bednorz J.G., Müller K.A. Possible High  $T_c$  Superconductivity in the Ba-La-Cu-O system // Z. Physik B. – Berlin, 1986. – V.64. – Issue 2. – P.189
2. Hübner S., Hossain M.A., Damascelli A., Sawatzky G.A. Two gaps make a high-temperature superconductor // Rep. Prog. Phys.–Bristol,2008.–V.71, №6. – P.062501
3. Radović Z., Božović N., Božović I. Photoinduced expansion of cuprate superconductors: Evidence of strong electron-lattice coupling // Phys. Rev. B. – Ann Arbor, 2008. – Vol.77. – P.092508
4. Alexandrov A.S., Kornilovitch P.E. Mobile Small Polaron // Phys. Rev. Lett. – Lancaster, 1999. – Vol.82, №4. – P.807



5. Devreese J.T., Alexandrov A.S. Fröhlich polaron and bipolaron: recent developments // *Rep. Prog. Phys. – Bristol*, 2009. – Vol.72. – P.066501
6. Chen C.Y., Birgeneau R.J., Kastner M.A., Preyer N.W., Tineke Thio. Frequency and magnetic-field dependence of the dielectric constant and conductivity of  $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$  // *Phys. Rev. B – Ann Arbor*, 1991. – Vol.43. – P.392
7. Yelland E.A., Singleton J., Mielke C.H., Harrison N., Balakirev F.F., Dabrowski B., Cooper J.R. Quantum Oscillations in the Underdoped Cuprate  $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$  // *Phys. Rev. Lett. – Lancaster*, 2008. – Vol.100. – P.047003
8. Fehske H., Loos J., Wellein G. Lattice polaron formation: Effects of nonscreened electron-phonon interaction // *Phys.Rev.B. –Ann Arbor*,2000.–Vol.61,№.12. – P.8016
9. Kornilovitch P.E. Continuous-Time Quantum Monte Carlo Algorithm for the Lattice Polaron // *Phys. Rev. Lett. – Lancaster*, 1998. – Vol.81, №24. – P.5382
10. Kornilovitch P.E. Giant enhancement of anisotropy by electron-phonon interaction // *Phys. Rev. B. – Ann Arbor*, 1999. – Vol.59. – P.13531
11. Kornilovitch P.E. Ground-state dispersion and density of states from path-integral Monte Carlo: Application to the lattice polaron // *Phys. Rev. B. – Ann Arbor*, 1999. – Vol.60, №5. – P.3237
12. Bonča, J., Trugman S.A. Bipolarons in the extended Holstein Hubbard model // *Phys. Rev. B. – Ann Arbor*, 2001. – Vol.64, № 9. – P. 094507
13. Trugman S.A., Bonča J., Li-Chung Ku. Statics and dynamics of coupled electron-phonon systems // *Int. J. Mod. Phys. B. – Singapore*, 2001.– V.15, №19-20. – P.2707
14. Bonča J., Trugman S.A. Holstein and Fröhlich bipolarons// *Physica C. – Amsterdam*, 2001. – Vol. 364-365. – P.141
15. Alexandrov A.S., Kornilovitch P.E. The Fröhlich-Coulomb model of high-temperature superconductivity and charge segregation in the cuprates // *J. Phys.: Condens. Matter. – Bristol*, 2002. – Vol.14, №21. – P. 5337
16. Perroni C.A., Cataudella V., Filippis G.De. Polaron features for long-range electron-phonon interaction // *J.Phys.: Condens. Matter.–Bristol*, 2004.–Vol.16, №9.– P.1593
17. Cataudella V., De Filippis G., Martone F., Perroni C.A. Variational approach to the optimized phonon technique for electron-phonon problems // *Phys.Rev.B. – Ann Arbor*, 2004. – Vol.70, №19. – P.193105
18. Hohenadler M., Evertz H.G., Von der Linden, Wolfgang. Quantum Monte Carlo and variational approaches to the Holstein model // *Phys. Rev. B. – Ann Arbor*, 2004. – Vol.69, №2. – P.024301
19. Spencer P.E., Samson J.H., Kornilovitch P.E., Alexandrov A.S. Effect of electron-phonon interaction range on lattice polaron dynamics: A continuous-time quantum Monte Carlo study // *Phys. Rev. B. – Ann Arbor*, 2005. – Vol.71, №18. – P.184310
20. Hague J.P., Kornilovitch P.E., Alexandrov A.S., Samson J.H. Effects of lattice geometry and interaction range on polaron dynamics // *Phys. Rev. B. – Ann Arbor*, 2006. – vol.73, №5. – P.054303
21. Kornilovitch P.E. Path-integral approach to lattice polarons // *J. Phys.: Condens. Matter – Bristol*, 2007. – Vol.19, №25. – P.255213
22. Hague J.P., Kornilovitch P.E., Samson J.H., Alexandrov A. S. Superlight small bipolarons // *J. Phys.: Condens. Matter. – Bristol*, 2007. – Vol.19, №25. – P.255214

23. Hague J.P., Kornilovitch P.E. Bipolarons from long-range interactions: Singlet and triplet pairs in the screened Hubbard-Fröhlich model on the chain // *Phys. Rev. B. – Ann Arbor*, 2009. – Vol.80, №5. – P.054301
24. Kornilovitch P. Enhanced stability of bound pairs at nonzero lattice momenta // *Phys. Rev. B. – Ann Arbor*, 2004. – Vol.69. – P.255110
25. Timusk T., Homes C.C., Reichardt W. The role of *c*-axis polarized phonons in high temperature superconductors // in *Anharmonic Properties of High- $T_C$  Cuprates.*/ Eds. D.Mihailović and et. al.- World Scientific, Singapore, 1995.- P.171.
26. Bi X.X., Eklund P.C. Polaron contribution to the infrared optical response of  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$  and  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_{4+\delta}$  // *Phys. Rev. Lett. – Lancaster*, 1993. – Vol. 70, №17. – P.2625
27. Zhou X. J., Shi Junren, Yoshida T., et al. Multiple Bosonic Mode Coupling in the Electron Self-Energy of  $(\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x)\text{CuO}_4$  // *Phys. Rev. Lett. – Lancaster*, 2005. – Vol.95, №11. – P.117001
28. McQueeney R.J., Petrov Y., Egami T., Yethiraj M., Shirane G., Endoh Y. Anomalous Dispersion of LO Phonons in  $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$  at Low Temperatures // *Phys. Rev. Lett. – Lancaster*, 1999. – Vol.82, №3. – P.628
29. Alexandrov A. S., Bratkovsky A. M. The essential interactions in oxides and spectral weight transfer in doped manganites // *J. Phys.: Condens. Matter. – Bristol*, 1999. – Vol.11. – P.L531
30. Grüninger M., van der Marel D., Damascelli A., Erb A., Nunner T., Kopp T. Midinfrared absorption in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ : Evidence for a failure of spin-wave theory for spin 1/2 in two dimensions // *Phys. Rev. B. – Ann Arbor*, 2000. – Vol.62, №18. – p.12422
31. Zhao Guo-meng. Evidence for very strong electron-phonon coupling in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$  // *Phys. Rev. B. – Ann Arbor*, 2007. – Vol.75, №10. – P.104511
32. Millis A.J., Rabe K.M. Superconductivity and lattice distortions in high- $T_C$  superconductors // *Phys. Rev. B. – Ann Arbor*, 1988. – Vol.38, №13. – P.8908
33. Locquet J.P., Perret J., Fompeyrine J., Machler E., Seo J.W., van Tendeloo G. Doubling the critical temperature of  $\text{La}_{1.9}\text{Sr}_{0.1}\text{CuO}_4$  using epitaxial strain // *Nature. – London*, 1998. – Vol.394. – P.453
34. Gugenberger F., Meingast Ch., Roth G., Grube K., Breit V., Weber T., Wühl H., Uchida S., Nakamura Y. Uniaxial pressure dependence of  $T_c$  from high-resolution dilatometry of untwinned  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  single crystals // *Phys. Rev. B. – Ann Arbor*, 1994. – Vol.49, №18. – P.13137
35. Nohara M., Suzuki T., Maeno Y., Fujita T., Tanaka I., Kojima H. Anisotropic coupling between high- $T_c$  superconductivity and lattice in single-crystalline  $\text{La}_{1.86}\text{Sr}_{0.14}\text{CuO}_4$  // *Physica C. – Amsterdam*, 1991. – Vol.185-189, part 2. – P. 1397
36. Sato H., Naito M. Increase in the superconducting transition temperature by anisotropic strain effect in (001)  $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$  thin films on  $\text{LaSrAlO}_4$  substrates // *Physica C. – Amsterdam*, 1997. – Vol. 274, №3-4. – P. 221

## СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

### Статьи в научных журналах:



1. Alexandrov A. S., Yavidov B. Small adiabatic polaron with a long-range electron-phonon interaction // *Physical Review B*. – Ann Arbor, 2004. – V.69. – P.073101(1-4).
2. Yavidov B.Ya., Kurbanov U., Dzhumanov S. Double-well potential task for an adiabatic small polaron // *Uzbek Journal Physics*. – Tashkent, 2005. – V.7, №3. – P. 192-196.
3. Yavidov B.Ya., Kurbanov U. Optical conductivity of small adiabatic polarons with a long-range electron-phonon interaction // *Uzbek Journal Physics*. – Tashkent, 2005. – V. 7, №5-6. – P. 330-335.
4. Явидов Б., Тулепбергенов С., Джуманов С., Турманов И., Жолдасова С., Курбанов У., Жумагалиева Д. Квазиклассическое решение двухузельной задачи для малого полярона Фрëлиха в адиабатическом приближении // *Вестник Актюбинского государственного университета имени К.Жубанова*. – Актобе, 2006. – № 1(26). – С.3-6.
5. Явидов Б., Нарымбетов Б. Квазиклассическое решение двухузельной задачи для адиабатического малого полярона Фрëлиха // *Вестник ККО АН РУз*. – Нукус, 2007. – № 1(206). – С. 12-14.
6. Явидов Б., Курбанов У., Джуманов С. Межузельные электронные (дырочные) пары в квазидвумерной решетке купратов. Часть 1. // *Узбекский физический журнал*. – Ташкент, 2008. – Том 10, № 3. – С. 180-183.
7. Yavidov B. Two site model for a small polarons: mass renormalization and optical conductivity // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – Москва, 2009. – Том 135, № 6, – С. 1173-1177 (*Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – Berlin, 2009. – Vol. 108, №6. – P. 1019-1023).
8. Yavidov B. Small polaron mass with a long range density-displacement type interaction // *Physica B*. – Amsterdam, 2009. – Vol. 404, №20. – P. 3756-3760.
9. Явидов Б., Тулепбергенов С., Жолдасова С., Жазымова М., Саришова А. Межузельный биполярон в квазидвумерной решетке купратов // *Вестник Актюбинского государственного университета имени К.Жубанова*. – Актобе, 2009. – № 2(39). – С.9-14.
10. Явидов Б., Курбанов У., Джуманов С. Межузельные электронные (дырочные) пары в квазидвумерной решетке купратов. Часть 2. // *Узбекский физический журнал*. – Ташкент, 2009. – Том 11, № 3. – С. 178-181.
11. Yavidov B. Intersite pairs of in-plane polarons of cuprates // *Physica C*. – Amsterdam, 2010. – V. 470, №1. – P. 85-88.
12. Yavidov B., Tsyba P., Zholdasova S.M., Myrzakulov R., Dzhumanov S. Optical conductivity of small Fröhlich polarons // *Вестник Евразийского Национального университета имени Л.Н.Гумилева*.–Астана, 2010.–№ 4(77).–С. 21-24.
13. Belisarova F.B., Yavidov B.Ya., Zholdasova S.M., Tsyba P.Yu., Myrzakulov R. An effect of the ions arrangement of cuprates on polaron mass // *Известия НАН РК, серия физико-математическая*. – Алматы, 2010. – № 2(270). – С. 9-13.
14. Yavidov B.Ya. Extended Holstein polaron mass // *Украинский физический журнал*. – Киев, 2010. – Т.55, № 3. – P. 335-341.
15. Yavidov B.Ya., Djumanov Sh. S., Dzhumanov S. Mass of a lattice polaron from extended Holstein model using Yukawa potential // *Physics Letters A*. – Amsterdam, 2010. – Vol. 374. – P. 2772-2776.

16. Yavidov B.Ya. Effect of screening of the electron-phonon interaction on mass renormalization and optical conductivity of the Extended Holstein model polarons // *European Physics Journal B.* – Berlin, 2010. – Vol. 75. – P. 481-488.

17. Yavidov B.Ya. An effect of the uniaxial strain on the temperature of Bose-Einstein condensation of the intersite bipolarons // *Physica C.* – Amsterdam, 2011. – Vol. 471, № 3-4. – P. 71-76.

**Статьи в сборниках научных трудов и материалах научных конференций. Тезисы докладов на конференциях:**

18. Явидов Б., Курбанов У. Межузельные электронные пары в сильно коррелированной электрон-фононной системе. // *Фундаментальные и прикладные проблемы современной физики: Тез. докл. Респ. науч.-практ. конф.* – Ташкент: Национальный университет Узбекистана, 2007. – С.102-104.

19. Явидов Б. Образование межузельного биполярона в высокотемпературных сверхпроводниках // *Рост, свойства и применение кристаллов: Материалы IV-Респ. науч. конф. 11-12 апреля 2008.* – Андижан: Андижанский государственный университет, 2008. – С. 38-40

20. Явидов Б., Сабурова Г., Шамуратов М. Поляронларнинг оптик ўтказувчанлиги // *Сборник докладов 2-ой Респ. конф. молодых физиков Узбекистана 25 - 26 ноября 2008.* – Ташкент: Институт ядерной физики АН РУ, 2008. – С. 130-132

21. Явидов Б., Алламбергенова М., Султанов, Р. Сагындиқова А., Халмуратова Н. Образование двухузельного биполярона в высокотемпературных сверхпроводниках // *Сборник докладов 2-ой Респ. конф. молодых физиков Узбекистана 25 - 26 ноября 2008.* – Ташкент: Институт ядерной физики АН РУ, 2008. – С. 132-140

22. Yavidov B. Optical absorption of small Frohlich polarons // *Оптические методы в современной физике: Материалы Респ. конф. 7-8 мая 2008.* – Ташкент: Национальный университет Узбекистана, 2008. – С. 122-124

23. Yavidov B.Ya., Zholdasova S. An influence of arrangement of nearest apical and distant ions of charge reservoir of cuprates on polaron mass // *Физика твердого тела (ФТТ-XI): Материалы XI Международной конференции 9-12 июня 2010.* – Усть-Каменогорск, 2010. – С. 76-80.

24. Явидов Б.Я., Курбанов У.Т., Ишмуратов А. Масса и оптическая проводимость полярона в расширенной модели Холстейна с экранированной электрон-решеточной взаимодействием // *Актуальные проблемы современной физики и астрономии: Материалы II Респ. научн. конф. 21 мая 2010.* – Карши: Каршинский государственный университет, 2010. – С. 23-24

25. Явидов Б.Я., Курбанов У., Худайбердиев З., Ганиев О. Влияние удаленных ионов на массу малого полярона // *Актуальные проблемы современной физики и астрономии: Материалы II Респ. науч. конф. 21 мая 2010.* – Карши: Каршинский государственный университет, 2010. – С. 167-169

26. Yavidov B.Ya. Mass and optical conductivity of the extended Holstein model polarons // *Актуальные вопросы теоретической и прикладной биофизики, физики и химии: Материалы VI Международной научно-технической конференции*

(БФФХ-2010) 26-30 апреля 2010. – Т.1 "Общие вопросы физики и химии". – Севастополь, 2010. – С. 20-22,

27. Явидов Б.Я. Влияние одноосного сжатия на температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных биполярнов // Фундаментальные и прикладные вопросы физики: Материалы IV Международной конференции, посвященной 80-летию академика М.С.Саидова, 24- 25 ноября 2010. – Ташкент: ФТИ НПО «Физика-Солнце АН РУз, 2010. –С. 433-435

Физика-математика фанлари доктори илмий даражасига талабгор Явидов Бахрам Янгибаевичнинг 01.04.07 – конденсирланган ҳолат физикаси ихтисослиги бўйича «Кенгайтирилган Холстейн моделида заряд ташувчисининг массаси ва поляронларнинг оптик ўтказувчанлиги» мавзусидаги диссертациясининг

## РЕЗЮМЕСИ

**Таянч сўзлар:** электрон-фонон таъсирлашуви, полярон, биполярон, кенгайтирилган Холстейн модели, Бозе-Эйнштейн конденсацияси, юқори ҳароратли ўтаўтказувчанликнинг биполярон механизми.

**Тадқиқот объектлари:** полярон, биполярон, купратлар.

**Ишнинг мақсади:** узокдан таъсир этадиган электрон-фонон таъсирлашувини инобатга олган ҳолда кичик поляроннинг Холстейн моделини ривожлантириш орқали енгил поляроннинг мавжуд бўлишини кўрсатиш ва купратли юқори ҳароратли ўтаўтказувчанликда заряд ташувчисининг массаси қийматини, инфрақизил ютилиш ва ўтаўтказувчан ҳолатга ўтиш критик ҳароратининг юқори қийматларини тушунтириш.

**Тадқиқот услублари:** иккиламчи квантлаш усули, Ланг-Фирсовнинг алмаштириш усули, квазиклассик яқинлашиш (ВКБ усули), Франка-Кондон принципи, ноадиабатик ва адиабатик яқинлашувлар.

**Олинган натижалар ва уларнинг янгилиги:** конденсирланган ҳолатлар физикаси ва кучли таъсирлашувчи электронлар ва фононларлардан ташкил топган система назарияси, хусусан узокдан таъсир этувчи электрон-фонон таъсирлашуви негизидаги панжарали Холстейн поляронлари назарияси ривожлантирилган. Бундан ташқари поляронларнинг жуфтлашиш назарияси ривожлантирилган ва ташқи босим (кучланиш)нинг панжарали биполяронларнинг Бозе-Эйнштейн конденсацияси температурасига таъсирининг янги назарияси таклиф этилган.

**Амалий аҳамияти** каттиқ жисмлар назариясини, таъсирлашувчи электрон-фонон системаси назариясини, хусусан Холстейннинг панжарали поляронлари назариясини ривожлантирилганлигидадир. Бундан ташқари ривожлантирилган усуллар купратларда заряд ташувчисининг массасини ва поляронларнинг оптик ўтказувчанлигини ҳисобоаш, икки тугунли биполяроннинг ҳосил бўлишини ва ўтаўтказувчанликнинг биполярон назариясига асосланиб купратларининг критик ҳароратларини чамалаш имконини беради.

**Татбиқ этиш даражаси ва иқтисодий самарадорлиги:** Иш фундаментал характерга эга бўлиб унинг натижалари купратларда эффектив масса, оптик (инфрақизил) ютилиш, ўтаўтказувчанлик тартиб параметрининг симметрияси ва ташқи босим (кучланиш)нинг критик ҳароратга таъсири билан боғлиқ тажриба натижаларини тушунтиришда ишлатилиши мумкин.

**Қўлланиш соҳаси:** конденсирланган ҳолатлар физикаси ва юқори ҳароратли ўтаўтказувчанлик материалшунослиги.

## РЕЗЮМЕ

диссертации Явидова Бахрама Янгибаевича на тему: «Масса носителя заряда и оптическая проводимость поляронов в расширенной модели Холстейна» на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

**Ключевые слова:** электрон-фононное взаимодействие, полярон, биполярнон, расширенная модель Холстейна, Бозе-Эйнштейновская конденсация, биполярнонный механизм высокотемпературной сверхпроводимости.

**Объекты исследования:** полярон, биполярнон, купраты.

**Цель работы:** развитие модели малого полярона Холстейна с учетом дальнедействующего электрон-фононного взаимодействия для установления возможности существования полярона с малой массой и объяснения значения массы носителя заряда, инфракрасного поглощения и высоких значений критической температуры сверхпроводящего перехода в купратных высокотемпературных сверхпроводниках.

**Методы исследования:** метод вторичного квантования, метод преобразований Ланга-Фирсова, метод теорий возмущения, квазиклассическое приближение (метод ВКБ), принцип Франка-Кондона, неадиабатическое и адиабатическое приближения.

**Полученные результаты и их новизна:** Развита теория конденсированного состояния, теория сильно взаимодействующих систем электронов и фононов, в частности, теория решеточных поляронов Холстейна с дальнедействующим электрон-фононным взаимодействием. Развита теория спаривания двух поляронов и предложена новая теория влияния внешнего давления (напряжения) на температуру Бозе-Эйнштейновской конденсации решеточных биполярнонов.

**Практическая значимость работы** заключается в возможности использования результатов для развития теории твердого тела, теории взаимодействующих электрон-фононных систем, в частности, теории решеточных поляронов Холстейна. Кроме того, с практической точки зрения, развитые методы позволяют определить массу носителя заряда в купратах, оптическую проводимость поляронов, оценить условия существования двухузельных биполярнонов и критические температуры сверхпроводящего перехода, опираясь на биполярнонную модель сверхпроводимости.

**Степень внедрения и экономическая эффективность:** Работа носит фундаментальный характер, и ее результаты могут быть использованы для теоретической интерпретации результатов экспериментальных данных по эффективной массе носителей заряда в купратах, по оптическому (инфракрасному) поглощению купратов, по симметрии параметра порядка сверхпроводимости в купратах и в экспериментах по влиянию внешнего давления (напряжения) на критическую температуру сверхпроводящего перехода купратов.

**Область применения:** физика конденсированного состояния и высокотемпературное сверхпроводниковое материаловедение.

## RESUME

Thesis of Bahram Yangibaevich Yavidov on the scientific degree competition of the doctor of sciences in physics-mathematics on speciality 01.04.07 – Condensed state physics on the subject: “Mass of charge carrier and optical conductivity of polarons within the framework of extended Holstein model”

**Key words:** electron-phonon interaction, polaron, bipolaron, extended Holstein model, Bose-Einstein condensation, bipolaronic mechanism of high temperature superconductivity.

**Subjects of research:** polaron, bipolaron, cuprates.

**Purpose of work:** development of small polaron Holstein model, taking into account long-range electron-phonon interaction to establish the possible existence of a polaron with a small mass and explain the value of the mass of the charge carrier, infrared absorption, and the high values of the superconducting transition temperature in cuprate high-temperature superconductors.

**Methods of research:** method of secondary quantization, Lang-Firsov transformation, perturbation theory method, quasiclassical approach (WKB method), Frank-Condon principle, nonadiabatic and adiabatic approaches.

**The results obtained and their novelty:** condensed matter theory, theory of strongly interacting system of electrons and phonons, in particular theory of lattice Holstein polarons with long-range electron-phonon interaction are developed. Besides that in the thesis a theory of pairing of two polarons is developed and a new theory of influence of external pressure (strain) on the temperature of Bose-Einstein condensation of lattice bipolarons is proposed.

**Practical value:** lies in the possibility of their use in general for the development of solid-state theory, the theory of interacting electron-phonon systems, in particular the Holstein's lattice-polaron theory. In addition, from a practical point of view, the developed methods allow us to calculate the mass of the charge carrier in the cuprates, to calculate the optical conductivity of polarons, assess the conditions of existence of two-site bipolaron, and the superconducting transition temperature based on the bipolaron model of superconductivity.

**Degree of embed and economic effectivity:** The work is fundamental and its results can be used for theoretical interpretation of experimental data on the effective mass of carriers in the cuprates, the optical (IR) absorption of the cuprates, the order parameter of superconductivity in cuprates and in experiments on the effect of external pressure (strain) at superconducting transition temperature of cuprates.

**Field of application:** condensed matter physics and high temperature superconducting material science.

Соискатель:

Б.Я.ЯВИДОВ