

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования*
«ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

На правах рукописи

ДОРОНКИНА Станислава Валерьевна

**ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА СИСТЕМ С СИЛЬНЫМ
ЭЛЕКТРОН-ФОНОННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ И
ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА**

1.3.8. Физика конденсированного состояния

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор **Мясникова** Анна Эдуардовна

Ростов-на-Дону

2023

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	4
1 Системы с сильным электрон-фононным взаимодействием на примере купратных высокотемпературных сверхпроводников (<i>обзор литературы</i>).....	12
2 Стационарные состояния делокализованных носителей заряда и ширина псевдощели в системах с сильным электрон-фононным взаимодействием и дисперсией, подобной дисперсии купратов	23
2.1 Потенциал, создаваемый зарядовым упорядочением.....	24
2.2 Стационарные состояния делокализованных носителей в потенциале зарядового упорядочения.....	26
2.3 Моделирование закона дисперсии, характерной для дисперсии купратов, вблизи поверхности Ферми и антинодального направления	31
2.4 Ограничения, накладываемые на распределенные волновые пакеты вблизи антинодального направления	34
2.5 Распределенные волновые пакеты в антинодальных спектрах фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES).....	36
2.6 Расчет спектра ARPES для потенциала зарядового упорядочения, зависящего от двух переменных.....	43
2.7 Распределенные волновые пакеты в экспериментах по сканирующей туннельной микроскопии и зависимость ширины псевдощели от уровня допирования	47
2.8 Определение ширины псевдощели в системах с неоднородным расположением ионов примесей.....	49
3 Свободная энергия двужидкостной системы носителей заряда и возможность единой природы трех фаз купратных сверхпроводников.....	55
3.1 Распределение носителей по автолокализованным и делокализованным состояниям в сильно взаимодействующих электрон-фононных системах с высокой плотностью носителей при $T > 0$	60

3.2 Изменение свободной энергии вследствие образования псевдощели.....	69
3.3 Вариация свободной энергии системы с допированной нижней зоной Хаббарда.....	73
3.4 Спектр возбуждений биполяронной жидкости и расчет температуры сверхпроводящего перехода.....	76
3.5 Фазовая диаграмма, плотность сверхтекучей компоненты и волновой вектор зарядового упорядочения	79
Заключение.....	85
Список литературы.....	87
Список публикаций автора.....	98
Приложение. Список сокращений	101

Введение

Актуальность темы. Одной из основных проблем, рассмотренных в данной работе, является проблема механизма спаривания носителей заряда в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП), которая актуальна уже 35 лет. Но лишь 6 лет назад руководителями наиболее мощных экспериментальных и теоретических групп мира, занимающихся исследованиями ВТСП, в журнале Nature было признано, что господствующей в литературе модели, учитывающей электронные корреляции в рамках t - J модели или модели Хаббарда, недостаточно для теоретического расчета температуры сверхпроводящего перехода в различных купратных системах, и не только по причине наличия в них одинаковых слоев CuO_2 при отличающейся в разы температуре перехода но, главным образом, из-за «отсутствия контролируемой математики, так как носители в этой модели и образуют пары, и являются «клеем» [1]. Возможно, пониманию этого факта способствовало открытие высокотемпературной сверхпроводимости ($T_c = 109$ К) в интерфейсе мономолекулярного слоя FeSe , эпитаксиально выращенного на подложке из SrTiO_3 [2 - 4]. В этой системе допирование электронное, а не дырочное, что идет в разрез с рядом теоретических результатов о необходимости именно дырочного допирования для ВТСП, симметрия параметра порядка не d -волновая, а s -волновая, форма поверхности Ферми исключает нестинг [5].

Описанные выше отличия свидетельствуют о необходимости либо «строить для каждого типа высокотемпературных сверхпроводников свою теорию, что не очень привлекательно» [5], либо учитывать, помимо электронных корреляций, электрон-фононное взаимодействие для адекватного описания механизма спаривания и свойств описанных выше систем [1, 6].

В литературе признано, что понять природу механизма спаривания носителей в ВТСП невозможно в отрыве от природы фаз нормального состояния, то есть фаз зарядового упорядочения и псевдощели. Проблема основного нормального состояния ВТСП существует примерно столько же

времени, сколько и проблема механизма спаривания носителей, и особенно явно проявляется в случае дырочно-допированных купратов, имеющих существенно более высокие температуры сверхпроводящего перехода. Это состояние демонстрирует ряд необъясненных свойств: псевдощель в спектре носителей заряда, открытую и при температурах выше температуры сверхпроводящего перехода, зарядовое упорядочение, период которого имеет различную зависимость от уровня допирования p в разных системах [7], наблюдаемую [8] в экспериментах по квантовым осцилляциям в магнитном поле перестройку поверхности Ферми с 6-кратным увеличением её объема при незначительном увеличении p и изменение знака постоянной Холла с изменением температуры.

Таким образом, механизм спаривания носителей в купратных ВТСП, а также природа необычных свойств их нормального состояния (псевдощель, зарядовое упорядочение, квантовый фазовый переход с перестройкой поверхности Ферми, изменение знака постоянной Холла с температурой), - несомненно, являются одними из **центральных проблем физики конденсированного состояния** [1, 7 - 9], в связи с чем их решение представляется **актуальным** и своевременным.

В литературе была построена [10] теория возникновения зарядового упорядочения в рамках подхода, в котором рассматривалось сильное дальнедействующее электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ), приводящее при высокой плотности носителей заряда к одновременному существованию автолокализованных (поляроны и биполяроны большого радиуса) и делокализованных (описывающихся волновой функцией Блоха) состояний носителей заряда. В этом подходе рассматривается биполяронный механизм спаривания, при котором носители заряда образуют связанное с полем поляризации кристаллической решетки состояние - биполярон. Однако, в рамках этой теории не проводился дальнейший анализ поведения делокализованных носителей в системах с сильным ЭФВ, а также не

рассматривался дырочно-подобный закон дисперсии носителей заряда, который имеет место в части 1-й зоны Бриллюэна в дырочно-допированных купратах.

Кроме того, хотя псевдощелевая фаза и фаза зарядового упорядочения в литературе обычно рассматриваются как соревнующиеся со сверхпроводящей, недавно появилось предположение [9] о связи природы трех этих фаз на основании сходства зависимости их критических температур от p . Для проверки этого предположения в рамках предлагаемого подхода, основанного на биполярном механизме спаривания, необходимо разработать метод расчета свободной энергии систем с двумя типами носителей: автолокализованных и делокализованных.

Цель работы - построить фазовую диаграмму и определить свойства нормального состояния систем с сильным электрон-фононным взаимодействием и высокой плотностью носителей заряда с дисперсией, характерной для купратных высокотемпературных сверхпроводников.

Для реализации поставленной цели в работе решаются следующие **задачи**:

- построить модель закона дисперсии, характерного для дырочно-допированных купратных ВТСП, вблизи поверхности Ферми и антинодального направления;
- определить стационарные состояния делокализованных носителей заряда в потенциале, создаваемом автолокализованными носителями в системах с сильным электрон-фононным взаимодействием;
- построить спектр фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением для носителей заряда, находящихся в дополнительном потенциале зарядового упорядочения и подчиняющихся характерному для купратов закону дисперсии, и сравнить его с экспериментальным спектром;
- рассчитать величины неоднородности потенциала, создаваемого автолокализованными носителями и ионами-допантами, и определить влияние

этой неоднородности на стационарные состояния делокализованных носителей;

- сравнить результаты расчета с зафиксированной экспериментально методом сканирующей туннельной спектроскопии величиной неоднородности ширины псевдощели по кристаллу и ее зависимостью от уровня допирования;

- получить спектр элементарных возбуждений жидкости биполяронов большого радиуса и определить температуру сверхпроводящего перехода, обусловленного конденсацией жидкости биполяронов большого радиуса с помощью стандартного метода теории Бозе-жидкости, как функции уровня допирования;

- построить фазовую диаграмму дырочно-допированных систем с сильным электрон-фононным взаимодействием, определить на ней положения областей, в которых наблюдается псевдощель, зарядовое упорядочение и положение сверхпроводящей фазы, а также сравнить их с экспериментальными данными для купратов.

Научная новизна результатов. Впервые

- предложена двухжидкостная модель, включающая жидкость биполяронов большого радиуса и Ферми-жидкость делокализованных носителей заряда, используемая для описания свойств высоко допированных систем с сильным электрон-фононным взаимодействием;

- развит метод решения уравнения Шрёдингера, подобный методу конечных элементов, для получения стационарных состояний делокализованных носителей, находящихся в потенциале автолокализованных носителей;

- получены стационарные состояния делокализованных носителей в потенциале автолокализованных, представляющие собой распределенные волновые пакеты, в которых импульс носителя различен в областях с различным потенциалом биполярной жидкости;

- развит метод построения траекторий распределенных волновых пакетов в импульсном пространстве, который позволил объяснить возникновение псевдощели в фотоэмиссионных и туннельных спектрах купратных сверхпроводников;

- развит метод построения области существования двухжидкостной фазы (сосуществующих биполярной и Ферми-жидкостей) на фазовой диаграмме в координатах: уровень допирования и температура, на основе минимизации свободной энергии системы с сильным электрон-фононным взаимодействием и высокой плотностью носителей заряда;

- получена температура сверхтекучего перехода в жидкости биполяронов большого радиуса и область существования сверхтекучей компоненты биполярной жидкости на фазовой диаграмме «уровень допирования-температура»;

- получена фазовая диаграмма в координатах допирование-температура систем с сильным электрон-фононным взаимодействием и высокой плотностью носителей заряда, которая демонстрирует псевдощелевую область, область зарядового упорядочения и область существования сверхтекучей компоненты биполярной жидкости, расположение которых на фазовой диаграмме совпадает с расположением аналогичных им фаз, наблюдаемых в купратных сверхпроводниках.

Теоретическая значимость. Предложена двухжидкостная модель проводящей плоскости купратов, основанная на биполярном механизме спаривания носителей заряда, которая позволила объяснить причины возникновения псевдощели и зарядового упорядочения в купратах, и рассчитать фазовую диаграмму «уровень допирования - температура» систем с сильным электрон-фононным взаимодействием, аналогичную экспериментальной фазовой диаграмме купратов. Предложенный подход позволил с единых позиций объяснить природу трех фаз на фазовой диаграмме купратов: псевдощелевой, зарядовоупорядоченной и сверхпроводящей, которая

до настоящего момента лишь предполагалась исследователями. Таким образом, полученные результаты вносят вклад в решение основных вопросов теории высокотемпературной сверхпроводимости.

Практическая значимость. ВТСП широко используются в качестве новых материалов для низкоуглеродной экономики, в частности, для получения сильных магнитных полей, а также при производстве кубитов для квантовых компьютеров. Предложенный подход позволил установить параметры системы, управляющие ее фазовой диаграммой «уровень допирования – температура», в частности, влияющие на температуру сверхпроводящего перехода. Таким образом, результаты исследований вносят вклад в разработку сверхпроводников с более высокими температурами перехода в сверхпроводящее состояние при атмосферном давлении, чем достигнутые к настоящему времени.

Основные положения, выносимые на защиту

1. В высокодопированных (с количеством дырок от 0.05 на элементарную ячейку) системах с сильным электрон-фононным взаимодействием стационарные состояния делокализованных носителей в дополнительном потенциале автолокализованных носителей представляют собой распределенные в пространстве волновые пакеты блоховских волн с различными импульсами в областях с различными значениями дополнительного потенциала.

2. При дырочно-подобной дисперсии носителей заряда распределенные волновые пакеты со средними импульсами вблизи антинодальных направлений не могут распространяться вследствие того, что действительные решения уравнения для импульса носителя в областях с большим дополнительным потенциалом притяжения не существуют. Отсутствие стационарных состояний со средними импульсами вблизи антинодальных направлений проявляется в спектрах фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением и сканирующей туннельной спектроскопии как псевдощель. Ширина

рассчитанной псевдощели, которая находится в интервале 0.04...0.07 эВ, а также ее зависимость от направления импульса и уровня допирования, согласуются с экспериментально установленными свойствами псевдощели в купратных сверхпроводниках.

3. Область на фазовой диаграмме высокодопированных сильновзаимодействующих электрон-фоонных систем в координатах «уровень допирования – температура», в которой наблюдается псевдощель, совпадает с областью существования биполярной жидкости, граница которой определяется равенством минимизированной по радиусу биполярона свободной энергии системы с биполярной жидкостью и свободной энергии системы без нее. Область на фазовой диаграмме, в которой наблюдается зарядовое упорядочение, меньше области существования биполярной жидкости, так как для наблюдения зарядового упорядочения требуется достаточное количество биполярных капель. Рассчитанное положение областей существования псевдощели и зарядового упорядочения на фазовой диаграмме совпадает с положением аналогичных фаз, наблюдаемых в купратах.

4. Область на фазовой диаграмме высокодопированных сильновзаимодействующих электрон-фоонных систем в координатах «уровень допирования – температура», в которой существует сверхтекучая компонента биполярной жидкости, определенная на основе плотности биполярной жидкости и спектра ее элементарных возбуждений, совпадает с положением сверхпроводящей фазы на фазовой диаграмме купратов, построенной в ходе эксперимента. Рассчитанная плотность сверхтекучей компоненты биполярной жидкости в области допирования выше оптимального (с количеством дырок на атом меди, бóльшим 0.15) уменьшается с ростом допирования, в согласии с экспериментами на купратах.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на Международной конференции «Современные методы и проблемы теории операторов и гармонического анализа и их приложения - IX»

(«Modern Methods, Problems and Applications of Operator Theory and Harmonic Analysis - IX», «ОТНА-2019», 2019, Ростов-на-Дону); Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2021» (2021, Москва (онлайн)); XVII Ежегодной молодежной научной конференции «Наука и технологии Юга России» (2021, Ростов-на-Дону); на международных конференциях «7th International Workshop on Numerical Modelling of High Temperature Superconductors» (2021, г. Нанси, Франция (онлайн)); «7th International Conference on Superconductivity and Magnetism» (2021, Милас-Бодрум, Турция (онлайн)); «International Workshop on Synchrotron and Neutron Radiation» («IWSN-2021», 2021, Ростов-на-Дону (онлайн)); а также на XVIII Ежегодной молодежной научной конференции «Наука Юга России: достижения и перспективы» (2022, Ростов-на-Дону) и Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2022» (2022, Москва (онлайн)).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 2 статьях в международных научных журналах, индексируемых в базе данных Scopus, и в 1 статье в журнале, входящем в перечень ВАК, а также в тезисах 7 докладов в сборниках трудов конференций различного уровня. Список основных публикаций автора по теме диссертации, снабженных литерой А приведен в конце диссертации.

1 Системы с сильным электрон-фононным взаимодействием на примере купратных высокотемпературных сверхпроводников (*обзор литературы*)

35 лет исследований ВТСП привели к гигантскому прогрессу в экспериментальных методиках и разрешающей способности оборудования, обнаружению многих уникальных свойств сверхпроводящих купратов, открытию сверхпроводимости в ряде новых типов материалов, в том числе интерфейсной сверхпроводимости, но не к пониманию механизма спаривания носителей в этих системах и природы иных характерных фаз купратов на фазовой диаграмме «допирование - температура» [1]. Не удалось пока объяснить и сильно различную температуру сверхпроводящего перехода в различных купратах, как и механизм спаривания носителей в недавно открытом интерфейсном высокотемпературном сверхпроводнике [5]. В качестве одного из возможных способов преодоления этой проблемы в литературе указывается необходимость учета не только корреляции носителей в ВТСП-материалах, но и их взаимодействия с кристаллической решеткой [1]. Именно оно и призвано внести в теорию зависимость свойств системы, включая температуру перехода в сверхпроводящее состояние, от структуры материала [15], которая весьма существенна в купратах, достаточно упомянуть изменение критической температуры с ростом числа медь-кислородных слоев в элементарной ячейке близких по составу купратов.

В качестве признаков сильного ЭФВ в купратах выделяют сильное смягчение оптических фононных мод с волновыми векторами вблизи волнового вектора зарядового упорядочения [16, 17] (теория этого эффекта развита в работе [10]) и широкие полосы в оптических спектрах и спектрах фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением [18 - 21]. Недавно для демонстрации важной роли ЭФВ в ВТСП-материалах были разработаны новые экспериментальные техники [6, 22, 23].

Мы вначале сосредоточимся на результатах экспериментальных исследований купратных ВТСП в последние 10 лет, где, прежде всего, кратко

опишем результаты нескольких недавних экспериментальных работ. Затем обсудим теоретические подходы и результаты последних лет.

1.1 *Сравнение фазовых диаграмм различных купратных сверхпроводников* привело авторов недавней статьи [9] к выводу, что совсем необязательно полагать, что фазы, которые имеют место в области допирования, соответствующего ВТСП, а именно, псевдощелевая фаза и фаза зарядового упорядочения, конкурируют со сверхпроводящей фазой. На основании сходства зависимости критических температур этих трех фаз от уровня допирования авторы работы делают предположение, что они имеют общую природу. В русле такого подхода лежит предлагаемое здесь исследование.

1.2 *Связь смещений ионов из положений равновесия в волне зарядовой плотности с d -волновой симметрией электронной плотности в плоскости проводимости.* В работе [24] методом дифракции нерезонансного рентгеновского излучения с анализом максимально возможного числа рефлексов были экспериментально определены смещения ионов кристаллической решетки купратов в фазе волны зарядовой плотности (ВЗП). В результате авторы обнаружили, что d -волновая симметрия электронной структуры, наблюдаемая в фазе зарядового упорядочения (ЗУ), обусловлена смещением ионов при формировании ВЗП по соответствующим нормальным координатам, согласующимся с экспериментально зафиксированным смягчением фононов в области волнового вектора ЗУ. А именно, два атома кислорода из плоскости проводимости смещаются перпендикулярно ей в том же направлении, что и атом меди, а два других атома кислорода - в противоположном направлении. Смещение вдоль c -оси ионов кислорода относительно ионов иттрия изменяют их локальное допирование, что приводит к d -волновой симметрии зарядовой плотности на кислороде, наблюдаемой в купратах экспериментально.

1.3 *Спектр возбуждений ВЗП.* Экспериментальные работы [25 - 27] имели своей целью наблюдение и исследование элементарных возбуждений ВЗП [25] и Бозе-жидкости, конденсация которой является сверхпроводящим переходом. В работе [25] указывалось, что спектр возбуждений ВЗП вследствие ее несоразмерности должен включать амплитудонную и фазонную (без щели при нулевом волновом векторе) ветви. Однако малая длина когерентности ЗУ в купратах, которую можно рассматривать как наличие дефектов, позволяет предположить возможность наличия щели в фазонном спектре [28, 29]. В работе [26] удалось наблюдать элементарные возбуждения ВЗП, возникающие при понижении температуры до температуры возникновения ЗУ, которые мы интерпретируем как элементарные возбуждения биполярной жидкости, и определить их энергию при волновом векторе, равном волновому вектору ЗУ. В работе [27] величина энергии элементарных возбуждений при нулевом волновом векторе была определена методом оптической спектроскопии с разрешением во времени (*time-domain optical spectroscopy*). Величина энергии элементарных возбуждений будет использована при выполнении настоящей работы для определения температуры Бозе-конденсации биполярной жидкости стандартным методом теории Бозе-жидкости [13].

1.4. *Частота квантовых осцилляций* экспериментально наблюдаемых характеристик купратов при изменении напряженности магнитного поля свидетельствуют о перестройке поверхности Ферми в дырочно-допированных ВТСП при росте допирования выше некоторого критического от малых электронных карманов к большой дырочной поверхности Ферми [8, 30]. В рамках предлагаемого подхода такой квантовый фазовый переход возникает естественным образом вследствие отсутствия делокализованных дырок при низкой температуре и допировании меньше критического, по величине совпадающего с наблюдаемым на эксперименте.

1.5 Эксперименты показали *увеличение холловской плотности* носителей в купратах с повышением температуры от значения, пропорционального допированию p до значения, пропорционального $1 + p$ [8, 14]. Такое необычное поведение понятно в рамках предлагаемого подхода: при низкой температуре и допировании меньше критического, описанного в предыдущем пункте, отсутствуют делокализованные дырки. Когда же они появляются с ростом температуры или при допировании выше критического, то в процессах переноса могут участвовать и дырки из верхней половины зоны проводимости (незаполненные электронами из-за зарядовых корреляций состояния в нижней зоне Хаббарда). Необычное поведение в купратах демонстрируют также зависимости постоянных Зеебека и Нернста от температуры при различных уровнях допирования [31, 32]. Необходимо отметить, что и ранее в литературе указывалось на необходимость использования двухкомпонентных моделей для описания экспериментального поведения постоянной Холла в зависимости от температуры и уровня допирования [33, 34], однако природа этих компонент была иной по сравнению с рассматриваемой в предлагаемом подходе. Вторая особенность температурного поведения коэффициента Холла в дырочно-допированных купратах – смена знака при понижении температуры [8, 14].

1.6 Метод фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) совершил громадный прорыв в разрешающей способности именно в связи с исследованием допированных купратных ВТСП. В результате было обнаружено кардинальное отличие спектров ARPES купратов в так называемом нодальном направлении (вдоль диагонали в 1-й зоне Бриллюэна) и антинодальном [35] (вдоль осей k_x и k_y). Так называемые кинки (изломы) в дисперсии в нодальном направлении были признаны следствием сильного ЭФВ [36]. Области «вертикальной дисперсии» или «водопады», наблюдаемые в нодальном направлении универсально в электронно- и дырочно-допированных и недопированных купратах [37 - 40, 87], нам удалось интерпретировать в рамках модели с сильным фрёлиховским ЭФВ [21] как следствие различной

энергетической стоимости релаксации после фотоэмиссии из автолокализованных и делокализованных состояний носителей, которые при высокой плотности делят импульсное пространство в соответствии с принципом Паули. В рамках этого подхода удалось рассчитать положение и ширину полос в спектре ARPES и волновой вектор аномалии («водопада») [21], используя как входные данные статическую и высокочастотную диэлектрическую проницаемости купратов (из оптических спектров) и эффективную массу носителей вблизи экстремумов закона дисперсии, рассчитанную по результатам t -J модели [41].

В антинодальном направлении спектры ARPES купратов демонстрируют в нормальном состоянии так называемую псевдощель, то есть отсутствие спектрального веса под поверхностью Ферми [42 - 44], ширина которой слабо зависит от допирования и составляет около 0.05 эВ (в некоторых работах отмечается вариация ширины псевдощели в разных областях одного и того же образца [45]). Помимо отсутствия спектрального веса под поверхностью Ферми при температурах низких, но, в том числе, превосходящих температуру сверхпроводящего перехода, эксперименты показывают гигантское уширение полосы в спектре, что обычно свидетельствует о сильном ЭФВ. Для объяснения природы псевдощелевой фазы была вначале использована модель ВЗП, однако она оказалась в противоречии с экспериментальными результатами, полученными методом ARPES [42, 43], в частности, с особенностью спектра, названной нарушением симметрии частица-дырка. В 2014 году была предложена альтернативная модель волны плотности пар [46], которая также имеет важное противоречие с наблюдаемыми свойствами купратов (на которую честно указывает ее автор и другие исследователи [46, 47]): в ней антинодальные носители образуют пары с энергией связи, равной ширине псевдощели, и не объясняется, почему не возникает сверхпроводимость при соответствующих такой энергии связи сверхвысоких температурах. В рамках рассматриваемого в диссертации подхода псевдощель возникает в результате изменения стационарных состояний делокализованных носителей в

потенциале, создаваемом автолокализованными носителями (зарядовым упорядочением), и топологии дырочно-подобного закона дисперсии дырочно-допированных купратов вблизи поверхности Ферми [A1].

1.7 Количественные исследования зарядового упорядочения.

Использование методов сканирующей туннельной микроскопии и резонансного рассеяния рентгеновского излучения дало возможность в последние 8 лет количественно исследовать ЗУ в допированных купратах, о наличии которого сообщалось давно (ему даже была посвящена конференция *Stripes2020* в Риме, собравшая ведущих ученых в области ВТСП). Результаты количественного исследования оказались несогласующимися со свойствами обычной ВЗП, поэтому был введен термин необычной ВЗП (unconventional CDW) и поставлена задача найти ее «движущую силу» [7]. В частности, зависимость волнового вектора (то есть периода) ЗУ от допирования в разных купратах сильно различна, при том, что все они имеют одинаковые проводящие медькислородные плоскости. Объяснить эту зависимость, а также рассчитать ее количественно в согласии с экспериментом по тем же значениям статической и высокочастотной диэлектрической проницаемости из оптических спектров и эффективной массы носителей вблизи экстремумов закона дисперсии из t - J модели, удалось в рамках модели с сильным фрëлиховским ЭФВ [10]. Это потребовало разработки метода расчета параметров основного нормального состояния сжимаемой биполяронной жидкости, сосуществующей с делокализованными носителями. Также метод резонансного рассеяния рентгеновских лучей позволил исследовать, какими состояниями носителя внутри элементарной ячейки образовано ЗУ. Было обнаружено, что вытянутые вдоль оси x и вдоль оси y sp -гибридизованные волновые функции носителей чередуются в зарядовом упорядочении в противофазе, то есть соседние максимумы в ВЗП образованы носителями с развернутыми на 90 градусов волновыми функциями [7].

1.8 *Отличие симметрии волновой функции пары, типа допирования и вида поверхности Ферми высокотемпературных купратных и интерфейсного сверхпроводников.* Высокотемпературная сверхпроводимость в новом классе материалов – пниктидах – была открыта в 2008 году [49]. Однако, до обнаружения высокотемпературной сверхпроводимости в интерфейсе – мономолекулярный слой FeSeSrTiO_3 – сверхпроводимость пниктидов практически не рассматривали в связи со сверхпроводимостью купратов из-за существенных отличий этих систем. Достаточно упомянуть, что родительские соединения пниктидных сверхпроводников являются металлами, в отличие от родительских соединений купратных сверхпроводников – изоляторов, наличие электронных корреляций в пниктидах – дискуссионный вопрос, в отличие от купратов, симметрия параметра порядка в купратах d -волновая, а в пниктидах – s' -волновая [50]. Интерфейсная высокотемпературная сверхпроводимость, как было обнаружено в 2014 году, возникает при температуре ниже 109 К в мономолекулярном слое селенида железа, относящегося к классу сверхпроводников-пниктидов, выращенном эпитаксиально на подложке из титаната стронция [2 - 5]. Найти эту систему помогло обнаружение корреляции температуры сверхпроводящего перехода в монослое FeSe с величиной механического напряжения, возникающем при эпитаксиальном росте на подложке с отличающимся размером элементарной ячейки. Однако тот факт, что максимальную температуру перехода демонстрирует система с подложкой, известной как материал с сильным ЭФВ, обращает на себя внимание. Открытие и исследование основных свойств интерфейсной сверхпроводимости сразу показало ее отличия от свойств купратов с наиболее высокой температурой перехода. Так, это система с электронным, а не дырочным допированием, волновая функция конденсата имеет s -волновую симметрию в отличие от d -волны в купратах, поверхность Ферми простая сферическая в отличие от купратов [5]. В связи с этим в литературе ставится вопрос – «или каждый член семейства высокотемпературных сверхпроводников имеет свою собственную теорию или мы должны переосмыслить основы теории в купратах» [5]. Этому

последнему варианту и посвящена, в частности, настоящая работа, тем более что ряд экспериментальных исследований [6, 51 - 54] подтверждает роль ЭФВ в повышении температуры сверхпроводящего перехода интерфейсного высокотемпературного сверхпроводника. Так, обзор [54], посвященный анализу вкладов различных факторов в повышение температуры сверхпроводящего перехода в интерфейсном ВТСП 1UCFeSe/SrTiO_3 по результатам экспериментальных исследований систем без титаната стронция (хлопья FeSe, пленки FeSe на графене и др.) указывает, что в этих системах также возникает сверхпроводимость при температурах до 40 К, но высокие температуры перехода получаются только при использовании титаната стронция в качестве подложки. В литературе указываются три возможных способа модификации состояния интерфейса – деформация напряжений, перенос заряда и ЭФВ, которые могут действовать и одновременно.

1.9 При описании теоретических исследований ВТСП мы остановимся на *реализации в литературе различных вариантов учета электрон-фононного взаимодействия*. Необходимо отметить существование двух типов ЭФВ – дальнего действующего (фрёлыховского), по природе кулоновского и потому характерного для ионных кристаллических решеток, и короткодействующего (холстейновского), связанного с деформационным потенциалом. Сильное ЭФВ обоих типов приводит к образованию автолокализованных состояний носителей заряда (поляронов и биполяронов), но в первом случае их радиус много больше постоянной решетки, а во втором – меньше ее.

Учет дальнего действующего ЭФВ в сильнокоррелированных системах представляет особую сложность ввиду противоречия двух приближений, используемых при описании систем с сильными электронными корреляциями (узельное приближение) и с сильным дальнедействующим ЭФВ (континуальное приближение). Поэтому больше развивался в литературе подход с учетом холстейновского взаимодействия. Первым его успехом был расчет спектров ARPES, которые демонстрируют широкие полосы в согласии с

экспериментом [19, 20]. Тогда же мы показали, что широкие полосы также возникают в спектрах ARPES и в оптических спектрах систем с сильным фрёлиховским ЭФВ [55, 56]. Среди новых успехов подхода с учетом сильного холстейновского ЭФВ и сильных электронных корреляций необходимо отметить результаты, полученные при использовании кластерного приближения в рамках обобщенного метода сильной связи [57, 58], которое позволило получить широкие полосы в спектре ARPES. Подобные полосы для таких систем были рассчитаны и квантовым методом Монте-Карло [10], но он имеет ограничения, связанные с проблемой знака при построении аналитического продолжения, которых нет в обобщенном методе сильной связи.

Указанные выше проблемы не позволили рассмотреть квантовым методом Монте-Карло системы с высокой плотностью носителей и сильным фрёлиховским взаимодействием, которым посвящена настоящая работа. Удалось применить этот метод лишь для систем с высокой плотностью носителей и холстейновским ЭФВ [59 - 61]. Однако, поляроны и биполяроны малого радиуса, образующиеся при сильном холстейновском ЭФВ, имеют радиус меньше постоянной решетки, и поэтому не сосуществуют с делокализованными носителями. Подвижность же самих биполяронов малого радиуса весьма низкая [62], и они, по-видимому, не могут обусловить наблюдаемые в купратах значения проводимости.

Описанные выше обстоятельства заставили группу авторов под руководством А. Александрова, исследовавших биполярный механизм спаривания на основе биполяронов малого радиуса, сделать попытку описать «мобильный малый биполарон» [63], у которого носители локализованы в области порядка постоянной решетки, а поляризация простирается на гораздо более обширную область. Такой подход позволяет использовать узельное описание для носителей заряда в биполяроне, удобное для учета их спиновых корреляций, но содержит внутренне противоречие: если локализация носителей обусловлена поляризационной потенциальной ямой, то ее размер и определяет

область локализации, если же локализация обусловлена не полем поляризации, а деформационным потенциалом, то область локализации носителей порядка одной элементарной ячейки, но подвижность такого состояния, как у обычного полярона малого радиуса, крайне мала.

Необходимо также отметить, что одно из отличий предлагаемого подхода от остальных попыток учесть ЭФВ, для которых характерен одночастичный подход (энергия связи и размеры биполярона не зависят от их плотности, также независимыми от плотности получаются и проявления их распада при оптическом поглощении или фотомиссии) - в исследовании систем биполяронов и делокализованных носителей с использованием функции распределения носителей по состояниям обоих типов.

Таким образом, одно из отличий подхода с учетом дальнедействующего ЭФВ заключается в возможности сосуществования автолокализованных и делокализованных носителей заряда при их высокой плотности [64, 65, 10]. Исследование деления между ними импульсного пространства позволило (при учете различного пути релаксации системы после фотовозбуждения носителя из этих различных состояний) объяснить наличие «вертикальной дисперсии» в фотоэмиссионных спектрах купратов [21]. Недавно методом, развитым для жидкого гелия [13], были получены выражения для спектра элементарных возбуждений и времени релаксации жидкости биполяронов большого радиуса [66], которые будут (после небольшого исправления) использованы при расчете фазовой диаграммы в данной работе.

В настоящее время несколько групп разрабатывают подходы к учету ЭФВ в ВТСП-материалах. Подход с помощью квантового метода Монте-Карло (группа А. С. Мищенко, Н. Н. Прокофьева и Б. М. Свистунова), как обсуждалось выше, позволяет рассматривать системы с высокой плотностью носителей только в случае холстейновского ЭФВ, то есть поляронов малого радиуса, которые дают крайне малую проводимость, не согласующуюся с экспериментальными данными о проводимости купратов и интерфейсных систем. Проблема знака препятствует рассмотрению систем с высокой

плотностью носителей и фрёлиховским сильным ЭФВ квантовым методом Монте-Карло. Группа С. Г. Овчинникова, развивающая обобщенный метод сильной связи с использованием кластерного приближения, также рассматривает холстейновское ЭФВ, приводящее к образованию поляронов малого радиуса.

Группа А. С. Александрова также развивала на протяжении долгого времени подход к ЭФВ в купратах, используя модель поляронов и биполяронов малого радиуса, но в последнее время снизила активность. Как указывалось выше, крайне малая подвижность поляронов и биполяронов малого радиуса и невозможность их сосуществования с делокализованными носителями является основным противоречием такого подхода и экспериментальных данных о высокотемпературных сверхпроводниках. Исследованием поляронов и биполяронов большого радиуса сильной связи в связи с проблемой ВТСП активно занимается, также на протяжении долгого времени, американский ученый Д. Эмин (D. Emin). Он получил спектр элементарных возбуждений биполярной жидкости, который будет использован в работе, и время релаксации биполяронов большого радиуса [66]. Основное отличие его подхода от нашего – мы рассматриваем сосуществование автолокализованных и делокализованных носителей, в то время как в походе Эмина рассматривается малая концентрация носителей, недостаточная для появления делокализованных носителей заряда и зависимости радиуса биполарона от уровня допирования.

Теоретическое описание интерфейсных сверхпроводников, в отличие от экспериментальных исследований, находится пока в зачаточном состоянии. Первоначально выдвигалась идея о реализации в интерфейсном (правда, низкотемпературном) сверхпроводнике $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ фазы поляронного металла [61], но впоследствии эта группа отказалась от такой трактовки [67]. Однако, интерес к ЭФВ в интерфейсах приводит к появлению теоретических работ. Так, в работе [53] рассчитана эффективная масса поверхностного поларона в интерфейсе $\text{FeSe}/\text{SrTiO}_3$.

2 Стационарные состояния делокализованных носителей заряда и ширина псевдощели в системах с сильным электрон-фононным взаимодействием и дисперсией, подобной дисперсии купратов

Как отмечалось выше, выяснение причин возникновения псевдощели в дырочно-допированных купратах представляет собой одну из центральных задач физики ВТСП. Термином «псевдощель» обычно обозначают отсутствие состояний носителей заряда с импульсами вблизи точек $(0, \pm\pi)$, $(\pm\pi, 0)$ (так называемых антинодов) в первой зоне Бриллюэна вблизи поверхности Ферми. Псевдощель наблюдается при температурах до T^* , которая выше температуры сверхпроводящего перехода. Сверхпроводящий переход в купратах – это переход к состоянию, демонстрирующему сверхпроводимость, из псевдощелевого состояния, проявляющего весьма необычные свойства [1], поэтому разгадка природы псевдощели необходима для понимания основного нормального состояния купратов и может помочь объяснить механизм спаривания в них.

Зарядовое упорядочение с малой длиной когерентности является хорошо известным явлением в купратах [7]. В сильно-взаимодействующих электрон-фононных системах ЗУ образовано биполяронами большого радиуса, оно зависит от уровня допирования и определяет период ЗУ [10]. В этом разделе мы рассматриваем, как потенциал, создаваемый биполяронами, влияет на делокализованные носители заряда, и как это приводит к образованию псевдощели в системах с купратоподобной дисперсией. Затем мы изучим возникновение пространственной неоднородности ширины псевдощели при учете распределения ионов примесей [68] и сравним результаты расчета с экспериментальными данными. Будет показано, что в настоящем подходе ширина псевдощели совпадает с амплитудой потенциала, дополнительного к потенциалу решетки. Таким образом, ширина псевдощели приобретает пространственную зависимость в присутствии неоднородно распределенных ионов-допантов. В результате мы покажем, что предлагаемая модель

возникновения псевдощели в купратах имеет все характерные особенности, которые демонстрирует [42, 43] псевдощель не только в экспериментах ARPES, но также в экспериментах [68, 69] по сканирующей туннельной микроскопии.

2.1 Потенциал, создаваемый зарядовым упорядочением

С учетом двумерного характера электронной дисперсии в купратах, где проводимость возникает в проводящих слоях CuO_2 и пренебрежимо мала в направлении, перпендикулярном этим плоскостям, в нашей работе [A1] был разработан метод для получения стационарных состояний делокализованных электронов в потенциале, создаваемом биполяронами. Как было обнаружено экспериментально [48], плотность заряда на проводящих плоскостях CuO_2 купратов в фазе ЗУ можно представить следующим образом:

$$\rho = \rho_0 (\cos(K_{COx}x) + \cos(K_{COy}y)), \quad (2.1)$$

где K_{CO} – волновой вектор ЗУ, $K_{COx} = K_{COy} = 2\pi/C$, C – период ЗУ вдоль оси x или y , который в настоящем подходе совпадает с диаметром биполярона в этих направлениях [42]. Вместе с известным полным зарядом биполярона $2e/\varepsilon_0$ [70], где ε_0 – статическая диэлектрическая постоянная, можно рассчитать амплитуду ρ_0 зарядовой плотности в проводящей плоскости, которая определяется из условия равенства интеграла от выражения (2.1), взятого по объему биполярона, полному заряду биполярона $2e/\varepsilon_0$. В случае дырочного допирования сечения биполярона проводящей плоскостью можно приближенно считать ромбами с углами 90° и диагоналями C вдоль осей x и y как для электронных, так и для дырочных биполяронов [10].

В направлении, перпендикулярном проводящей плоскости, заряд считается распределенным равномерно в пределах слоя высотой $h_1 + h_2$, (где h_1 и h_2 определяются расстояниями между проводящими слоями; может быть $h_1 \neq h_2$, особенно в случае нескольких проводящих слоев в элементарной ячейке). Естественно считать потенциальную энергию биполяронов также периодической функцией с тем же периодом, что и ЗУ, и с малой длиной когерентности. Ниже мы рассмотрим два таких потенциала ЗУ (мы будем

использовать термин «потенциал» в значении потенциальной энергии в тех местах, где знак не имеет значения). Первый вид потенциала пропорционален гармонической функции, подобной (2.1). Для обеспечения постепенного увеличения значения потенциала при входе носителя с координатой $x = 0$ в область с ЗУ фаза потенциала сдвинута на $-C/4$:

$$U = \frac{U_0}{2} \left(\sin(K_{Cox}x) + \sin(K_{Coxy}y) \right) = \frac{U_0}{2} \left(\sin\left(\frac{2\pi x}{C}\right) + \sin\left(\frac{2\pi y}{C}\right) \right), \quad (2.2)$$

где U_0 – амплитуда потенциала, которая будет вычислена ниже. Для демонстрации того, что форма потенциала не влияет на ширину псевдощели, мы также рассчитали ее для другого вида потенциала ЗУ:

$$U = \frac{U_0}{2} \left(\text{sign}(\sin(K_{Cox}x)) |\sin(K_{Cox}x)|^{\frac{1}{4}} + \text{sign}(\sin(K_{Coxy}y)) |\sin(K_{Coxy}y)|^{\frac{1}{4}} \right). \quad (2.3)$$

На рисунке 2.1 показан вид обоих потенциалов (2.2) и (2.3). Мы обнаружили, что периодичность ЗУ необязательна: при использовании потенциала ЗУ с нарушенной периодичностью была получена псевдощель с такими же характеристиками, как и при расчетах с периодическим потенциалом. Используемая длина когерентности была такой же, как в экспериментах по купратам.

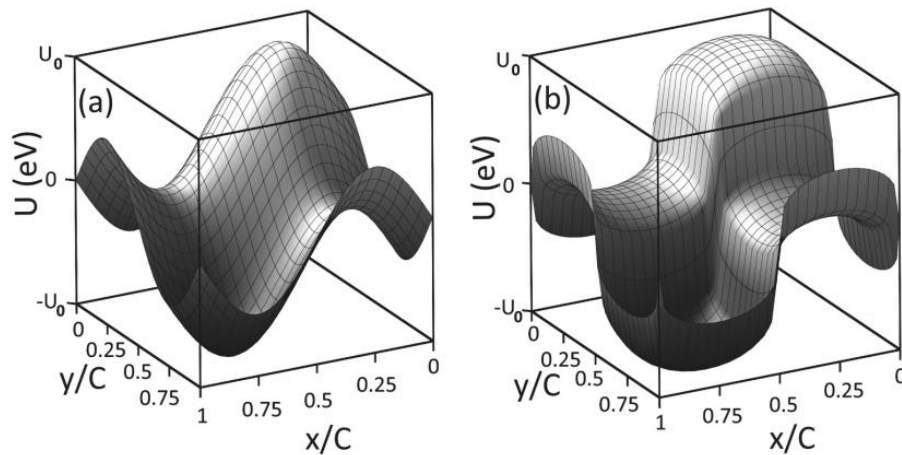


Рисунок 2.1 - (a) и (b) Потенциал ЗУ, заданный равенствами (2.2) и (2.3), соответственно.

Можно легко найти амплитуду потенциальной энергии носителя в потенциале ЗУ, так как ее значение в точках минимума и максимума

потенциала, созданного распределением заряда (2.1), имеет вид (в цилиндрических координатах):

$$U_0 = e \sum_{j=0}^{n-1} \int_{-h_{1,j}}^{h_{2,j}} \int_0^{r_0} \int_0^{2\pi} \frac{(-1)^j 2\pi p r dr dz}{\sqrt{r^2 + (z_{0j} + z)^2}}, \quad (2.4)$$

где n – это удвоенное число проводящих плоскостей CuO_2 в элементарной ячейке (как показывает расчет, только ближайшие плоскости CuO_2 влияют на амплитуду потенциала), z_{0j} – расстояние от нулевой плоскости, где находится носитель, до j -ой плоскости, r_0 выбирается достаточно большим, чтобы его величина не оказывала влияния на U_0 . Также используется тот факт, что чередование знака заряда в соседних плоскостях CuO_2 , расположенных по вертикали, является энергетически выгодным. Очевидно, что значение U_0 , посчитанное согласно выражениям (2.1) и (2.4), зависит от K_{CO} , и, следовательно, от p , поскольку K_{CO} в купратах зависит от допирования [7]. В подразделе 2.7 будет показано, что амплитуда потенциальной энергии носителя U_0 совпадает с шириной псевдощели, там же будет получена зависимость последней от уровня допирования. Пространственное изменение U_0 , вызванное учетом неоднородного расположения ионов-допантов на плоскостях-резервуарах заряда, будет рассмотрено в подразделе 2.8.

2.2 Стационарные состояния делокализованных носителей в потенциале зарядового упорядочения

Чтобы понять, как потенциал, создаваемый автолокализованными носителями, преобразует состояния делокализованных носителей, необходимо решить уравнение Шрёдингера (УШ) с дополнительным потенциалом, создаваемым биполяронами. Для решения такого УШ в настоящей работе разработан метод [11], подобный методу конечных элементов. Поскольку у носителей вблизи антинода одна из проекций волнового вектора на проводящую плоскость намного больше другой, ниже мы рассмотрим состояния с $k_x \gg k_y$. Рассмотрим вначале более простой случай и

пренебрежем изменением потенциала ЗУ вдоль направления Y , а затем перейдём к рассмотрению потенциала ЗУ, зависящего от двух переменных x и y . Разобьём проводящую плоскость на $N = N_p N_l + 1$ равных полос, параллельных оси Y , где N_p – это число периодов ЗУ в рассматриваемой области кристалла, а N_l – число полос в одном периоде, и усредним биполярный потенциал (2) по периоду ЗУ вдоль оси Y в каждом -ом слое:

$$U_j = \frac{1}{2R_{bip}} \int_0^{2R_{bip}} U(x_j, y) dy = U_0 \sin(K_{COx} x_j). \quad (2.5)$$

Здесь U_0 – амплитуда усредненного потенциала. Применяя эту же процедуру для потенциала (2.3), получим

$$U_j = U_0 \text{sign}(\sin(K_{COx} x_j)) |\sin(K_{COx} x_j)|^{\frac{1}{4}}. \quad (2.6)$$

Величину U_j будем считать постоянной в пределах каждой полосы (U_j мал по сравнению с шириной нижней зоны Хаббарда и с шириной запрещенной зоны). Ширина полосы $s = \frac{c}{N_l}$ выбрана таким образом, чтобы потенциал можно было считать постоянным в пределах каждой полосы. Ее величина может быть достаточно большой. Она может совпадать (рисунок 2.1, b) с радиусом биполярона.

Для каждой j -ой полосы мы будем искать решение Ψ_j УШ для стационарных состояний носителя в периодическом поле кристалла V и дополнительном потенциале U_j :

$$\left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V + U_j \right) \Psi_j = E(\mathbf{k}_0) \Psi_j,$$

где $\mathbf{k}_0$ – модуль волнового вектора носителя в пределах полосы с нулевым значением потенциала ЗУ, полная энергия E зависит от $\mathbf{k}_0$ и не зависит от номера полосы j . Мы будем искать решение Ψ_j как разложение по волновым функциям Блоха $\psi_{\mathbf{k}}$ в нижней зоне Хаббарда: $\Psi_j = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k},j} \psi_{\mathbf{k}}$. Используя УШ для блоховской волновой функции

$$\left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V\right) \psi_{\mathbf{k}} = \varepsilon(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}},$$

получим

$$\sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon(\mathbf{k}) + U_j - E(\mathbf{k}_0)) C_{\mathbf{k},j} \psi_{\mathbf{k}} = 0,$$

где $\varepsilon(\mathbf{k})$ - дисперсия блоховского электрона. Поскольку границы между слоями с постоянным потенциалом параллельны оси Y , проекция на эту ось волнового вектора k_y сохраняется на каждой границе и, следовательно, является постоянной:

$$k_{j,y} = k_j \sin(\alpha_j) = k_0 \sin(\alpha_0), \quad (2.7)$$

где k_j, α_j - это модуль волнового вектора и угол между ним и осью X для носителя, находящегося в j -ом слое с потенциалом $3U_j$ (рисунок 2.2, а), α_0 - угол между направлением волнового вектора и осью X для носителя в слое с нулевым потенциалом $3U$.

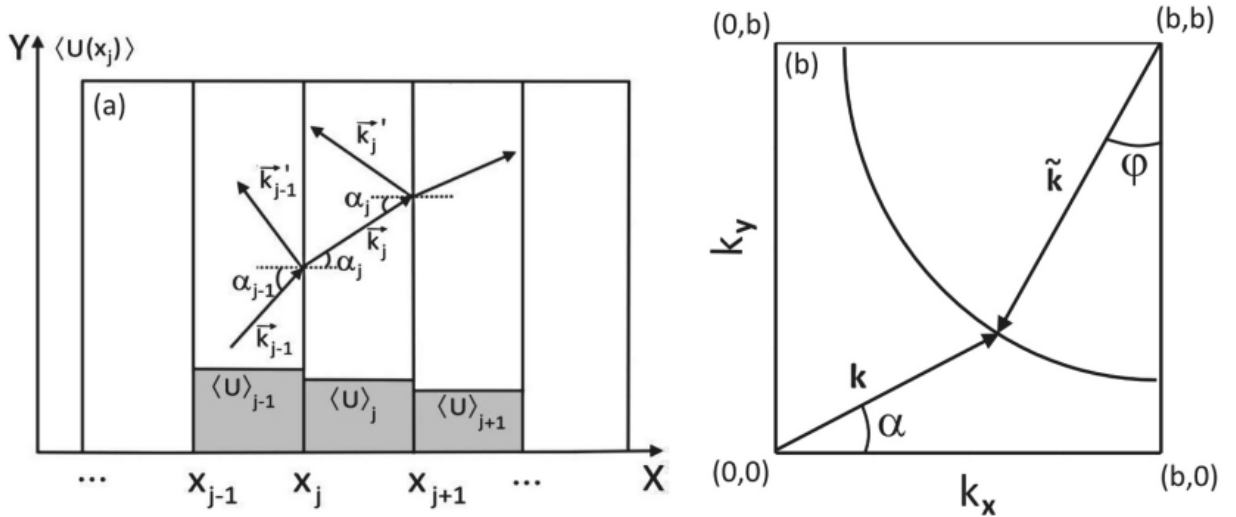


Рисунок 2.2 - (а) Волновые векторы падающей и отраженной электронных волн в двух соседних слоях с потенциалом, постоянным в каждом слое; (б) геометрическая иллюстрация соотношения между вектором $\mathbf{k}$ и углом α и между $\tilde{\mathbf{k}}$ и углом φ ; кривая, имеющая форму четверти окружности – поверхность постоянной энергии E , характерная для купратоподобной

дисперсии, $b = \frac{\pi}{a}$, a – постоянная решетки.

Так как симметрия пространства импульсов совпадает с симметрией координатного пространства, в рассматриваемом случае коэффициенты $C_{\mathbf{k},j}$ отличны от нуля только при $k_j = (k_{j,x}, k_{j,y})$ и при $k_j' = (-k_{j,x}, k_{j,y})$ (см. рисунок 2.2, а), где $k_{j,y}$ определяются из условия (2.7), а $k_{j,x}$ удовлетворяет уравнению

$$\varepsilon(\mathbf{k}_j) = \varepsilon(\mathbf{k}_j') = E(\mathbf{k}_0) - U_j. \quad (2.8)$$

Таким образом, решение УШ имеет вид $\Psi_j = C_{k_j} \Psi_{k_j} + C_{k_j'} \Psi_{k_j'}$, где коэффициенты C_{k_j} и $C_{k_j'}$ определяются стандартными граничными условиями, связывающими волновые функции носителя в соседних слоях:

$$\begin{cases} \Psi_{j-1}(x_j, y_j) = \Psi_j(x_j, y_j) \\ \left. \frac{\partial \Psi_{j-1}}{\partial x} \right|_{x_j, y_j} = \left. \frac{\partial \Psi_j}{\partial x} \right|_{x_j, y_j} \end{cases}, \quad (2.9)$$

где $x_j = x_{j-1} + s$, $y_j = y_{j-1} + s * \operatorname{tg}(\alpha_j)$, $\operatorname{tg}(\alpha_j) = \frac{k_{j,x}}{k_{j,y}}$. Как видно из (2.8), в слоях с нулевым потенциалом ЗУ $E(\mathbf{k}_0) = \varepsilon(\mathbf{k}_0)$, так что $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}_0'$ - это квазиимпульсы новой квазичастицы в таких слоях.

Таким образом, полученное стационарное состояние носителя в дополнительном потенциале ЗУ имеет различные квазиимпульсы в областях с различным потенциалом ЗУ: несмотря на то, что проекция импульса на ось Y сохраняется на границах слоёв с постоянным потенциалом (поскольку U_j , согласно (2.5) и (2.6), не зависит от координаты y), проекция импульса на ось X изменяется в соответствии с (2.8), как показано на рисунке 2.2, а. Нужно заметить, что распределение состояния квазичастицы (КЧ) по волновым векторам напоминает волновой пакет. Однако, в этом распределенном волновом пакете (РВП) его составляющие с различными волновыми векторами присутствуют в слоях координатного пространства с различным потенциалом ЗУ.

Учитывая изложенное выше, можно сформулировать *первое научное положение*, выносимое на защиту:

1. В высокодопированных (с количеством дырок от 0.05 на элементарную ячейку) системах с сильным электрон-фононным взаимодействием стационарные состояния делокализованных носителей в дополнительном потенциале автолокализованных носителей представляют собой распределенные в пространстве волновые пакеты блоховских волн с различными импульсами в областях с различными значениями дополнительного потенциала.

Поскольку вблизи антинода $k_y \ll k_x$, то вначале можно пренебречь изменением потенциала ЗУ вдоль оси Y при рассмотрении прохождения носителя сквозь кристалл и использовать приближенный вид потенциала ЗУ, определяемый (2.5), (2.6). Такая упрощенная модель позволит показать особенности новых КЧ в системе с купратоподобной дисперсией. Затем мы перейдем к рассмотрению потенциала, зависящего от двух переменных.

Моделирование прохождения носителя в потенциале, зависящем от обеих координат, происходит подобным образом. Квадратная область на проводящей плоскости со стороной CN_p разделяется на квадратные клетки со стороной $s = \frac{c}{N_l}$. Потенциал в каждой клетке рассматривается постоянным и рассчитывается следующим образом (в случае потенциала (2.2)):

$$U_j = \frac{U_0}{2} \left(\sin \left(\frac{2\pi X_j}{C} \right) + \sin \left(\frac{2\pi Y_j}{C} \right) \right), \quad (2.10)$$

где X_j, Y_j - координаты нижнего левого угла j -ой клетки. Сравнение угла α_j с граничным углом α_1 , имеющим вид

$$\alpha_1(j) = \arctg \left(\frac{Y_j + y_j - s}{X_j + x_j - s} \right) \quad (2.11)$$

определяет, будет ли отражение и преломление блоховских волн происходить на границе параллельной оси X или Y. Если отражение и преломление возникает на границе, параллельной оси X, то в отличие от (2.7) сохраняется

проекция волнового вектора на ось X: $k_{j,x} = k_{j+1,x}$, $k_{j,y}$ изменяется согласно (2.8), а граничные условия (2.9) в этом случае будут включать непрерывность производной $\frac{d\Psi}{dy}$ на границе слоев. Таким образом, в общем случае уравнение (2.7) следует заменить условиями (2.12), а выражение (2.8) заменить на две системы уравнений (2.13) для границ, параллельных оси Y и X, соответственно:

$$k_{j,y} = k_{j+1,y}, \alpha_j < \alpha_1(j), \quad (2.12)$$

$$k_{j,x} = k_{j+1,x}, \alpha_j < \alpha_1(j)$$

$$\begin{cases} \varepsilon(\mathbf{k}_j) = E - U_j \\ k_{y_{j-1}} = k_{y_j} \end{cases} \quad \begin{cases} \varepsilon(\mathbf{k}_j) = E - U_j \\ k_{x_{j-1}} = k_{x_j} \end{cases}. \quad (2.13)$$

Таким образом, стационарное состояние носителя в дополнительном потенциале, создаваемом автолокализованными носителями, – это РВП с различными импульсами в областях с различным потенциалом: во время прохождения в потенциале ЗУ квазиимпульс носителя должен удовлетворять системе уравнений (2.12) и (2.13). Для определения состояния РВП в рассматриваемой двумерной системе можно найти либо проекции вектора (k_{x0}, k_{y0}) в слое с нулевым потенциалом ЗУ или одну из величин $\tilde{k}$, E или k_{y0} вместе с углом φ_0 в слое с нулевым потенциалом (угол φ_0 , называемый углом поверхности Ферми, часто используется в экспериментах по купратам, его связь с углом α показана на рисунке 2.2, b).

2.3. Моделирование закона дисперсии, подобной дисперсии купратов, вблизи поверхности Ферми и антинодального направления

Поскольку распределение стационарных состояний носителя по волновым векторам в потенциале ЗУ определяется дисперсией блоховских носителей $\varepsilon(k)$, мы нашли в нашей работе [A1] подходящее выражение, моделируя дисперсию купратов вблизи антинода в нижней зоне Хаббарда. Дисперсию можно получить из экспериментальных спектров ARPES для купратов, поскольку, как было показано ранее [19, 20], для систем с сильным

ЭФВ экспериментальная дисперсия из спектров ARPES следует за дисперсией «голового» носителя, то есть совпадает с дисперсией носителей, полученной в отсутствие ЭФВ. Согласно данным экспериментов ARPES, ширина нижней зоны Хаббарда для купратов примерно 0.5-0.6 эВ [35, 40] и поверхность Ферми при различных уровнях допирования p может быть приближенно представлена как четыре арки, опирающиеся на углы примерно 90° (или немного меньше). Чтобы получить арки в 90° для первого квадранта первой зоны Бриллюэна, построим окружность с центром в точке (b, b) , где $b = \frac{\pi}{a}$, a – постоянная решетки (рисунок 2.2, b). Радиус поверхности Ферми при нулевом допировании $\tilde{k}_0 = b\sqrt{\frac{2}{\pi}}$ находится из условия равенства заполненных и незаполненных областей в первой зоне Бриллюэна при нулевом допировании. При более высоком допировании радиус поверхности Ферми $\tilde{k} > \tilde{k}_0$ (тильды означают, что эти вектора откладываются от точки (b, b)). Волновые вектора $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, соответствующие точкам на поверхности постоянной энергии, связаны с ее радиусом $\tilde{k}$ простым соотношением: $\tilde{k}^2 = (k_x - b)^2 + (k_y - b)^2$ (рисунок 2.2, b).

Моделируя дисперсию купратов, мы старались отразить её плоскую форму вблизи поверхности Ферми в окрестности антинода [35, 41, 71]. Мы рассмотрели несколько законов дисперсии вида (2.14) с различными значениями параметра d от 1 до 2, которые удовлетворяют описанным выше условиям и хорошо согласуются с экспериментальными версиями купратов вблизи антинода при дырочном допировании $p < 0.26$:

$$\varepsilon = 0.5 - c(\tilde{k} - \tilde{k}_0)^d, \tilde{k} > \tilde{k}_0 \quad (2.14)$$

$$\varepsilon = 0.5 + c'(\tilde{k}_0 - \tilde{k})^{d'}, \tilde{k} < \tilde{k}_0.$$

Как будет видно ниже, моделирование закона дисперсии немного выше поверхности Ферми с нулевым допированием также необходимо для определения квазичастиц (КЧ) в дополнительном потенциале ЗУ, поэтому в (2.14) мы продолжили дисперсию выше поверхности Ферми с нулевым

допированием, сохранив её плоскую форму вблизи антинода (рисунок 2.3). Необходимо заметить, что мы не ставили целью достижение сходства смоделированной дисперсии с реальной дисперсией купратов в нодальном направлении, поскольку это направление не будет использоваться в наших дальнейших исследованиях.

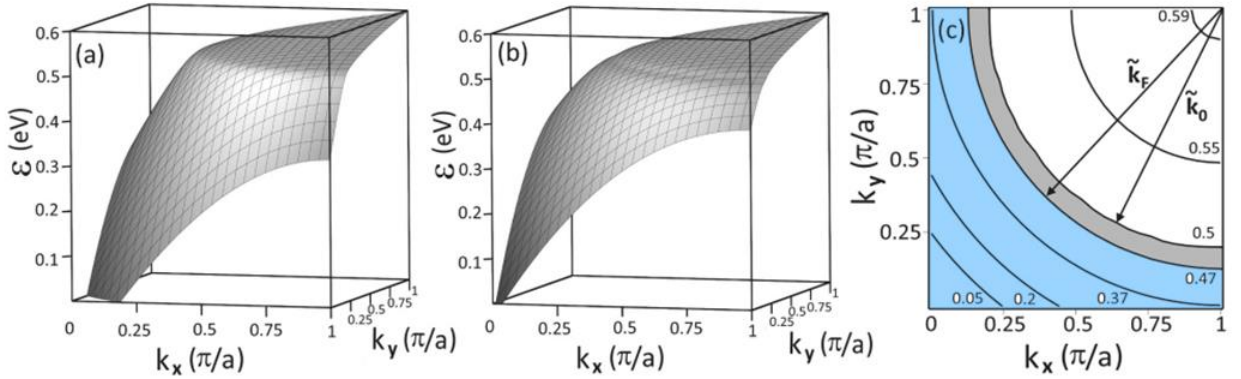


Рисунок 2.3 - Дисперсия электронов (2.14) с (a) $d = 1.2$, $c = 1.5$, $d' = 0.65$, $c' = 0.13$ и (b) $d = 1.5$, $c = 1.5$, $d' = 0.65$, $c' = 0.13$. (c) Определение энергии Ферми из площади между кривыми постоянной энергии для $p=0.2$ для дисперсии (2.14) при $d = 1.5$, $c = 2$, $d' = 0.65$, $c' = 0.13$. Энергия Ферми изменяется от 0.499 эВ при $p = 0.01$ до 0.458 эВ при $p = 0.25$. Числа около каждой кривой постоянной энергии $\varepsilon = Const$ показывают значение ε для каждой из них.

Для расчёта ширины псевдощели необходимо получить энергию Ферми как функцию допирования. В квазидвумерной системе (с проводимостью в пределах плоскости CuO_2), которая рассматривается здесь, ее легко найти из уравнения, связывающего площадь S в обратном пространстве между двумя поверхностями Ферми, соответствующими нулевому и ненулевому допированию (S показана серым цветом на рисунке 2.3, c), и поверхностную плотность допированных дырок n_h : $S = \frac{(2\pi)^2 n_h}{2}$, где $n_h = \frac{p}{a^2}$. В случае дисперсии вида (2.14) S - это площадь между двумя арками, которые являются сечениями поверхности $\varepsilon(\mathbf{k})$ плоскостями $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_F$ и $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(\tilde{\mathbf{k}}_0)$. Другими словами, S - это площадь кольца шириной $\Delta\tilde{k} = \tilde{k}_F - \tilde{k}_0$, где $\tilde{k}_F =$

$\sqrt{2\pi n_h + \tilde{k}_0^2}$, её четверть показана на рисунке 2.3, с. Таким образом, для дисперсии вида (2.14) энергия Ферми как функция допирования имеет вид $\varepsilon_F(p) = 0.5 - c(\tilde{k}_F(p) - \tilde{k}_0)^d$.

2.4 Ограничения, накладываемые на распределенные волновые пакеты вблизи антинодального направления

Рассмотрим ограничения, накладываемые на РВП вблизи антинода в системе с купратоподобной дисперсией. Вначале мы обсудим более простой случай с учетом изменения потенциала ЗУ вдоль одной из осей, а затем рассмотрим общий случай потенциала, зависящего от обеих координат. Как было показано выше, во время прохождения носителя в дополнительном потенциале ЗУ, зависящем от координаты x , квазиимпульс носителя должен удовлетворять системе уравнений (2.12). Подставляем дисперсию (2.14) в (2.8):

$$E - U_j = 0.5 - c \left(\sqrt{(k_{j,x} - b)^2 + (k_{j,y} - b)^2} - \tilde{k}_0 \right)^d, E - U_j < 0.5, \quad (2.15)$$

$$E - U_j = 0.5 + c' \left(\tilde{k}_0 - \sqrt{(k_{j,x} - b)^2 + (k_{j,y} - b)^2} \right)^{d'}, E - U_j > 0.5.$$

Таким образом, в случае дисперсии (2.14) волновой вектор квазичастицы должен удовлетворять (2.7) и (2.15).

Рассмотрим стационарные состояния с полной энергией E_1 , находящиеся на арке (рисунок 2.4, а). При прохождении квазичастицы потенциальная энергия U_j принимает различные значения, поэтому левая часть (2.15) изменяется от $\varepsilon = E_1 - U_0$ до $\varepsilon = E_1 + U_0$. Одновременно величина k_x в правой части должна изменяться при фиксированном значении k_y равном у-проекции волнового вектора в слоях с нулевым потенциалом (СНП) в соответствии с (2.7). Как было указано ранее, состояние квазичастицы в дополнительном потенциале можно определить не только проекциями импульсов в СНП (k_{x0}, k_{y0}) , но также энергией E , которая определяет радиус арки в пространстве импульсов, и углом φ_0 в СНП: (E, φ_0) .

Сравним траектории в пространстве импульсов двух антинодальных КЧ с одинаковыми энергиями E , но разными волновыми векторами в СНП, которые задаются углами φ_1 и φ_2 . Первая траектория (линия 1), соответствующая большему углу φ_1 , достигает обеих граничных поверхностей (кривых) постоянной кинетической энергии, то есть достигает как поверхности минимальной кинетической энергии $\varepsilon = E_1 - U_0$ (что имеет место в слоях с наибольшей потенциальной энергией, точка А на рисунке 2.4, б), так и поверхности максимальной кинетической энергии $\varepsilon = E_1 + U_0$ (в слоях с наименьшей потенциальной энергией, точка С на рисунке 2.4, б). Вторая траектория (линия 2), соответствующая меньшему углу $\varphi_2 < \varphi_1$, достигает первой из указанных кривых постоянной энергии, но не достигает см

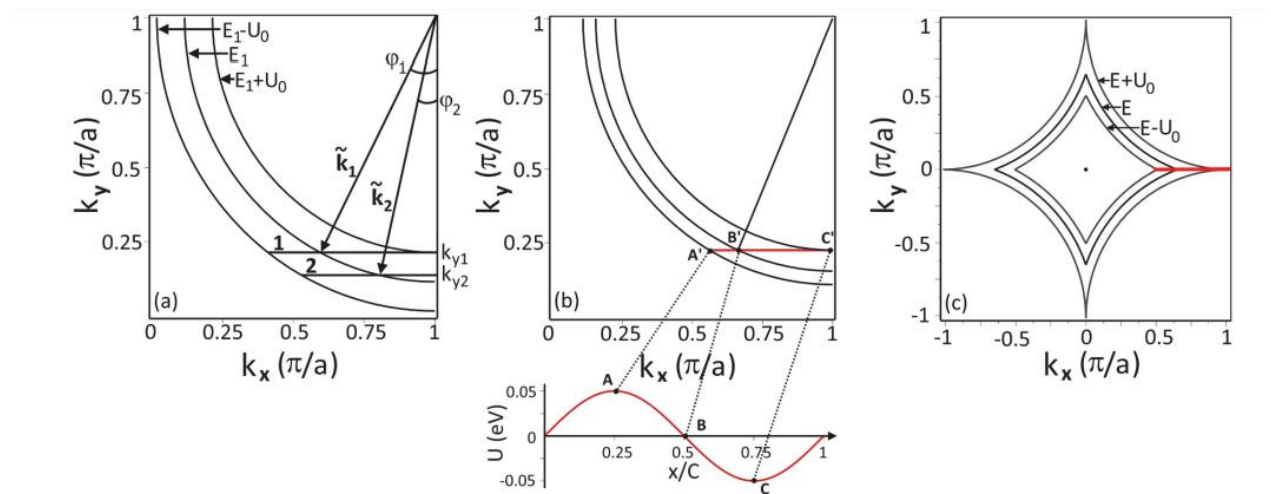


Рисунок 2.4 - Траектории импульса носителя при его прохождении в потенциале ЗУ (линии 1 и 2) -(а); структура состояния новой квазичастицы: соответствие между точками траектории в пространстве импульсов и значениями потенциальной энергии в слоях, где импульс носителя имеет данное значение – (б) и исчезновение псевдощели, когда поверхность постоянной энергии $\varepsilon = E_1 + U_0$ становится электроноподобной в соответствии с экспериментом [72]: траектория импульса антинодального носителя (красная линия) с энергией E достигает как максимальную $\varepsilon = E_1 + U_0$, так и минимальную $\varepsilon = E_1 - U_0$ поверхности постоянной кинетической энергии, при $d = 1.5, c = 1.5$ и $E = 0.35$ эВ (с).

Таким образом, при $\varphi_0 \geq \varphi_1$ реальные корни системы (2.7) и (2.15) существуют в каждом j -ом слое. Поэтому состояния с энергией E_1 и $\varphi_0 \geq \varphi_1$ - это реальные КЧ. Для случая, показанного на рисунке 2.4 (а, b) при $\varphi_0 < \varphi_1$ и $E = E_1$ не существует реальных корней системы (2.7, 2.15) в некоторых слоях с отрицательной потенциальной энергии носителя. Затухание таких носителей, вызванное мнимой частью волнового вектора, приводит к их отсутствию среди новых КЧ. Следовательно, отрицательная полуволна потенциальной энергии, вызванная притяжением электронов к дырочным биполяронам, вместе с топологией поверхности постоянной энергии, характерной для купратов, приводит к исчезновению антинодальных КЧ. Необходимо заметить, что вследствие частичного отражения электронных волн, полная траектория импульса, кроме траектории в первом квадранте первой зоны Бриллюэна (см. рисунок 2.4), включают траекторию, отраженную в плоскости, перпендикулярной оси k_x и содержащей точку $(0, 0)$. Ниже мы рассмотрим, каким образом разрешённые КЧ проявляются в экспериментах. Исчезновение описанного выше ограничения для антинодальных КЧ (см. рисунок 2.4, c) происходит, когда поверхности постоянной энергии, ограничивающие траекторию, становятся электроноподобными, как наблюдалось [72] в эксперименте N. Doiron-Leyraud et al.

2.5 Распределенные волновые пакеты в антинодальных спектрах фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением

Аналогично тому, как это было сделано в нашей работе [A1], рассмотрим, каким образом выявленное изменение стационарных состояний делокализованных носителей в присутствии автолоказованных носителей и ограничения, накладываемые на новые КЧ в системах с купратоподобной дисперсией, проявляются в спектрах ARPES. Очевидно, что электрон с данной полной энергией E (которая совпадает его кинетической энергией ε только в СНП) может вылететь вследствие поглощения фотона из областей кристалла с

различной потенциальной энергией U_j и в результате иметь различные значения волнового вектора (и угла φ), удовлетворяющие (2.7) и (2.15) (см. рисунок 2.4, b).

2.5.1 Сдвиг спектрального веса к более высоким энергиями связи на величину амплитуды потенциала зарядового упорядочения.

Как было описано выше, КЧ с энергией $E = E_1$ и $\varphi_0 = \varphi_2$ (см. рисунок 2.4, а) не существует, и таким образом она не отображается в спектрах ARPES. Квазичастица с $E = E_1$ и $\varphi_0 = \varphi_1$, проекция которой на ось Y обозначена k_{y1} на рисунке 2.4, а, существует, и ее траектория в пространстве импульсов достигает кривой постоянной кинетической энергии $\varepsilon = E_1 + U_0$ на границе первой зоны Бриллюэна, то есть при $\mathbf{k} = (b, k_{y1})$:

$$\varepsilon(b, k_{y1}) = E_1 + U_0.$$

Из этого следует, что в антиноде полная энергия носителя E_1 на U_0 ниже, чем должна быть согласно закону дисперсии для этого импульса: $E_1 = \varepsilon(b, k_{y1}) - U_0$. Если этот носитель, будучи в слое с минимальной потенциальной энергией (точка С на рисунке 2.4, b), поглощает фотон, то он проявится в спектрах ARPES с импульсом $\mathbf{k} = (b, k_{y1})$ и энергией связи

$$E_1 - E_F = \varepsilon(b, k_{y1}) - U_0 - E_F.$$

Таким образом, фотоэлектроны с антинодальными волновыми векторами и соответствующими им (согласно закону дисперсии) энергиями связи $\varepsilon(\mathbf{k}) - E_F$, обычно наблюдающиеся в нормальных металлах и купратах при $T > T^*$, отсутствуют в рассматриваемой системе. Вместо этого спектральный вес вблизи границы первой зоны Бриллюэна $\mathbf{k} = (b, k_{y1})$ появляется при более высоких (на величину потенциальной энергии U_0) энергиях связи $\varepsilon(\mathbf{k}) - U_0 - E_F$. Такой сдвиг спектрального веса к более высоким энергиям связи приблизительно на 0.05 эВ по сравнению со спектром при температурах $T > T^*$ (когда ЗУ отсутствует) действительно наблюдался в антинодальных спектрах ARPES [42, 43]. Величина сдвига средней точки в энергии связи при $k_y = k_{Fy}$,

где k_{Fy} - это волновой вектор Ферми при $T > T^*$, обычно рассматривается как ширина псевдощели, так что в настоящем подходе мы будем считать ее совпадающей с U_0 . Сдвиг дисперсии в антинодальной области на U_0 вниз по энергии связи приводит к появлению ненулевого спектрального веса при волновых векторах $k_y > k_{Fy}$ и энергиях связи от $\varepsilon(\mathbf{k}) - U_0 - E_F$ до $\varepsilon(\mathbf{k}) - E_F$. Такой спектральный вес наблюдался в экспериментах [42, 43], где был назван «нарушением симметрии частица-дырка» или «несоответствием k_F ». Как будет показано ниже, при учете зависимости потенциала ЗУ от обеих координат x и y , огромное уширение спектрального веса и уменьшение интенсивности с уменьшением энергии связи при $k_y > k_{Fy}$, характерное для экспериментальных спектров [42, 43], также имеют место в рассматриваемой системе.

2.5.2. В рамках предлагаемого подхода рассмотрим *угловую зависимость псевдощели* и покажем, что она также находится в согласии с результатами экспериментов. Как мы определили выше, в антиноде (при $\varphi = 0$) ширина щели – это U_0 . С другой стороны существует минимальное значение угла φ_0 , соответствующего реальной КЧ при данной энергии (рисунок 2.4, а). Этот угол соответствует закрытию псевдощели, поэтому его можно назвать φ_{clos} . Например, на рисунке 2.4, а, $\varphi_{clos} = \varphi_1$ при условии $E_F = E_1$. Очевидно, что движение вдоль поверхности Ферми в направлении увеличения угла φ приводит к уменьшению псевдощели от U_0 при $\varphi = 0$ к нулю при φ_{clos} . Значение φ_{clos} связано с параметрами дисперсии. Геометрически эта связь показана на рисунке 2.5, а. Например, найдём пример дисперсии, соответствующей $\varphi_{clos} = 30^\circ$, которая наблюдается в экспериментах по купратам. Для этого необходимо решить уравнение

$$\tilde{k}(E) \cos(30^\circ) = \tilde{k}(E + U_0), \quad (2.16)$$

где $\tilde{k}(\varepsilon)$ и $\tilde{k}(\varepsilon + U_0)$ определяются дисперсией (2.14) (рисунок 2.5, а). Например, для $p = 0.15$ при $d = 1.2$, $c = 1.5$, $c' = 0.1$ решение (2.16) дает $d' = 0.8$. Рисунок 2.5, б и в, показывает углы поверхности Ферми, соответствующие

закрытию щели для систем с различными параметрами дисперсии и уровнями допирования.

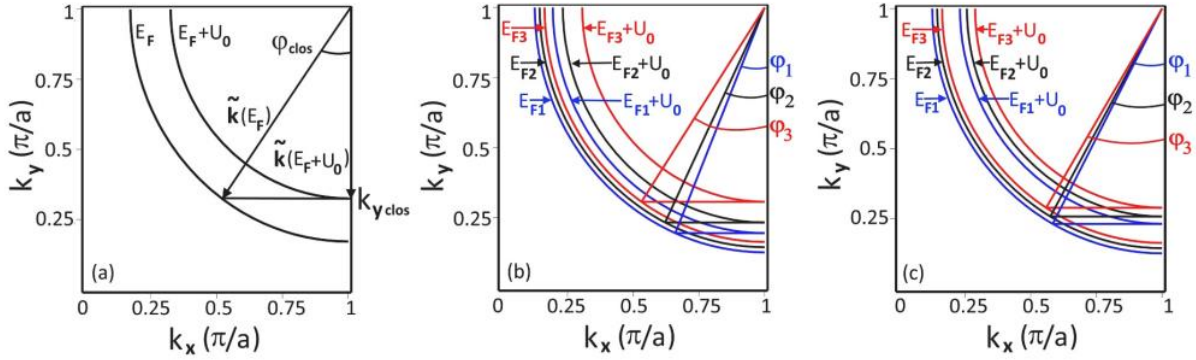


Рисунок 2.5 - Метод для расчета параметра d' в дисперсии (2.14), соответствующей закрытию псевдощели при данном угле поверхности Ферми ϕ_{clos} – (а) и изменение угла закрытия при изменении допирования и параметров дисперсии: $d=1.2$, $c=1.5$, $d'=0.65$, $c'=0.13$, $E_{F1}(p=0.2)=0.447$, $\phi_1=23^\circ$, $E_{F2}(p=0.15)=0.461$, $\phi_2=26^\circ$, $E_{F3}(p=0.1)=0.476$, $\phi_3=33.6^\circ$ (в), а также $d=1.5$, $c=1.5$, $d'=0.4$, $c'=0.12$, $E_{F1}(p=0.2)=0.477$, $\phi_1=28.5^\circ$, $E_{F2}(p=0.15)=0.485$, $\phi_2=30^\circ$, $E_{F3}(p=0.1)=0.492$, $\phi_3=32^\circ$ – (с).

2.5.3. Уширение спектра ARPES при потенциале зарядового упорядочения, зависящем от координат x и y . Теперь рассмотрим более общую модель без усреднения потенциала ЗУ по координате y . Мы снова будем рассматривать носители вблизи антинода, но теперь учтём, что проходящие блоховские волны встречают на своём пути также границы, параллельные оси X (в настоящем подходе все границы выбраны параллельными координатным осям). В результате их траектории в импульсном пространстве перестают быть горизонтальными линиями и теперь состоят из горизонтальных и вертикальных шагов, образующих квазипрямоугольники (рисунок 2.6). При прохождении такого РВП квазиимпульсы меняются согласно (2.12) и (2.15). На рисунке 2.6 показаны два примера траекторий КЧ в потенциале ЗУ, зависящем от двух переменных. Аналогично описанным выше траекториям в случае с потенциалом ЗУ, зависящим от одной переменной, траектория на рисунке 2.6,

а, соответствует квазичастице с энергией E и средним волновым вектором, направленным под углом α_1 к оси X . Она достигает обеих граничных поверхностей (кривых) постоянной кинетической энергии, то есть достигает как поверхности минимальной кинетической энергии $\varepsilon = E_1 - U_0$, так и поверхности максимальной кинетической энергии $\varepsilon = E_1 + U_0$, что соответствует беспрепятственному прохождению областей с максимальным и минимальным дополнительным потенциалом, соответственно.

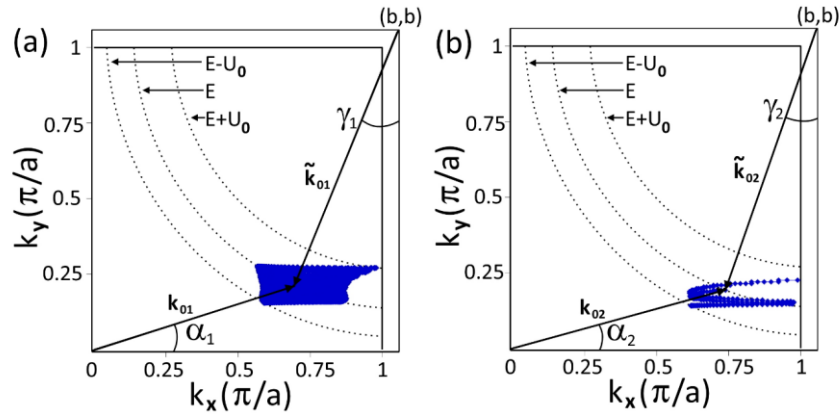


Рисунок 2.6 - (а) и (b) Траектории в пространстве волновых векторов в случае потенциала 3У, зависящего от переменных x и y , для состояний (E, α_1) и (E, α_2) , соответственно. $E = 0.44$ эВ, $U_0 = 0.05$ эВ, $\gamma_1 = 23^\circ$, $\gamma_2 = 20^\circ$.

Траектория на рисунке 2.6, b, соответствует квазичастице с той же энергией E и меньшему углу $\alpha_2 < \alpha_1$ между средним волновым вектором и осью X и, следовательно, меньшему углу $\gamma_2 < \gamma_1$. Как видно из рисунка, эта траектория прерывается на границе первой зоны Бриллюэна, не достигая поверхности максимальной кинетической энергии $\varepsilon = E_1 + U_0$ (которая соответствует минимальной потенциальной энергии $-U_0$). Причина такого поведения квазичастицы заключается в том, что кинетическая энергия состояния, имеющего полную энергию E и угол α_2 , не может достичь значений вблизи максимума $E + U_0$ вдоль траектории квазичастицы в первой зоне Бриллюэна при купратоподобной дисперсии. Таким образом, состояния носителей с энергией E и $\alpha \geq \alpha_1$ (или $\gamma \geq \gamma_1$) – это реальные квазичастицы, в то время как стационарные состояния с $\alpha < \alpha_1$ (или $\gamma < \gamma_1$) не могут

существовать в системах с дисперсией, характерной для дырочно-допированных купратов [A1].

Как видно из рисунка 2.7 с, f, траектории антинодальных КЧ в пространстве импульсов достигают поверхностей наибольшей и наименьшей кинетической энергии приблизительно вдоль диагонали квази-прямоугольника, а угол между диагональю и осью X можно приблизительно считать равным α . Таким образом, можно снова получить геометрическую оценку параметров дисперсии, необходимых для закрытия псевдощели, при любом данном угле поверхности Ферми φ_0 . Уравнение, кроме этого угла, будет включать значение k_{x0} , показанного на рисунке 2.7 с, f, хотя для грубой оценки можно использовать параметры дисперсии, удовлетворяющей (2.16), с φ_0 вместо 30° .

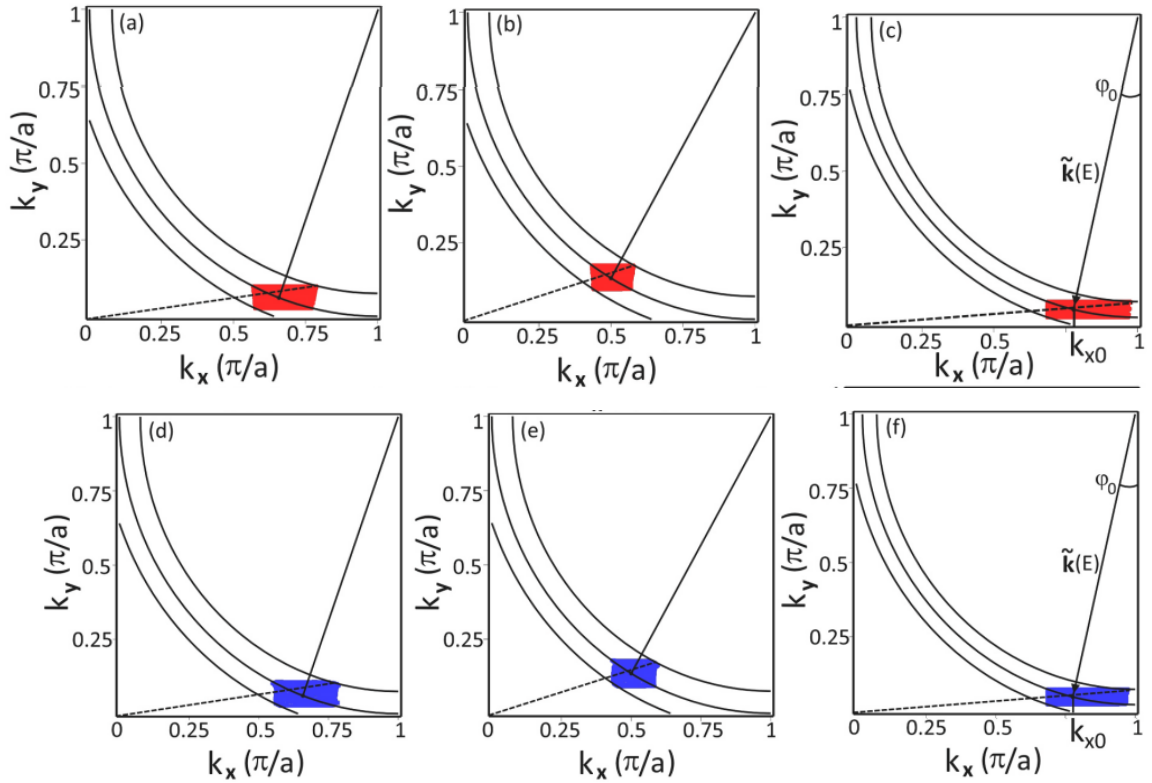


Рисунок 2.7 - Траектории волнового вектора КЧ при прохождении в потенциале

ЗУ вида (2.2) для (a)-(c) и вида (2.3) для (b)-(d) с амплитудой $U_0=0.05$ эВ.

$N_p=100$, $N_l=32$ (панели a-c), $N_p=4000$, $N_l=256$ (панели d-f). На панелях (a) и (d)

$d = 1.5$, $c = 1.5$, $E = 0.4$ эВ, $\varphi_0 = 20^\circ$, на панелях (b) и (e) $d = 1.5$, $c = 1.5$, E

$= 0.4$ эВ, $\varphi_0 = 30^\circ$, на панелях (c) и (f) $d = 1.2$, $c = 1.5$, $E = 0.35$ эВ, $\varphi_0 =$

$$\varphi_{clos} = 13.2^\circ.$$

Сравнение панелей (a) и (d), (b) и (e), (i) и (f) на рисунке 2.7 показывает, что траектория КЧ в пространстве импульсов не зависит от формы потенциала ЗУ, который имел вид (2.2) для панелей (a)-(c) и вид (2.3) для (d)-(f). В рамках предлагаемого подхода, где потенциал зависит от обеих координат, можно объяснить огромное уширение максимумов кривых распределения фотоэлектронов по энергии (EDC), наблюдаемое в экспериментальных спектрах ARPES (рисунок 2.8 а, б). На нем изображены траектории импульсов двух КЧ с энергиями E_1 и E_2 , которые отличаются больше, чем на амплитуду U_0 . Траектории пересекают или касаются друг друга, следовательно, фотоэлектроны с импульсами из области пересечения красной и голубой фигур могут иметь любую энергию из интервала $[E_1, E_2]$, который больше, чем U_0 .

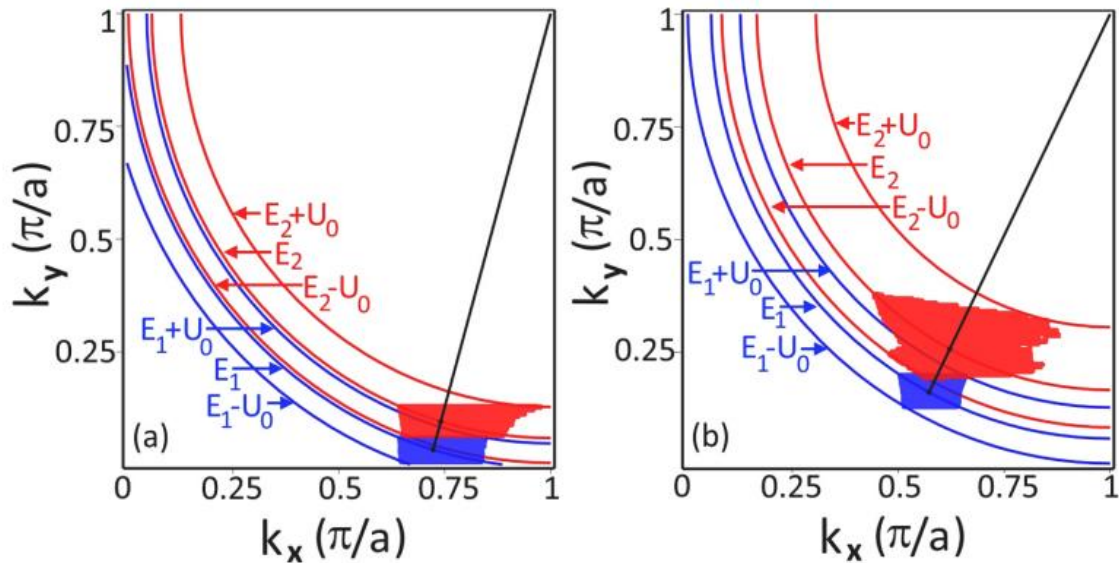


Рисунок 2.8 - Иллюстрация уширения, наблюдаемого в спектрах ARPES. Синие и красные области представляют собой траектории импульса двух КЧ с одним углом φ_0 , но разными энергиями E_1 и E_2 , соответственно, причем $E_2 - E_1 > U_0$. Фотоэлектрон, эмиттирующий из кристалла с вектором, имеющим значение из пересечения красной и синей областей, может обладать любой энергией из интервала $[E_1, E_2]$, ширина которого больше U_0 . Для обеих панелей $d = 1.5$, $c = 2$, $d' = 0.65$, $c' = 0.2$, $N_p = 100$, $N_l = 32$; на панели (a) $\varphi_0 = 16^\circ$, $E_1 = 0.36$ эВ, $E_2 = 0.42$ эВ. На панели (b) $\varphi_0 = 27^\circ$, $E_1 = 0.42$ эВ, $E_2 = 0.49$ эВ.

Подобное уширение имеет место в спектральном весе, наблюдаемом в антинодальных спектров ARPES купратов при $T < T^*$. Следует заметить, что полная траектория волнового вектора КЧ в отличие от тех, которые показаны на рисунках 2.7 и 2.8, включают также траектории, отражённые в плоскостях, содержащих оси k_x или k_y и перпендикулярных к плоскости (k_x, k_y) .

2.6 Расчет спектра ARPES для потенциала зарядового упорядочения, зависящего от двух переменных

Для расчета спектра, подобного экспериментальному антинодальному спектру ARPES, необходимо вначале получить пересечение траекторий КЧ в пространстве импульсов с границей первой зоны Бриллюэна. В антиноде квази-прямоугольная траектория КЧ вырождается в линию (рисунок 2.8, а), как это имело место в одномерном случае (см. рисунок 2.4, а). Однако, если в качестве кривых постоянной энергии вместо арок с углами 90° рассмотреть арки, опирающиеся на меньший угол (что также наблюдалось в экспериментах по купратам), то форма траекторий будет оставаться подобной прямоугольнику вплоть до антинода при более низких энергиях КЧ и выродится в линию вблизи антинода для КЧ с энергиями, близкими энергии Ферми. Это происходит вследствие того, что кольцо между кривыми постоянной энергии $\varepsilon = E - U_0$ и $\varepsilon = E + U_0$ вблизи $E = E_F$ гораздо шире, что вызвано плоской областью купратоподобной дисперсии вблизи энергии Ферми в антиноде. Для получения кривых постоянной кинетической энергии в форме арок с углом немного меньше 90° мы переместим центр арки из точки (b, b) в точку (b', b') , где b' немного больше (в данном случае на 13%), чем b (рисунок 2.9, а).

Поскольку энергия связи в спектрах ARPES отсчитывается от энергии Ферми, следующий шаг - это определение расположения поверхности Ферми. Очевидно, что низкотемпературная (при $T < T^*$) и высокотемпературная ($T < T^*$) поверхности Ферми не совпадают вследствие отсутствия КЧ со средними импульсами вблизи антинода при $T < T^*$, где биполяроны и, следовательно, псевдощель, существуют. Для того, чтобы найти низкотемпературную

поверхность Ферми, соответствующую нулевому допированию, учтём, что при низких температурах некоторые импульсы носителей в СНП, которые характеризуют состояние КЧ и называются также средними импульсами КЧ, запрещены. В основном состоянии с нулевым допированием электроны занимают разрешённые состояния КЧ с минимальной (среди ещё не заполненных состояний) энергией до того момента, когда занятая область достигнет половины первой зоны Бриллюэна площадью $b^2/2$. Поскольку в серых областях (см. рисунок 2.9, а) состояния КЧ запрещены в присутствии потенциала ЗУ (вообще говоря, угол γ , соответствующий закрытию щели, так же как и φ_{clos} , немного зависят от энергии псевдощели, как можно видеть из рисунка 2.5, b и c, но здесь мы пренебрегаем этой зависимостью), поверхность Ферми, соответствующая нулевому допированию, сдвинута к более высоким энергиям КЧ при температурах $T < T^*$ в сравнении с ее расположением при $T > T^*$. Сравнивая экспериментальные спектры ARPES, полученные при низкой и высокой температурах, можно заметить, что на них поверхность Ферми ведет себя сходным образом. На рисунке 2.9, а, синей и красной штрихованными линиями показаны низко- и высокотемпературная поверхности Ферми для нулевого допирования, соответственно. Поскольку, согласно экспериментальным данным для низких температур, дисперсия должна быть наиболее плоской вблизи поверхности Ферми, в смоделированной дисперсии мы также расположили наиболее плоский участок в окрестности поверхности Ферми, соответствующей низкой температуре и нулевому допированию. На рисунке 2.9, а, синие и красные сплошные линии показывают поверхности Ферми, соответствующие уровню $p = 0.15$ для $T < T^*$ и $T > T^*$, соответственно.

Для наилучшего сравнения с экспериментальными данными необходимо получить спектр ARPES в виде «*image plot*». Для этого мы рассмотрели тонкую полосу, которая является пересечением траектории КЧ в пространстве

импульсов, имеющей энергию E , с границей первой зоны Бриллюэна, и поместили ее в соответствующее место на плоскости $(k_y, E - E_F)$.

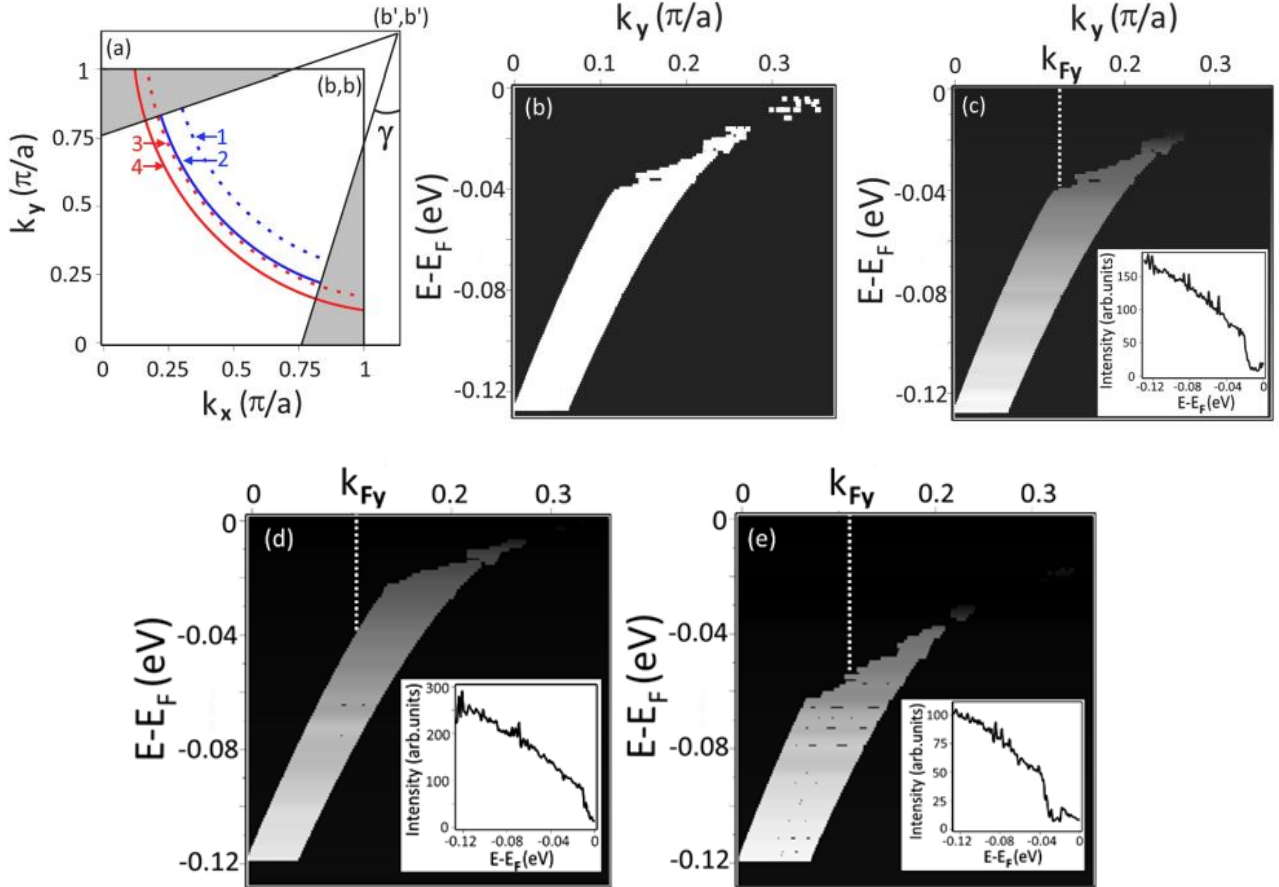


Рисунок 2.9 - (a) Области в первой зоне Бриллюэна, недоступные для КЧ при $T < T^*$, показаны серым; (b', b') – центр арок, представляющих собой поверхности (кривые) постоянной энергии; штрихованными линиями 1 и 3 изображены поверхности Ферми при $p=0$ для $T < T^*$ и $T > T^*$, соответственно, сплошные линии 2 и 4 демонстрируют поверхность Ферми для $p=0.15$ для $T < T^*$ и $T > T^*$, соответственно; (b) белым показаны области с ненулевым спектральным весом в антинодальном спектре ARPES (пока без учета интенсивности); (c), (d), (e) рассчитанные спектры ARPES для $U_0=0.05$, 0.04 и 0.065 эВ, соответственно, штриховая линия показывает ширину псевдощели, определяемую как сдвиг средней точки при k_F , где k_F – волновой вектор Ферми при $T > T^*$, на вставке изображена относительная интенсивность.

Таким образом, мы получаем области с ненулевым спектральным весом (рисунок 2.9, b), где изменения интенсивности пока не учтены. Интенсивность фотоэмиссии для данной энергии E и импульса k_y (то есть вероятность для КЧ с энергией E вылететь вследствие поглощения с фиксированной проекцией k_y), очевидно, зависит от площади траектории в пространстве импульсов. Вследствие плоской формы купратоподобной дисперсии вблизи поверхности Ферми площадь траектории сильно зависит от энергии КЧ (рисунок 2.9, b). Интенсивность рассчитана как обратная величина площади траектории в обратном пространстве для КЧ с энергией E (показана на вставке к рисунку 2.9, c).

Рисунок 2.9, c, демонстрирует получившийся антинодальный спектр ARPES в виде «*image plot*» с учётом изменения интенсивности при различных энергиях связи. На спектре отчетливо заметно присутствие псевдощели, ширина которой определяется как сдвиг средней точки при k_{Fy} , где k_{Fy} – волновой вектор, соответствующий пересечению Ферми при высокой температуре $T > T^*$. Она немного меньше, чем амплитуда потенциала U_0 ($U_0 = 0.05$ эВ на рисунке 2.9, c). Спектр демонстрирует огромное уширение по энергии, что имеет место в экспериментах. Большая продолжительность спектрального веса при $k > k_F$, присутствующая в рассчитанном спектре, также наблюдается в экспериментах. Часто эту экспериментальную особенность описывают как несовпадение волнового вектора Ферми или нарушение симметрии частица-дырка. Пересечение поверхности Ферми не наблюдается в рассчитанном спектре (в отличие от экспериментальных) вследствие большого увеличения площади траектории вблизи поверхности Ферми, что вызвано плоской областью зоны вблизи этой поверхности, и соответствующего уменьшения интенсивности.

2.7 Распределенные волновые пакеты в экспериментах по сканирующей туннельной микроскопии и зависимость ширины псевдощели от уровня допирования

Обсудим проявления описанных выше КЧ в экспериментах по сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), которая является еще одним экспериментальным методом для изучения псевдощели. Рассматривая режим дифференциальной проводимости, обычно используется тот факт, что дифференциальная проводимость пропорциональна локальной плотности состояний носителя (LDOS) [45, 73]. Очевидно, в настоящем подходе LDOS постепенно повышается с повышением напряжения смещения V до своего значения U_0/e , поскольку антинодальные состояния, которые были недоступны при нулевом смещении (вследствие присутствия отрицательной полувольты потенциальной энергии), постепенно начинают играть свою роль и происходит понижение предельного угла закрытия φ_{clos} при повышении смещения. С увеличением напряжения смещения состояние вблизи антинода становятся доступными, поскольку носители приобретают недостающую энергию от приложенного поля смещения (которая изменяется от 0 до U_0 для состояний с различным угловым расстоянием до антинода).

Таким образом, компенсация отрицательной потенциальной энергии в потенциале ЗУ энергией носителя eV в приложенном поле смещения приводит к повышению плотности разрешенных состояний. То же самое можно сказать и о дырочных состояниях в приложенном поле, равном по абсолютной величине но противоположном по знаку. Такое повышение дифференциальной проводимости (представляющей плотность доступных состояний) с повышением приложенного поля смещения до ширины щели наблюдается в экспериментах по купратам [45, 69, 74, 75, 76].

При рассмотрении топографического режима в рамках настоящего подхода смещение накладывается на отрицательный или положительный потенциал ЗУ в различных областях плоскости. Это приводит к изменению высоты иглы, необходимой для обеспечения постоянного туннельного тока.

Очевидно, что отсутствие КЧ вблизи антинода вследствие влияния потенциала ЗУ, проявляется как псевдощель также в теплоёмкости, тепловой проводимости, найтовском сдвиге и других свойствах, зависящих от плотности состояний носителя вблизи поверхности Ферми.

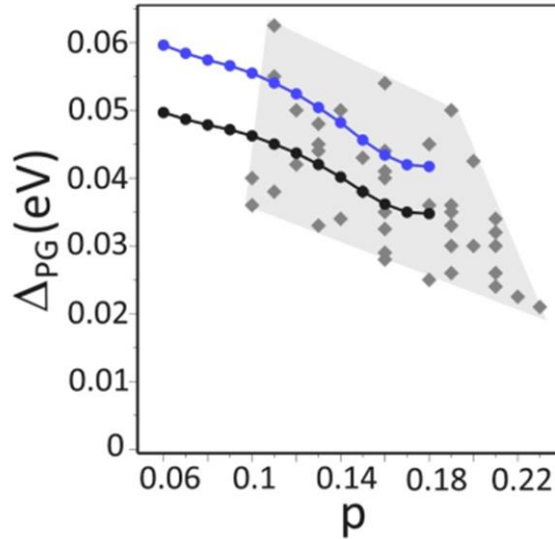


Рисунок 2.10 - Синие и черные кружки показывают зависимость от допирования амплитуды потенциала $U_0(p)$ (которая в настоящем подходе совпадает с шириной псевдощели, измеренной методом СТМ), посчитанную в соответствии с (1) и (2) с использованием экспериментальной зависимости $K_{CO}(p)$ [7] для Bi2212, при $r_0 = 200 \text{ \AA}$, $\epsilon_0 = 50$ и 60 , соответственно. Серыми ромбами показаны экспериментальные данные, полученные методом СТМ для Bi2212 [75].

В рамках такого подхода можно рассчитать также зависимость от допирования ширины псевдощели. Как было показано выше, в данном подходе ширина щели, измеренная с помощью СТМ, совпадает с амплитудой потенциала U_0 , а ширина псевдощели в антинодальном спектре ARPES немного меньше, чем U_0 . Зависимость от допирования амплитуды потенциала ЗУ вызвана зависимостью от допирования проекций волнового вектора ЗУ $K_{COx,y}$, которые входят в (2.1) и (2.4). Используя экспериментальные зависимости $K_{COx,y}(p)$ [7] и выражения (2.1) и (2.4), мы рассчитали амплитуду U_0 потенциала ЗУ как функцию допирования. Это показано на рисунке 2.10

вместе с экспериментальными значениями ширины псевдощели, измеренными для Bi2212 с помощью СТМ [75]. Сравнение показывает, что рассчитанная зависимость размера псевдощели от допирования хорошо согласуется с экспериментальной.

Завершая обсуждение природы и свойств псевдощели, можно сформулировать *второе научное положение*, выносимое на защиту:

При дырочно-подобной дисперсии носителей заряда распределенные волновые пакеты со средними импульсами вблизи антинодальных направлений не могут распространяться вследствие того, что действительные решения уравнения для импульса носителя в областях с большим дополнительным потенциалом притяжения не существуют. Отсутствие стационарных состояний со средними импульсами вблизи антинодальных направлений проявляется в спектрах фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением и сканирующей туннельной спектроскопии как псевдощель. Ширина рассчитанной псевдощели, которая находится в интервале 0.04...0.07 эВ, а также ее зависимость от направления импульса и уровня допирования, согласуются с экспериментально установленными свойствами псевдощели в купратных сверхпроводниках.

2.8 Определение ширины псевдощели в системах с неоднородным расположением ионов примесей

Эксперименты по СТМ показывают, что помимо зависимости от допирования существует некоторая зависимость ширины псевдощели от расстояния в одном и том же кристалле купрата, скорее всего вследствие неоднородности, вызванной присутствием ионов-допантов. Поэтому мы рассчитали антинодальные спектры для $U_0=0.065$ и 0.04 эВ (рисунок 2.9, d и e, соответственно). При учете неоднородности, получившийся спектр будет выглядеть как наложение спектров, показанных на панелях (с-е) рисунка 2.9 и спектров для других значений U_0 , находящихся в этом интервале. Согласно экспериментальным данным [68, 69], ширина щели варьируется примерно на

0.01 – 0.02 эВ от своего среднего значения в областях размером в несколько постоянных решетки. Эксперименты также показывают, что области, в которых происходит это отклонение, коррелируют с неоднородностями в распределении ионов-допантов в слое-резервуаре [68, 69]. Подход, разработанный в нашей работе [A2] и связывающий ширину щели с дополнительным потенциалом для носителей заряда, позволяет определить вклад, который вносит в этот потенциал неоднородность в распределении ионов-допантов. Таким образом, данный подход может прояснить возникновение пространственной неоднородности размера щели, наблюдаемой в исследованиях по СТМ.

Мы будем моделировать неоднородность в распределении примесных ионов в континуальном приближении. Мы представим флуктуации плотности ρ заряда ионов в слое-резервуаре как ее повышение на $\Delta\rho$ (по сравнению со средней плотностью заряда ρ_0 , $\Delta\rho = \rho - \rho_0$) в квадратной области со стороной L и центром в $(0,0)$, где находится минимум энергии электрона в потенциале ЗУ, и ее понижение в соседней области, имеющей различные формы, для обеспечения условия электронейтральности (рисунки 2.11 и 2.13). Вследствие электронейтральности средняя плотность заряда в слое-резервуаре ρ_0 равна по модулю средней плотности заряда в проводящих плоскостях CuO_2 . Для простоты мы полагаем, что эти постоянные величины компенсируют друг друга при однородном распределении допантов. Это упрощение приводит к немного завышенной величине статической диэлектрической проницаемости, обеспечивающей совпадение амплитуды рассчитанного дополнительного потенциала с экспериментальной шириной псевдощели. Следует заметить, что в дырочно-допированных купратах на проводящей плоскости находятся электронные и дырочные биполяроны, а также заряд, компенсирующий заряд электронных биполяронов, в то время как компенсирующий заряд для дырочных биполяронов расположен на слоях-резервуарах. Как показали исследования с помощью обобщенного вариационного метода [10], при уровне допирования, соответствующем присутствию ЗУ, плотности электронных и дырочных биполяронов совпадают.

При расчете дополнительного потенциала, созданного ЗУ и флуктуациями плотности примесных ионов, мы рассмотрим две проводящие плоскости с ЗУ, находящимся в противофазе, что является энергетически выгодным и обеспечивает электронейтральность в рассматриваемой области (рисунок 2.11, а). Добавление других пар проводящих плоскостей и соответствующих им пар слоев-резервуаров не меняет полученный потенциал ЗУ. Энергия электрона в потенциале ЗУ имеет вид:

$$U(\mathbf{r}) = -e \int \frac{\rho^{CO}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2.17)$$

где $\rho^{CO}(\mathbf{r})$ – это плотность заряда в проводящих плоскостях, а интегрирование берется по площади в плоскости XY (параллельной проводящим плоскостям), настолько большой, что ее размер не влияет на результат, и включает две проводящие плоскости и два резервуара заряда в направлении, перпендикулярном XY (рисунок 2.11, а). Вследствие наличия потенциала избыточных допантов, энергия электрона вычисляется по формуле, подобной (2.17), но с постоянной плотностью заряда внутри квадратных областей (показанных красным и черным на рисунке 2.11, а).

Вклад флуктуаций ионов-допантов в функцию $U(x)$ представлен на рисунке 2.11, б. Суммарный вклад в $U(x)$ флуктуаций для различных размеров области флуктуации L , имеющей форму, как на рисунке 2.11, а, различных значений относительной флуктуации плотности заряда ионов $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ и энергия электрона в биполярном потенциале показаны на рисунке 2.11, с-f. Период ЗУ для рисунков 2.11 – 2.13 составляет $15.6 \text{ \AA}$, что совпадает с периодом ЗУ для $Bi2201$ при уровне допирования $p = 0.11$ [7]. Расстояния между слоями на рисунках 2.11 – 2.14 составляют $6.15 \text{ \AA}$.

Изменения ширины псевдощели, которая совпадает с потенциальной энергией носителя в минимумах, становятся (рисунок 2.11) заметными, когда размер области флуктуации становится порядка периода ЗУ или больше. Ширина псевдощели в системах, соответствующих панелям (е) и (f), примерно

0.05 эВ (е) и 0.04 эВ (ф) в областях с увеличенной плотностью допантов и около 0.075-0.08 эВ в областях с пониженной плотностью, в местах без флуктуаций ширина псевдощели составляет 0.06 эВ. Эти величины хорошо согласуются с экспериментальными данными [68, 69], полученными методом СТМ в разных местах одного и того же образца.

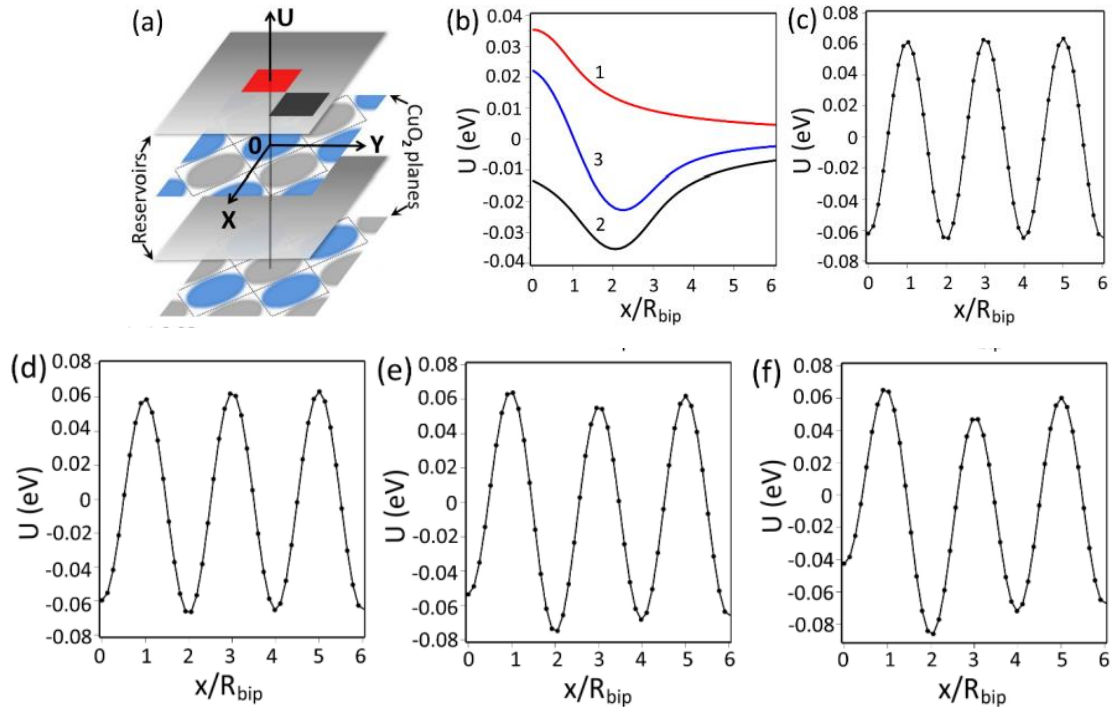


Рисунок 2.11 - Распределение заряда в рассматриваемой модели: кругами схематически изображены биполяроны (дырочные показаны синим, электронные - серым), серые плоскости – резервуары заряда, красный и черный квадраты – области с повышенной и пониженной плотностью заряда, соответственно; (b) потенциальная энергия электрона в поле флуктуаций в распределении ионов-допантов, показанном на панели (a); красная линия 1 и черная линия 2 соответствуют красному (находящемуся в центре) и черному квадратам, линия 3 – их сумма. Относительное изменение плотности заряда допантов по сравнению со средней величиной $\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} = 1$, размер области флуктуации $L=16 \text{ \AA} \approx 2R$. (c)-(f) Потенциальная энергия электрона в потенциале $3U$ и флуктуации плотности заряда ионов, (c) для $\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=0.5$, $L=8 \text{ \AA} \approx R$, (d) для

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=1, L=8 \text{ \AA}, (e) \frac{\Delta\rho}{\rho_0}=0.5, L=16 \text{ \AA} \approx 2R, (f) \frac{\Delta\rho}{\rho_0}=1, L=16 \text{ \AA}.$$

Рисунок 2.12 показывает потенциальную энергию электрона в потенциале ЗУ и флуктуаций плотности заряда ионов примеси, имеющих другой знак по сравнению с флуктуациями на рисунке 2.11, и видно, что перестановка зарядов, ответственных за флуктуацию, приводит просто к перестановке областей с увеличенной и уменьшенной шириной псевдощели.

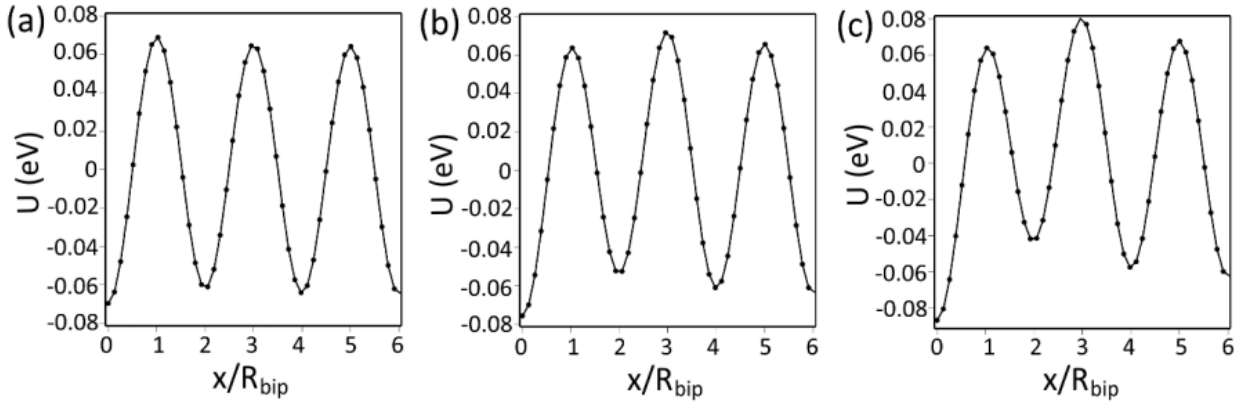


Рисунок 2.12 - Расчитанная энергия электрона в потенциале, создаваемом ЗУ и неоднородностью в плотности допантов как функция координаты x в системе, показанной на рисунке 2.11 (а), но с изменением знаков флуктуационного заряда (понижение плотности заряда в красной области и повышение в черной).

Панель (а) $\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=1$, $L=8\text{\AA}\approx R$, (b) $\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=0.5$, $L=16\text{\AA}\approx 2R$, (c) $\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=1$, $L=16\text{\AA}$. Случай с

$\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=0.5$, $L=8\text{\AA}\approx R$ полностью совпадает с рисунком 2.11 (с).

На рисунке 2.13 изображена энергия электрона в потенциале флуктуаций плотности допантов и ЗУ в случае, когда область с пониженной плотностью допантов имеет вид рамки (показана черным на вставке к рисунку 2.13, а). В таком случае для заметного изменения ширины псевдощели необходима область большей площади, имеющая пониженную плотность.

Когда площадь области с пониженной плотностью заряда в два раза превосходит площадь квадрата с повышенной плотностью, изменение ширины щели в области пониженной плотности становится таким же, как в случае с квадратными областями.

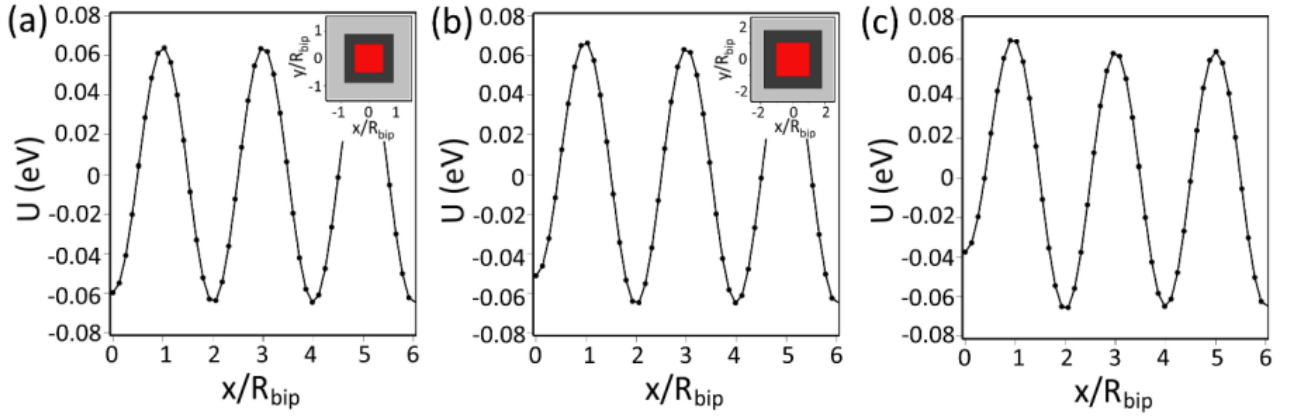


Рисунок 2.13 - (а) Энергия электрона в потенциале флуктуаций зарядовой плотности допантов в случае рамкоподобной области с пониженной плотностью допантов, показанной на вставках к панелям (а, б). Панель (а) $\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=2$, $L=8\text{\AA}\approx R$ в красной области и $\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=1$ в черной области (площадь черной области равна удвоенной площади красной области на всех панелях), (б) $\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=1$, $L=16\text{\AA}\approx 2R$ в красной области и $\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=1$ в черной, (с) $\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=2$, $L=16\text{\AA}\approx 2R$ в красной области и $\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=1$ в черной.

И даже в случае, когда область с повышенной плотностью заряда имеет форму рамки, в области пониженной плотности ширина псевдощели не имеет значительных изменений, в отличие от случая с областями, имеющими квадратную форму. Размазывание области с пониженной плотностью ионов-допантов по рамке не приводит к увеличению размеров щели, так как область становится слишком узкой в сравнении с периодом ЗУ.

3 Свободная энергия двухжидкостной системы носителей заряда и возможность единой природы трех фаз купратных сверхпроводников

Фазовая диаграмма дырочно-допированных купратных сверхпроводников обладает большим разнообразием различных фаз, среди которых псевдощелевая фаза, фаза волны зарядовой плотности или зарядового упорядочения, сверхпроводящая фаза (СП), фазы с малой электронной и большой дырочной поверхностью Ферми, фазы с числом носителей, пропорциональным уровню допирования p и $p+1$ [1, 8, 48]. При этом важно, что перечисленные фазы присутствуют на фазовых диаграммах купратов, принадлежащих к различным семействам (BSCCO, YBCO, HgBaCuO и др), что указывает на их взаимосвязь. В обыкновенной ВЗП существует связь между ЗУ и перестройкой поверхности Ферми, приводящей к возникновению щели в спектре носителей заряда. Однако, эксперименты ARPES показали важное отличие ВЗП, возникающей в купратах, от обыкновенной ВЗП, которое проявляется в так называемом нарушении симметрии частица-дырка, или в несовпадении импульса Ферми электронов и дырок [42, 43]. Фаза сверхпроводимости, напротив, часто рассматривалась как конкурирующая с фазой ЗУ вследствие уменьшения интенсивности пика, соответствующего ЗУ, в экспериментах по резонансному рентгеновскому рассеянию в сверхпроводящей фазе. Однако, недавно [9] было сделано предположение об общей природе фаз псевдощели, зарядового упорядочения и сверхпроводимости на основании сходного поведения их критических температур при изменении допирования. Более того, недавно [82] ЗУ было обнаружено в купратах с уровнем допирования выше оптимального и сообщалось об одновременном исчезновении фаз СП и ЗУ при близких уровнях допирования.

Есть и еще одно универсальное для купратных сверхпроводников совпадение, объединяющее фазы СП и ЗУ, - это близкие значения периода ЗУ и длины когерентности в СП состоянии, или размера пары. Это послужило отправной точкой для модели волны плотности пар [88], в которой пара образована делокализованными носителями с определенными не

противоположнонаправленными импульсами. Эта модель, вероятно, является первой попыткой теоретически рассмотреть единую картину, включающую ЗУ и СП фазы, хотя в ней предполагается два различных типа спаривания (Амперовское антинодальное и d -волновое нодальное) и делается предположение, что значения свободной энергии системы в этих фазах близки, которое не подкреплено расчетами. В нашей работе [А3] мы проводим расчет свободной энергии системы, которая рассматривается в рамках другой модели с близкими значениями размера пары и периода ВЗП, и сравниваем ее со свободной энергией системы, соержащей только Ферми-жидкость носителей.

Эта модель - двухжидкостная система, включающая жидкость биполяронов большого радиуса (ББР) (автолокализованных состояний носителей, в которых импульс носителей имеет неопределенность порядка самого импульса), сосуществующих с Ферми-жидкостью делокализованных носителей. В такой системе температура сверхтекучего (т.е. сверхпроводящего) перехода определяется плотностью биполяронной жидкости и спектром ее элементарных возбуждений [13].

Основанием для рассмотрения такой модели является большая замороженная деформация решетки, наблюдаемая в фазе ВЗП купратов [24]. Следует подчеркнуть, что наблюдаемая деформация решетки в фазе ЗУ купратов не преходящая, как в куперовской паре, а “классическая”, с ненулевыми средними значениями координаты, как в поляроне, где это ее свойство особенно заметно в представлении когерентных состояний [81, 10]. Распад когерентного состояния после фотовозбуждения приводит к появлению широких полос в спектрах ARPES и оптической проводимости (вследствие множественной генерации фононов) [55, 56], подобных наблюдаемым в спектрах купратов [18, 83]. Деформация решетки в ВЗП формируется носителями заряда и в то же время создает для них множественные потенциальные ямы, в которых они локализуются, поэтому обычная ВЗП рассматривалась Фрелихом [89] и Ли, Райсом и Андерсоном [90] на основе гамильтониана Фрелиховского электрон-фононного взаимодействия. Как

отметил Л. Д. Ландау в своей работе [77], если потенциальная яма достаточно глубока, чтобы в ней образовался дискретный уровень, то основным состоянием носителя будет автолокализованное состояние. Если такой дискретный уровень существует в купратах, то в них формируется «ВЗП сильной связи», образованная жидкостью ББР наподобие биполярной жидкости, рассмотренной Эмином [66], но содержащей биполярны обоих знаков заряда. Волновой вектор ЗУ связан с размером биполярона [10]. ВЗП с позиции модели биполярной жидкости можно представить в виде капель биполярной жидкости, напоминающих экситонные капли. Каждая капля представляет область, внутри которой сохраняется ближний порядок, и имеет размер, равный длине когерентности ВЗП, которая в купратах составляет 3-5 периодов ЗУ.

Поскольку длина ВЗП в купратах намного больше размеров элементарной ячейки, то для изучения таких состояний хорошо подходит гамильтониан Фрелиха. Действительно, сильное дальнедействующее (фрелиховское) ЭФВ приводит к автолокализованным состояниям, с размером, много большим, чем элементарная ячейка. Поскольку максимальный импульс носителя в автолокализованном состоянии намного меньше импульса, соответствующего границе первой зоне Бриллюэна (ПЗБ), то при достаточной плотности носителей оставшиеся состояния в ПЗБ занимают делокализованные носители. Они не экранируют ЭФВ, так как для его экранирования делокализованные носители должны быть локализованы внутри области, занимаемой автолокализованными носителями, что запрещено принципом Паули. Таким образом, сосуществование автолокализованных и делокализованных носителей в исследуемых системах происходит при достаточной плотности носителей.

Очевидно, что при допировании, характерном для купратных сверхпроводников, автолокализованные носители с радиусом много большим, чем элементарная ячейка, будут сосуществовать с делокализованными носителями. Деление фазового пространства между ними в соответствии с

принципом Паули является дополнительным источником электронных корреляций. Деление импульсного пространства в основном нормальном состоянии (при $T = 0$) может быть рассмотрено в рамках вариационного подхода. Деление пространства, имеющее место при ненулевой температуре, контролируется функцией распределения, отличающейся от функций распределения для квазичастиц с определенным импульсом, поскольку в автолокализованном состоянии неопределенность импульса носителя близка к среднему абсолютному значению импульса. Описанное разделение импульсного пространства между автолокализованными и делокализованными состояниями можно увидеть в спектрах ARPES как допированных электронами и дырками купратов, так и недопированных исходных соединений [37 - 40, 87]. Все эти спектры демонстрируют спад части дисперсии вблизи ее минимума, называемого «вертикальной дисперсией» или водопадами. Электронные биполяроны занимают в импульсном пространстве область с импульсами от 0 до k_0 . Наблюдаемое в нодальных спектрах ARPES положение вертикальной дисперсии [37 - 40, 87], т. е. значение k_0 (выраженное в типичных для фотомиссионных спектров единицах π/a), действительно совпадает с наблюдаемым в спектрах по резонансному рентгеновскому рассеянию значением периода ЗУ K_{CO} [7] (выраженным в единицах $2\pi/a$, обычно используемых в спектрах рентгеновского рассеяния), как было предсказано в [10]. Очевидно, что «вертикальная дисперсия» в спектрах ARPES свидетельствует о наличии электронных биполяронов. Одновременное присутствие дырочных биполяронов также проявляется в ARPES-спектрах, но при отсутствии пересечения поверхности Ферми при низком допировании.

После интерпретации ВЗП с сильной связью, возникающей в купратах, как проявления жидкости биполяронов большого радиуса, другие упомянутые фазы оказываются естественным образом связанными с ней. Как обсуждалось в разделе 2 и как было показано в нашей работе [A1], в системах с сильным ЭФВ периодический потенциал, создаваемый автолокализованными носителями в фазе ВЗП, приводит к появлению псевдощели в спектре электронов в

антинодальном направлении. Он превращает блоховские квазичастицы в распределенные в пространстве волновые пакеты, в которых импульс носителя различен в областях с различным потенциалом ЗУ. Топология поверхностей постоянной энергии, характерная для купратов с дырочным допированием, делает невозможным распространение РВП со средними импульсами вблизи антинода из-за отсутствия реальных решений уравнений для импульса КЧ в областях с отрицательной потенциальной энергией [A1]. Делокализованные носители с импульсами, далекими от антинода, также становятся «размазанными» в импульсном пространстве за счет дополнительного потенциала ЗУ. Такое уширение кривых импульсного распределения в спектрах ARPES наблюдалось экспериментально и интерпретировалось как открытие «щели спаривания» [84] (эта щель называлась сверхпроводящей щелью, пока не было обнаружено, что эта щель открывается при температурах выше температуры сверхпроводящего перехода [84]). Сверхпроводящая фаза в исследуемой системе, также как и фазы псевдощели и ЗУ, сформирована жидкостью ББР и возникает ниже температуры сверхтекучего перехода в биполярной жидкости. Для расчета температуры сверхтекучего перехода в жидкости ББР мы применяем стандартный метод теории Бозе-жидкости Ландау [13] и спектр элементарных возбуждений жидкости ББР [66].

Ниже мы рассмотрим, какую область занимают области наличия псевдощели, ЗУ и СП на фазовой диаграмме допирование-температура сильно взаимодействующих электрон-фононных систем, и сравним результат с фазовой диаграммой купратных сверхпроводников. Для исследования фазовой диаграммы допированных систем с сильным ЭФВ мы используем ранее построенную функцию распределения носителей заряда в таких системах [64, 65]. Ранее было установлено, что в системах с сильным ЭФВ и высокой плотностью носителей имеет место двухкомпонентное основное нормальное состояние, включающее автолокализованные и делокализованные носители заряда в [10]. Здесь мы изучаем низколежащие возбужденные состояния в таких системах и демонстрируем, что все упомянутые выше фазы имеют место в

сильно взаимодействующих электрон-фоонных системах и занимают на их фазовой диаграмме те же позиции, что и на диаграмме купратов. Таким образом, ниже мы проверяем нашу гипотезу, что свободная энергия системы с жидкостью ББР ниже свободной энергии системы без биполяронов, и что минимум этой энергии определяет равновесный радиус биполяронов (то есть период ЗУ) и температуру “испарения” (распада) биполяронной жидкости.

3.1 Распределение носителей по автолокализованным и делокализованным состояниям в сильновзаимодействующих электрон-фоонных системах с высокой плотностью носителей при $T > 0$

Проблема электропроводности в веществах с сильным (фрёлиховским) взаимодействием носителей заряда с фононами была поставлена Л. Д. Ландау в статье [77], где впервые было предсказано спонтанное нарушение пространственной однородности системы с образованием полярона большого радиуса. Это открытие положило начало новому направлению физики твердого тела — исследованиям поляронов в полупроводниках и диэлектриках. Однако предсказания теории поляронов большого радиуса во многом отличались от экспериментальных результатов (например, поляроны большого радиуса не были обнаружены в щелочно-галогенидных кристаллах, а в других веществах наблюдались только при низких температурах, много меньших энергии связи E_{pol}). Это часто приводило к скептическому отношению к работам по теории поляронов большого радиуса. Причины различий в предсказаниях теории и экспериментальных данных стали понятны только после развития теории поляронов при учете пространственной дисперсии решеточной поляризуемости [70]. В этой теории дисперсия фононов, взаимодействующих с носителем, учтена в виде $\Omega^2(k) = \Omega^2(0) + u^2 k^2$, где u — минимальная фазовая и одновременно максимальная групповая скорость фононов. Это дало возможность показать [78], что зона автолокализованных состояний носителя заряда сильно ограничена по импульсам, вследствие того, что средняя скорость носителя

в автолокализованных состояниях не может превышать максимальной групповой скорости и фоонов, участвующих в формировании этого состояния. В результате энергетическая ширина ΔE этой зоны, согласно [70], значительно меньше E_{pol} . Поэтому у поляронов не может быть большой энергия теплового движения, и, следовательно, они не могут существовать при температурах, сравнимых по величине с их энергией связи E_{pol} .

Если вместе с пространственной дисперсией решеточной поляризуемости учесть также и ограниченность объема V_0 области локализации носителя в поляроне, то естественно сделать вывод о существовании предельной, максимально возможной, плотности поляронов в системе. Ведь по объему V_0 можно определить максимальное значение p_0 импульса носителя в поляроне по соотношению неопределенности, записанному для фазового пространства $\frac{4}{3}\pi p_0^3 = (2\pi\hbar)^3/V_0$, причем во всех веществах с сильным электрон-фоонным взаимодействием $p_0 \gg m^*u$, где m^* — эффективная масса носителя. Поэтому в области пространства, занятой одним поляроном, другой полярон по принципу Паули может оказаться только со средним импульсом носителя, большим p_0 . Но, согласно сказанному выше, средний импульс носителя в поляроне не может быть больше $p_0 \gg m^*u$. Следовательно, с учетом спина носителя плотность поляронов в системе не может превышать величину $2V_0^{-1}$. Возможность автолокализации накладывает ограничения и на заполнение нелокализованных состояний носителей. Нелокализованные носители с импульсами $p < m^*u$ не могут существовать даже в отсутствие поляронов в системе, так как они за время Ω^{-1} (где Ω — частота фоонов, взаимодействие носителя с которыми приводит к его автолокализации) будут переходить в автолокализованные состояния. Иными словами, в системе с сильным ЭФВ такие носители будут очень быстро затухать (время Ω^{-1} обычно порядка 10^{-13} с). В системе с плотностью поляронов $2V_0^{-1}$ не могут по принципу Паули существовать и нелокализованные носители с импульсами

$p < p_0$, так как вся область с $p < p_0$ одночастичного (для носителей) фазового пространства будет уже занята автолокализованными носителями. При стремлении же плотности поляронов в системе к нулю число возможных нелокализованных состояний носителя с $p < p_0$ будет стремиться к $2VV_0^{-1}$, где V — объем системы. Таким образом, мы здесь имеем дело с весьма необычной ситуацией, когда число доступных для частиц состояний одного сорта зависит от числа занятых такими частицами состояний другого сорта. Удобно называть носители с $p < p_0$ «холодными», а с $p > p_0$ — «горячими». Тогда концентрацию $n_0 = 2V_0^{-1}$ можно назвать максимальной концентрацией холодных носителей. Возможность же существования любого горячего носителя никак не ограничена занятостью других состояний.

Поскольку в купратах подвижность носителей в направлении, перпендикулярном проводящей плоскости, пренебрежимо мала, в дальнейших расчетах мы будем рассматривать двумерное пространство импульсов. Все описанные выше особенности распределения носителей по состояниям сохраняются и в двумерном случае. Однако, волновая функция автолокализованных носителей является трехмерной, так как деформация решетки возникает не только в проводящей плоскости [24]. Для двумерного случая соотношение неопределенностей имеет вид

$$2(R_{bip})^2 \pi(\hbar k_0)^2 = (2\pi\hbar)^2, \quad (3.1)$$

откуда максимальный импульс носителя в автолокализованном состоянии $k_0 = \frac{\sqrt{2\pi}}{R_{bip}}$. В (3.1) форма биполярона предполагается квадратной с диагональю $2R_{bip}$.

Такая форма биполярона лучше всего подходит для заполнения пространства при высокой плотности носителей в квазидвумерных системах [10].

Поскольку ВЗП создает потенциальные ямы одинаковой глубины для носителей заряда обоих знаков, то если существует дискретный уровень для электронов, он будет существовать и для дырок. Следовательно, в фазе ВЗП в биполяронной жидкости существуют биполяроны обоих знаков — электронные

и дырочные. В случае дырочного допирования дырочные биполяроны находятся в областях с отрицательным поляризационным зарядом между электронными биполяронами. Заметим, что описанное регулярное заполнение пространства биполяронами распространяется только на области ближнего порядка в биполяронной жидкости («капли»), размер которых в купратах составляет 3-5 периодов $3U$. На рисунке 3.1 показана одна «капля» жидкости ББР с размером (длиной когерентности), равным трем периодам $3U$, где период $3U$ совпадает с диагональю квадрата $2R_{bip}$.

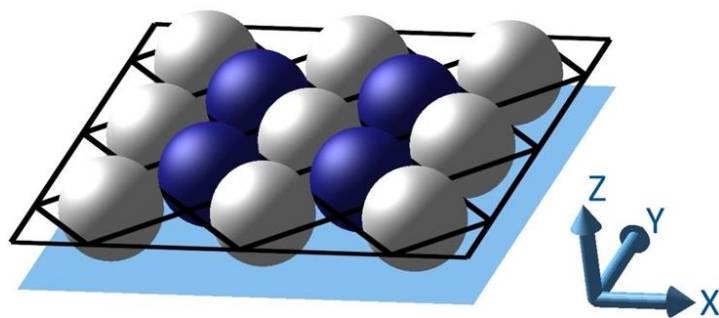


Рисунок 3.1 - Иллюстрация расположения биполяронов в квазидвумерных системах с высокой плотностью носителей на проводящей плоскости (черная рамка) в купратах. Электронные и дырочные биполяроны показаны серым и синим цветом, соответственно. Сечения биполяронов проводящей плоскостью представлены как ромбы с углами 90° и диагоналями, равными $2R_{bip}$.

Указанные выше свойства распределения носителей по состояниям должны быть адекватно отражены в функции распределения. Очевидно, что нельзя пользоваться стандартными функциями распределения по состояниям носителей с определенным импульсом, так как импульс носителя в автолокализованном состоянии имеет неопределенность порядка величины самого импульса. Подходящая функция распределения была построена ранее [64, 65] с использованием метода Гиббса. Для ее получения условия нормировки записывались для подсистемы, имеющей в координатном

пространстве размер, равный размеру биполярона, и соответствующий размер в пространстве импульсов, определяемый из соотношения неопределенности (3.1) и характеризующийся максимальным импульсом k_0 носителя в биполяронном состоянии. Рассмотрим свойства системы, в которой могут сосуществовать автолокализованные и делокализованные носители. Зависимость энергии носителя в такой системе от его среднего импульса [70] схематически представлена на рисунке 3.2. В такой системе, как уже указывалось, если биполяроны занимают все возможные состояния, то могут заполняться только нелокализованные состояния носителя с $p > p_0$. В промежуточном случае холодные носители с импульсами $p < p_0$ будут находиться частично в автолокализованном, частично в делокализованном состояниях.

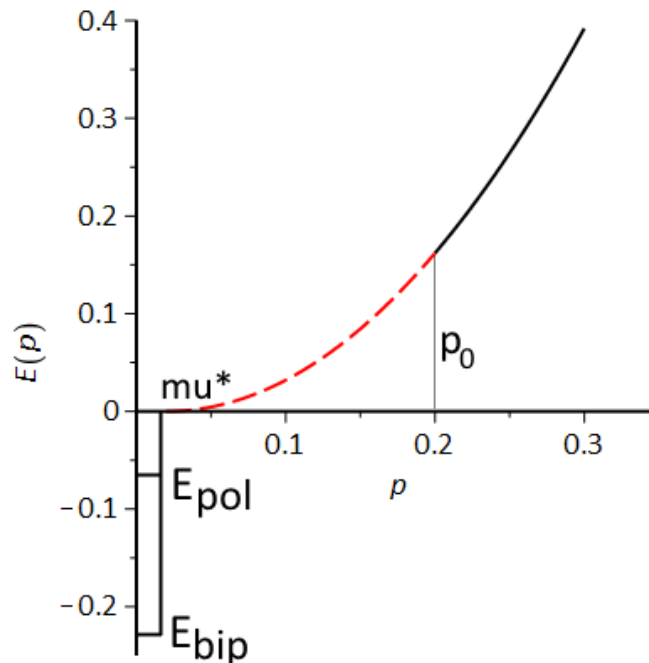


Рисунок 3.2 - Дисперсия носителя в системе с сильным ЭФВ при высокой плотности носителей. Штрихованной линией показана часть зоны с $k < k_0 = p_0/\hbar$, которая не может быть заполнена, если все автолокализованные состояния заняты. Энергия связи полярона $E_{pol} = -0.06$ эВ, биполярона $E_{bip} = -0.24$ эВ, обе энергии построены для $R_{bip} = 7 \text{ \AA}$, $\epsilon_0 = 30$, $(\epsilon^*)^{-1} = 0.3$.

Рассмотрим возможные состояния подсистемы, занимающей площадь $(2\pi\hbar)^2$ и находящейся как в координатном пространстве (в площади биполярона $S_0 = 2(R_{bip})^2$), так и в импульсном пространстве (в круге радиусом p_0 , определяемом уравнением (3.1)). Описанная подсистема может иметь числа заполнения носителями $N = 0, 1$ или 2 (в последнем случае спины носителей антипараллельны), так что мы должны рассматривать ее как большой канонический ансамбль. Вклад в условие нормировки случая $N = 0$ очевиден. Для $N = 1$ состояние может быть занято поляроном или одним делокализованным носителем (ДН) или частично поляроном и частично ДН, что учтено при интегрировании по числам заполнения от 0 до 1. Для $N = 2$ площадь S_0 может быть занята одним биполяроном или двумя взаимодействующими поляронами или одним поляроном и одним ДН или двумя ДН с антипараллельными спинами. Кроме того, площадь S_0 могут делить все эти четыре типа состояний, что учтено при интегрировании от 0 до 2.

Условие нормировки для распределения холодных носителей имеет вид

$$\begin{aligned}
 & e^{\frac{\Omega}{kT}} \left\{ 1 + e^{\frac{\mu}{kT}} \int_0^1 dN_1 [N_1 J_{pol} + (1 - N_1) J_{deloc}] \right. \\
 & + e^{\frac{2\mu}{kT}} \int_0^2 dN_1 \int_0^{2-N_1} dN_2 \int_0^{2-N_1-N_2} dN_3 \left[e^{-\frac{E_C}{kT}} J_{pol}^2 N_1 + J_{deloc}^2 N_2 \right. \\
 & \left. \left. + J_{pol} J_{deloc} N_3 + (2 - N_1 - N_2 - N_3) J_{bip}^2 \right] \right\} = 1
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

где

$$J_{pol} = \frac{S_0(2\pi - 8\varphi_0)}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{m^*u} e^{-\frac{E_{pol} + \varepsilon(p)M_{pol}^*/m^*}{kT}} p dp \tag{3.3}$$

$$J_{deloc} = \frac{S_0(2\pi - 8\varphi_0)}{(2\pi\hbar)^2} \int_{m^*u}^{p_0} e^{-\frac{\varepsilon(p)}{kT}} p dp \quad (3.4)$$

$$J_{bip} = \frac{S_0(2\pi - 8\varphi_0)}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{m^*u} e^{-\frac{E_{bip} + \varepsilon(p)M_{bip}^*/m^*}{2kT}} p dp \quad (3.5)$$

Здесь Ω - термодинамический потенциал, E_C - энергия кулоновского взаимодействия двух поляронов, занимающих один и тот же объем, φ_0 - угол поверхности Ферми, ограничивающий запрещенные вследствие образования псевдощели области, который равен нулю в функции распределения для электронов, а в функции распределения для дырок вычисляется с использованием дырочноподобной дисперсии, как будет пояснено ниже. E_{pol} , E_{bip} , M_{pol}^* , M_{bip}^* - энергии связи полярона и биполарона, которые определяются ниже, и эффективные массы полярона и биполарона соответственно, $\varepsilon(p)$ - дисперсия носителей относительно их минимальной энергии. В распределении (3.2) учтено, что средняя скорость носителя в автолокализованном состоянии ограничена максимальной групповой скоростью u фононов, участвующих в их формировании, поскольку они представляют собой два связанных волновых пакета поля носителя заряда и поляризованного поля [70, 81]. Следует заметить, что в (3.3-3.5) переменной p обозначен средний, а не мгновенный импульс носителя, поскольку в автолокализованных состояниях, как уже говорилось, мгновенный импульс носителя имеет неопределенность порядка его самого, а в делокализованном состоянии средний и мгновенный импульсы совпадают.

Соотношение $\bar{n} = -\partial\Omega/\partial\mu$ дает следующие выражения для среднего числа носителей в области S_0 в автолокализованном и делокализованном холодном состоянии:

$$n_{bip} = \frac{2}{3} e^{\frac{2\mu}{kT}} J_{bip}^2 Z^{-1} \quad (3.6)$$

$$n_{pol} = \frac{1}{2} Z^{-1} J_{pol} e^{\frac{\mu}{kT}} + \frac{4}{3} Z^{-1} (J_{deloc}^2 + J_{pol} J_{deloc}/2) e^{\frac{2\mu}{kT}} \quad (3.7)$$

$$n_{cold\ deloc} = \frac{1}{2}Z^{-1}J_{deloc}e^{\frac{\mu}{kT}} + \frac{4}{3}Z^{-1}(J_{bip}^2 + J_{pol}J_{deloc}/2) \quad (3.8)$$

где $Z = 1 + \frac{1}{2}e^{\frac{\mu}{kT}}(J_{pol} + J_{deloc}) + \frac{2}{3}e^{\frac{2\mu}{kT}}\left(e^{-\frac{E_C}{kT}}J_{pol}^2 + J_{deloc}^2 + J_{pol}J_{deloc} + J_{bip}^2\right)$ – статистическая сумма.

Уравнение для химического потенциала имеет вид

$$n_{pol}(\mu, p, T) + n_{bip}(\mu, p, T) + n_{cold\ deloc}(\mu, p, T) + n_{hot}(\mu, p, T) = n(p) \quad (3.9)$$

где $n_{hot}(\mu, p, T)$ – концентрация горячих носителей, для которых используется распределение Ферми, а $n(p)$ – полная концентрация носителей в системе. Это уравнение решается отдельно для химпотенциала электронных и дырочных носителей, с той разницей, что в первом случае n – это концентрация дырок $n_{hol} = \frac{p}{a^2}$, а во втором – концентрация электронов $n_{el} = \frac{1}{a^2}$, где p – допирование, a – постоянная решетки. Единица в выражении для n_{el} показывает, что зона электронов заполнена полностью.

Теперь найдем энергии связи полярона E_{pol} и биполярона E_{bip} , входящие в (3.3) и (3.5). Когда плотность носителей в системе высока, E_{pol} и E_{bip} могут зависеть от плотности носителей из-за ограничения размера автолокализованного состояния. Действительно, пересечение биполяронов и поляронов, в которых носители имеют одинаковые проекции спина, запрещено правилом Паули. Чтобы найти зависимость $E_{bip}(R_{bip})$, которая показана на рисунке 3.4 (b) для разных параметров системы, мы применили вариационный метод с условием фиксированного радиуса, разработанный в [10], в котором вычисляется минимум среднего значения биполяронного гамильтониана Фрёлиха:

$$H = \sum_{i=1}^2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_{r_i} - \sum_k \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V\varepsilon^*}} [b_k e^{ikr_i} + b_k^+ e^{-ikr_i}] \right) \quad (3.10)$$

$$+ \sum_k \hbar\omega_k b_k^+ b_k + \frac{e^2}{\varepsilon_\infty} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

где m^* - эффективная масса электрона, r_i - радиус-вектор i -го электрона, $\hbar\omega_k$ - энергия фонона с волновым вектором k , $(\epsilon^*)^{-1}$ и ϵ_∞ - обратная эффективная и высокочастотная диэлектрическая проницаемость, соответственно.

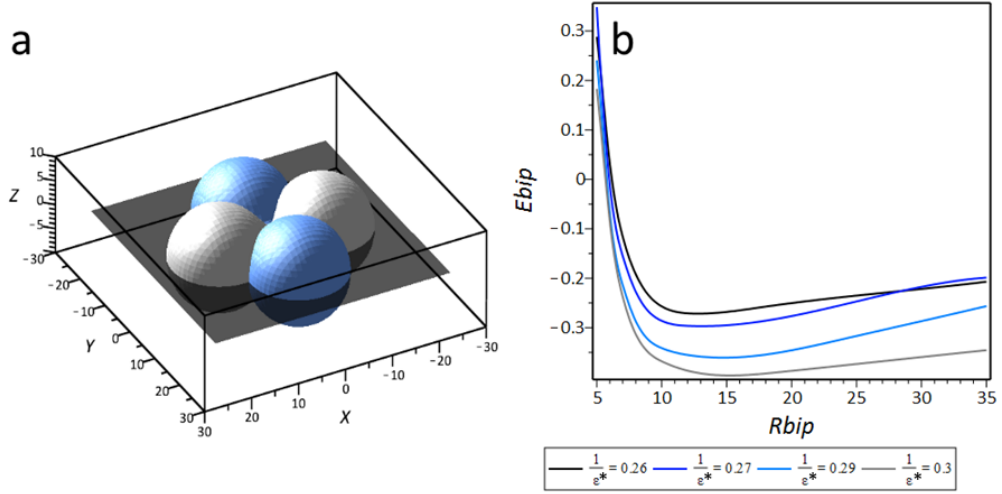


Рисунок 3.4 - (а) Пробная волновая функция [79] (б) Рассчитанная зависимость энергии связи биполярона от его радиуса, полученная условным вариационным методом для разных значений $(\epsilon^*)^{-1}$. Расстояние между проводящими плоскостями $h = 6.6 \text{ \AA}$, $\epsilon_0 = 30$.

В качестве пробной волновой функции была выбрана функция, предложенная Эмином в [79]. После модификации для трехмерного пространства она приобрела вид:

$$\psi = \phi_{x1}\phi_{y2} + \phi_{x2}\phi_{y1} \quad (3.11)$$

$$\phi_{xi} = e^{-\frac{x_i^2 + y_i^2 + (gz_i)^2}{2R^2}} \cosh\left(\frac{lx_i}{R^2}\right)$$

$$\phi_{yi} = e^{-\frac{x_i^2 + y_i^2 + (gz_i)^2}{2R^2}} \cosh\left(\frac{ly_i}{R^2}\right)$$

В утрированном виде она имеет форму четырех пересекающихся «шариков», как показано на рисунке 3.4 (а). Вариационными параметрами в данном методе выступают величины R , l , и g , имеющие смысл радиуса одного «шарика», расстояния между соседними шариками и степень размазки по вертикали, соответственно. Центры шариков разведены из-за кулоновского отталкивания носителей заряда. В настоящем вариационном методе

используется условие фиксированного радиуса биполярона, определяемого как половина стороны такого квадрата, в котором сосредоточено 90% плотности поляризационного заряда: $\int_{V_{bip}} |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = 0.9$.

Для полярона использовалась простейшая пробная функция с одним параметром, так что для получения зависимости $E_{pol}(R_{pol})$ минимизация не потребовалась. Однако, как показывает расчет, при допировании, характерном для сверхпроводящих купратов, биполяроны вытесняют поляроны при любых температурах, так как в таких системах они энергетически более выгодны.

Используя полученные концентрации и энергию связи биполярона, можно определить свободную энергию системы F , состоящей из холодных и горячих носителей заряда. Однако, необходимо заметить, что псевдощель, то есть отсутствие состояний делокализованных носителей с импульсами вблизи антинода, влияет на их энергию $E_{hot}(p, T)$, входящую в F . Поэтому перед нахождением свободной энергии вычислим поправку к ней, определяемую размером псевдощели.

3.2 Изменение свободной энергии вследствие образования псевдощели

Для вычисления поправки к полной энергии системы, возникающей из-за открытия псевдощели, рассмотрим дисперсию носителей заряда, характерную для дырочнодопированных купратов. Поместим минимум энергии электронов в точку Γ первой зоны Бриллюэна и будем считать, что дисперсия электронов вблизи минимума подчиняется параболическому закону: $\varepsilon_{el}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$. Состояния дырок с минимальной энергией лежат на четырех арках с центрами в точках $(\mp\pi/a, \mp\pi/a)$ в ПЗБ, одна из которых показана на рисунке 3.5 (b). Вблизи минимума энергии дырок будем пользоваться смоделированной в разделе 2 [A1] дисперсией, учитывающей известные из эксперимента особенности дырочной дисперсии в купратах:

$$\varepsilon_{hol}(k') = c(k' - k'_{min})^d, \quad (3.12)$$

где k' — радиус кривой постоянной энергии, которая представляет собой дугу окружности с центром в $(\pi/a, \pi/a)$, k'_{min} — радиус кривой постоянной энергии, соответствующей минимуму энергии дырок, который будет найден ниже, c и d — параметры. В дальнейших расчетах мы используем $d = 2$ и $c = 3,89$ (для энергии в эВ и k' в $\text{\AA}^{-1}$), что соответствует параболической дисперсии с единичной эффективной массой дырки вблизи ее минимальной энергии.

Вид функции (3.12) позволяет учесть плоский характер дисперсии дырок вблизи антинода [71], наблюдаемый в купратах, и легко рассчитать энергии связи дырочных поляронов и биполяронов. Рисунок 3.5 (а) демонстрирует дисперсию (3.12) вместе с параболической дисперсией электронов вблизи дна зоны. Значение энергии Ферми при нулевом p выбрано таким образом, чтобы обеспечить плавную связь между электронной и дырочной дисперсиями в нодальном направлении. Следует отметить, что энергии допированных дырок, а также энергии электронов, учитываемые при изменении свободной энергии системы, не выходят за пределы изображенных на рисунке 3.5 (а) областей их параболической (для электронов) и квазипараболической (для дырок) дисперсии.

Заметим, что при нулевом допировании в купратах заполнена только половина зоны Бриллюэна. Вследствие топологии поверхностей постоянной энергии в купратах, область, заполненная электронами, имеет площадь, равную половине площади ПЗБ, $1/4$ ее часть имеет форму, показанную голубым цветом на рисунке 3.5 (b). Другая область, имеющая вид четверти круга с радиусом $k'_{1/2}$, соответствующим сечению с энергией Ферми при $p = 0$, не заполнена. Согласно модели Хаббарда, это происходит вследствие сильного отталкивания между электронами на одном узле меди в плоскостях CuO , что приводит к образованию запрещенной энергетической зоны (примерно 1.5 эВ).

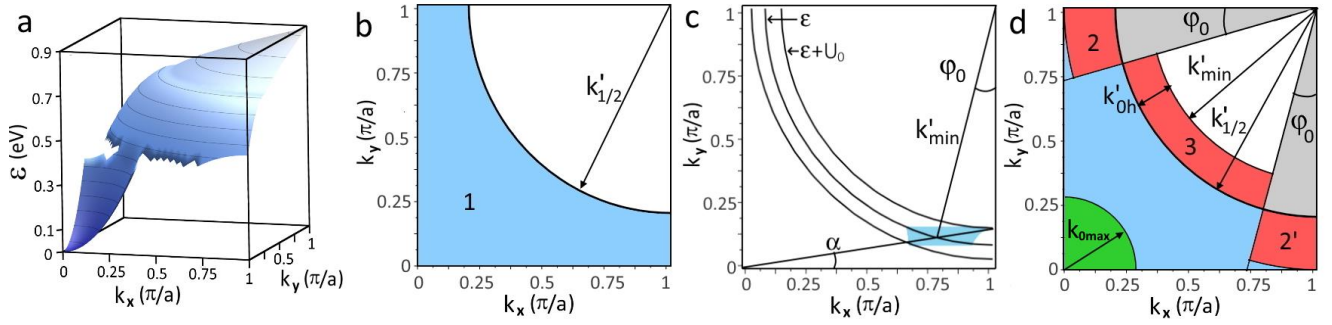


Рисунок 3.5 - (а) Модель дисперсии, характерной для дырочно-допированных купратов; (б) Заполнение состояний в первой зоне Бриллюэна при $p = 0$ в отсутствие псевдощели. Электроны занимают голубую область 1, белая область не заполнена; (с) Определение угла поверхности Ферми φ_0 как угловой координаты пересечения кривой $E = \text{Const}$ с прямой, проходящей через начало координат и точку пересечения кривой $E + U_0 = \text{Const}$ с границей ПЗБ. Голубым показана траектория квазичастицы с энергией E и средним импульсом $k'_{\min}$; (d) Иллюстрация смещения поверхности Ферми при нулевом допировании, обусловленного открытием псевдощели, из положения, определяемого радиусом $k'_{1/2}$, в положение с радиусом $k'_{\min}$ вследствие перехода состояний из запрещенных областей 2 и 2' в область 3. Зеленым цветом выделена область пространства импульсов, которую могут занимать автолокализованные электроны.

Для учета изменения свободной энергии системы вследствие открытия псевдощели вычислим так называемый угол поверхности Ферми φ_0 , ограничивающий область существования квазичастиц – распределенных волновых пакетов, показанный на рисунке 3.5 (с). Как показывает расчет, проведенный в нашей работе [A1], φ_0 можно приближенно вычислить как угловую координату пересечения кривой постоянной энергии $E = \text{Const}$ и линии, проходящей через начало координат и точку, где кривая постоянной энергии $E + U_0$ пересекает границу ПЗБ. Очевидно, значение φ_0 зависит от дисперсии носителей, определяющей расстояние между кривыми постоянной энергии E и $E + U_0$, и от амплитуды U_0 потенциала ЗУ. Величина U_0

получается как амплитуда суммы потенциалов, создаваемых несколькими (8 в данном расчете) проводящими слоями с гармоническим распределением плотности заряда и с полным зарядом биполярона $2e/\epsilon_0$. Очевидно, что величина U_0 зависит от длины волны ВЗП, т.е. от размера биполярона. Полученное значение U_0 практически совпадает с потенциалом в центре однородно заряженного шара радиуса R_{bip} с полным зарядом $2e/\epsilon_0$.

Радиус области импульсного пространства, которую могут занимать автолокализованные электроны, есть наибольшее возможное значение максимального импульса носителя k_0 в биполяроне $k_{0max} = \frac{\sqrt{2\pi}}{R_{min}}$, где R_{min} – минимально возможный радиус биполярона, при котором энергия связи $E_{bip}(R_{min})$ близка к нулю, но еще отрицательна (см. рисунок 3.4 (b)). В этой области энергий электронов, как уже говорилось, подходит параболическое приближение электронной дисперсии. Из рисунка 3.5 (d) видно, что запрещенные области, определяемые углом φ_0 , не касаются области расположения автолокализованных электронов.

Поскольку значение φ_0 зависит от значения U_0 , приращение энергии системы за счет открытия псевдощели должно зависеть от радиуса биполярона. Это приращение легко вычислить, используя функцию (3.12) для области дырочной дисперсии. Открытие псевдощели приводит к отсутствию стационарных состояний носителей со средними импульсами в областях 2 и 2', показанных серым цветом на рисунке 3.5 (d). Вместо этого носители занимают область над поверхностью Ферми (отмеченную цифрой 3). Вычисляя площадь $S_2 + S_{2'}$, занимаемую состояниями, исчезающими при открытии псевдощели, и приравнявая ее к площади S_3 , получаем положение k'_{min} поверхности Ферми при нулевом допировании в присутствии псевдощели:

$$k'_{min} = \left(k'_{1/2}{}^2 - \left[\left(\frac{\pi}{a} \right)^2 - k'_{1/2}{}^2 \right] \frac{8\varphi_0}{2\pi - 8\varphi_0} \right)^{1/2} \quad (3.13)$$

Тогда можно рассчитать приращение энергии системы за счет псевдощели, используя дисперсию (3.12):

$$\Delta E^{PG} = \frac{2}{(2\pi)^2} \left(\int_{k'_{min}}^{k'_{1/2}} (\varepsilon_{hol}(k') - \varepsilon_{hol}(k'_{min})) k' dk' (2\pi - 8\varphi_0) - \int_{k'_{1/2}}^{\frac{\pi}{a}} (\varepsilon_{hol}(k') - \varepsilon_{hol}(k'_{min})) k' dk' 8\varphi_0 \right), \quad (3.14)$$

где 2 обусловлено спинами, и определить максимальный импульс k'_{0h} дырки в дырочном биполяроне из соотношения неопределенности:

$$(\pi - 4\varphi_0)[(k'_{min} + k'_{0h})^2 - k'^2_{min}] 2R^2_{bip} = (2\pi)^2,$$

откуда

$$k'_{0h} = \sqrt{k'^2_{min} + \frac{2\pi}{R^2_{bip}(1 - \frac{4\varphi_0}{\pi})}} - k'_{min} \quad (3.15)$$

Из-за топологии дисперсии, определяющей положение дуг постоянной энергии, значение φ_0 слабо зависит от волнового вектора, как обсуждалось в нашей работе [A1], но для простоты мы используем среднее значение φ_0 , рассчитанное для среднего значения энергии носителя $\overline{E_{el}}$. Выбор энергии (или, что то же, радиуса арки), для которой рассчитывается среднее значение угла φ_0 , влияет на получаемые $\varphi_0(R_{bip})$ и, таким образом, на ΔE^{PG} . Однако произвол выбора средней энергии компенсируется произволом выбора решеточной поляризуемости, задаваемой параметром $(\varepsilon^*)^{-1}$.

3.3 Вариация свободной энергии системы с допированной нижней зоной Хаббарда

Теперь перейдем к расчету свободной энергии системы с сильным ЭФВ и высокой плотностью носителей заряда. Как показывает среднее значение гамильтониана (3.10) в состоянии с волновой функцией (3.11), волновой пакет поляризационного поля сформирован волновым пакетом поля носителей заряда, и имеет тот же размер и локализован в той же области, что и волновой пакет поля носителей. Таким образом, вследствие локальности связанных волновых пакетов поля носителей и поля поляризации, образующих биполярон,

энергия биполярной жидкости является аддитивной величиной, если пренебречь взаимодействием биполяронов.

Как упоминалось в предыдущем разделе, своеобразие диэлектриков Мотта-Хаббарда, которыми являются купраты, приводит к расположению дырочных состояний с минимальной энергией не в точках $(\mp\pi/a, \mp\pi/a)$ первой зоны Бриллюэна, а на дугах, делящих каждый квадрант ПЗБ на две равные области (при отсутствии биполяронов и связанной с ними псевдощели). Все точки импульсного пространства на этих дугах соответствуют минимальной энергии дырок. Обобщение результата Латтинджера-Кона [86], расширяющего применимость приближения эффективной массы к системам, в которых дисперсия носителей имеет несколько минимумов, на случай бесконечного числа k -точек с минимальной энергией, и использование дисперсии (3.12) позволяет рассматривать одну и ту же энергию связи в зависимости от радиуса как для дырочного, так и для электронного биполяронов. Метод позволяет использовать разные эффективные массы для электронов и дырок, но ниже для простоты мы будем рассматривать единичную эффективную массу для обоих типов носителей вблизи их минимальной энергии.

Используя полученную в разделе 3.1 энергию связи биполярона как функцию его радиуса, мы рассчитываем плотность носителей во всех состояниях путем минимизации свободной энергии системы при заданной температуре, где в качестве вариационного параметра выступает радиус биполярона. При минимизации свободной энергии системы необходимо учитывать, что исследуемая система имеет особенности, связанные с заполнением состояний носителей в ПЗБ. Действительно, дырки обычно рассматриваются на вершине заполненной электронами зоны, а электроны обычно не рассматриваются в системах с дырочными носителями. Однако свободная энергия исследуемой системы меняется в зависимости от того, открыта или нет псевдощель в спектре носителей, как это описывается уравнением (3.14), и есть ли в системе электронные биполяроны. Поэтому,

минимизируя свободную энергию системы при фиксированной температуре, помимо энергии дырочных биполяронов и делокализованных дырок, нужно учитывать разницу в энергиях электронных биполяронов и делокализованных электронов в одной и той же области импульсного пространства вблизи дна зоны, размер которой определяется радиусом k_{0max} .

Площадь $2R_{bip}^2$, занимаемая электронным биполяроном, вместе с площадью $2R_{bip}^2$, занимаемой дырочным биполяроном, образуют «элементарную ячейку» ближнего порядка биполярной жидкости площадью $4R_{bip}^2$. Это наименьшая площадь, плотность свободной энергии которой должна быть минимизирована. Таким образом, плотность свободной энергии системы, которую необходимо минимизировать при фиксированной температуре,

$$F = \frac{(n_{bip}^h + n_{bip}^{el})E_{bip} + E_{coldel}^h + E_{coldel}^{el}}{4R_{bip}^2} + E_{hot}^h + E_{hot}^{el} + \Delta E_{PG} + E_{int} \quad (3.16)$$

включает плотность энергии холодных и горячих дырок, плотность энергии холодных и горячих электронов с импульсами до k_{0max} , приращение (3.14) плотности энергии электронов при наличии псевдощели и плотность энергии межбиполярного взаимодействия.

Кинетической энергией биполяронов в (3.16) пренебрегается. Конечно, мы считаем биполяроны присутствующими только в том случае, если плотность свободной энергии системы с биполяронами ниже, чем плотность свободной энергии всех дырок и электронов с импульсами до k_{0max} в системе без биполяронов. Взаимодействие между биполяронами экранируется ϵ_0 , которая в рассматриваемых системах высока, так что энергия взаимодействия мала по сравнению с другими энергиями, тем не менее мы учитываем ее в приближении среднего поля. Потенциал, создаваемый биполяронами, оценивается как потенциал точечных зарядов $2e/\epsilon_0$, находящихся в средних положениях центров биполяронов.

3.4 Спектр возбуждений биполяронной жидкости и расчет температуры сверхпроводящего перехода

Для определения температуры бозе-конденсации биполяронной жидкости применим стандартный метод теории бозе-жидкости [13]. Сначала вычисляется импульс P_n (на единицу площади проводящего слоя в рассматриваемой квазидвумерной системе) нормальной части Бозе-жидкости при малой скорости жидкости v . Импульс зависит от спектра элементарных возбуждений $\zeta(k)$ бозе-жидкости и температуры [13]:

$$P_n = \int \hbar k n(\zeta - \hbar(kv)) \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \approx -\frac{v\hbar^2}{2} \int k^2 \frac{\partial n}{\partial \zeta} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \quad (3.19)$$

где используется разложение бозе-распределения $n(\zeta - \mathbf{p}\mathbf{v})$, допустимое при малых v , и система предполагается изотропной. Отношение импульса (10) к скорости жидкости v представляет собой массу нормальной компоненты жидкости (на единицу площади одного слоя CuO). Разделив ее на эффективную массу биполярона M_{bip}^* , получим плотность (в одном слое) биполяронов в Бозе-паре при данной температуре:

$$n_{var} = \frac{\hbar^2}{4\pi M_{bip}^* k_B T} \int_0^{K_{co}} \frac{e^{\zeta/k_B T}}{(e^{\zeta/k_B T} - 1)^2} k^3 dk \quad (3.20)$$

Если плотность биполяронов в слое CuO превышает их количество в Бозе-паре, избыточные биполяроны конденсируются. Таким образом, сравнивая плотность биполяронов в Бозе-паре (3.20) с их полной плотностью $n_{bip}(p, T)$, определяемой из функции распределения для размера биполярона, соответствующего наименьшей свободной энергии системы, получаем температуру сверхтекучего перехода.

Для применения этого метода необходимо знать спектр элементарных возбуждений жидкости биполяронов большого радиуса. Ранее спектр элементарных возбуждений биполяронной жидкости был получен [66] для системы биполяронов одного знака стандартным методом расчета низкоэнергетических возбуждений Бозе-газа низкой плотности [13]

посредством фурье-преобразования межбиполяронного взаимодействия. Межбиполяронные взаимодействия, рассмотренные в [66], представляли собой дальнодействующее кулоновское взаимодействие и короткодействующее отталкивание биполяронов, обусловленное правилом запрета Паули. В исследуемой системе присутствуют биполяроны с противоположным зарядом. Учет этого факта приводит к компенсации отталкивающих и притягивающих кулоновских взаимодействий, и единственным членом, остающимся в межбиполяронном взаимодействии, является короткодействующее отталкивание. Соответственно, в спектре, полученном в [66], сохраняется только соответствующий член под квадратным корнем (возникающий из-за короткодействующего отталкивания биполяронов из-за правила запрета Паули):

$$\zeta(k) = \sqrt{\frac{2\pi n_{bip}(\hbar k)^2}{M_{bip}^*} \left(\frac{2e^2 R_{bip}}{\epsilon_\infty} \right) \frac{1}{[1 + (2kR_{bip})^2]^{3/2}}} \quad (3.21)$$

На рисунке 3.6 (а) представлен пример спектра низкоэнергетических возбуждений (3.21) биполяронной жидкости, он напоминает фазонные возбуждения ВЗП [25]. Конечно, спектр (3.21) является лишь первым приближением, предназначенным для описания самых низкоэнергетических возбуждений, определяющих в основном температуру сверхтекучего перехода. Более изощренное рассмотрение может уточнить или дополнить его, например, некоторыми ротоно-подобными возбуждениями, подобными тому, что происходит в жидком He^4 и в конденсатах ультрахолодных атомов. Оптическая фононная (или амплитудон-подобная) ветвь возбуждений лежит выше звуковой (или фазонной) [25], так что такие возбуждения имеют слишком большую энергию, чтобы вносить заметный вклад в распад сверхтекучего состояния биполяронной жидкости, как это происходит при достаточно низких температурах. Очевидно, дополнительная ветвь возбуждений жидкости или дополнительный минимум на имеющейся ветви звуковых возбуждений приведет к повышению температуры сверхтекучего перехода.

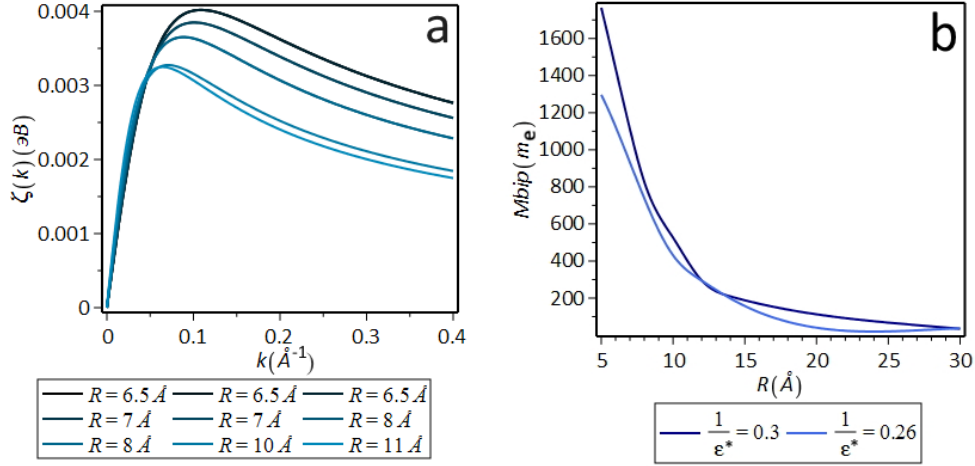


Рисунок 3.6 - (а) Спектр низкоэнергетических возбуждений биполяронной жидкости, полученный на основе спектра [66], при уровне допирования $p = 0.2$ и разных значениях равновесного радиуса биполярона; $\epsilon_0 = 30$, $(\epsilon^*)^{-1} = 0.3$; (б) Эффективная масса биполярона в единицах массы электрона как функция радиуса биполярона, рассчитанная с помощью (3.22) для $(\epsilon^*)^{-1} = 0.26$ и 0.25 при $\epsilon_0 = 30$.

Расчет по уравнениям (3.20), (3.21) показывает, что величина эффективной массы биполярона слабо влияет на плотность биполяронов в паре и температуру бозе-конденсации и не влияет на плотность биполярона. Эффективная масса биполярона легко выражается аналогично эффективной массе полярона большого радиуса [91, 81] через преобразование Фурье $\eta(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ квадрата модуля волновой функции носителя $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ в биполяроне:

$$M_{bip}^* = \frac{2e^2}{3\pi^2 \epsilon^* \Omega^2} \int [\eta(\mathbf{k}, 0) + \eta(0, \mathbf{k})]^2 d^3k \quad (3.22)$$

где Ω — средняя частота фононов, взаимодействующих с носителем заряда, $\eta(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \int |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \exp(i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2$, и пространственной дисперсией поляризуемости решетки пренебрегается. На рисунке 3.6 (б) приведена рассчитанная зависимость M_{bip}^* от радиуса биполярона R_{bip} для двух различных значений $(\epsilon^*)^{-1}$.

3.5 Фазовая диаграмма, плотность сверхтекучей компоненты и волновой вектор зарядового упорядочения

Расчет показывает [A3], что ниже определенной температуры и в определенном интервале допирования система, в которой присутствует жидкость биполяронов большого радиуса, имеет свободную энергию ниже, чем свободная энергия системы без биполяронной жидкости. Таким образом, на фазовой диаграмме рассматриваемой системы в координатах температура-допирование имеются три физически различные фазы, расположенные в той области допирования, где существует сверхпроводимость (то есть выше $p = 0.05$): это фаза без биполяронной жидкости с наличием только ферми-жидкости (см. рисунок 3.7 (а)-(f), область выше и правее линии T^*), фаза с нормальной компонентой биполяронной жидкости и ферми-жидкостью делокализованных носителей (область между линиями $T_{3у}$ и T^*), и фаза с присутствием как нормальной, так и сверхтекучей компонент биполяронной жидкости вместе с ферми-жидкостью делокализованных носителей (область ниже кривой T_c). Место на фазовой диаграмме рассматриваемой системы, где наблюдается псевдощель, совпадает с областью существования биполяронной жидкости, определяемой минимизацией свободной энергии системы, пока уровень допирования соответствует дырочноподобной дисперсии. Действительно, когда при увеличении допирования дисперсия становится электроноподобной, псевдощель, обусловленная топологией дырочноподобной дисперсии в сочетании с дополнительным потенциалом, создаваемым биполяронами [A1], закрывается.

Место на фазовой диаграмме, где наблюдается ЗУ, меньше области, в которой присутствует биполяронная жидкость, поскольку существует некоторое минимальное число биполяронных капель (т.е. областей в жидкости ББР, где существует ближний порядок), необходимое для наблюдения ЗУ в экспериментах. Кроме того, плотность биполяронов, необходимая для наблюдения ЗУ, вызванного биполяронной жидкостью, связана с разрешающей

способностью используемого оборудования. Поэтому указать точную границу появления ЗУ на фазовой диаграмме невозможно. По нашим оценкам, это соответствует наличию 40 – 50% биполяронов от максимально возможного их количества при заданных диэлектрических проницаемостях на нулевой частоте и на высоких частотах (ϵ_0 и ϵ_∞ , соответственно). Максимальная плотность биполяронов в системе выражается как $n_{max} = \frac{1}{4R_{min}^2}$, где R_{min} - наименьший радиус биполярона, при котором энергия связи E_{bip} еще отрицательна. Такое завышение их необходимого количества целесообразно, если не учитывать постепенное уменьшение плотности биполяронов при приближении к температуре, соответствующей равенству свободных энергий системы с биполяронной жидкостью и без нее.

Область фазовой диаграммы рассматриваемой системы, в которой существует бозе-конденсат (сверхтекучая компонента) биполяронной жидкости, рассчитанная с использованием плотности биполяронов (полученной путем минимизации свободной энергии системы) и спектра элементарных возбуждений биполяронной жидкости, согласуется с положением сверхпроводящей фазы на фазовой диаграмме купратов, как это видно из сравнения положения линии T_C на панелях (a-f) рисунка 3.7 с линией T_C на экспериментальной диаграмме (панель g). На рисунке 3.7 показано рассчитанное [A3] положение областей на фазовой диаграмме, где наблюдаются псевдощель, зарядовое упорядочение и сверхпроводимость при двух различных наборах параметров системы и трех разных средних энергиях носителя, использованных для расчета угла открытия псевдощели ϕ_0 . Рассчитанное положение областей согласуется с тем, что наблюдается в купратах.

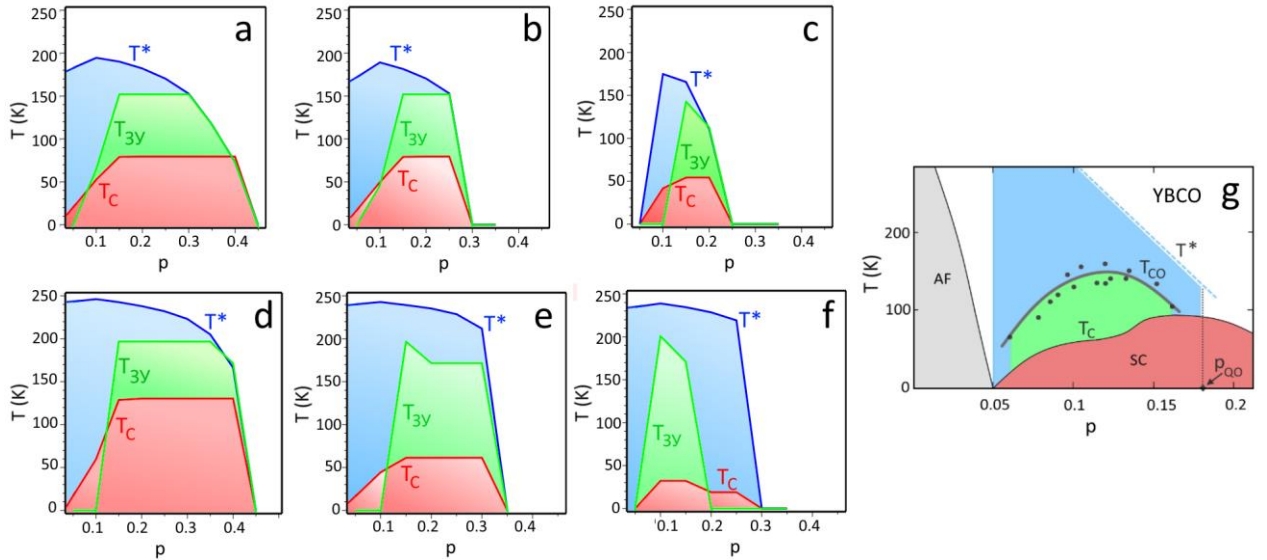


Рисунок 3.7 - (a)-(f) Рассчитанная зависимость критических температур T^* , T_{3y} и T_c от уровня допирования в системах с сильным ЭФВ, построенная для $\epsilon_0 = 30$ и различных средних энергий электронов $\overline{E}_{el}$: (a) 0.56 эВ, (b) и (d) 0.577 эВ, (c) и (e) 0.59 эВ, (f) 0.6 эВ. Параметры системы: (a-c) $(\epsilon^*)^{-1} = 0.26$, $u = 2000$ м/сек; (d-f) $(\epsilon^*)^{-1} = 0.3$, $u = 1000$ м/сек; (g) экспериментальная фазовая диаграмма [7] для ВТСП на основе иттрия.

На рисунке 3.8 представлена рассчитанная [A3] плотность сверхтекучей компоненты биполярной жидкости $n_{cond}(p, T)$ как функция допирования и температуры. Как можно видеть из рисунка, при росте концентрации носителей в системе (допирования) $n_{cond}(p, T)$ линейно убывает, что идет вразрез с положениями теории БКШ, но в согласии с результатами эксперимента на купратах [85], показанными на панели (g). Характер зависимости плотности сверхтекучей компоненты от допирования и температуры в области фазовой диаграммы с допированием выше оптимального будет не таким резким, как на рисунке 3.8, если будет разработан более совершенный метод расчета биполярной плотности. Он должен описывать постепенное уменьшение плотности биполяронов при приближении к температуре, при которой свободные энергии двух фаз (фазы с биполярной жидкостью и фазы с одними делокализованными носителями) совпадают. В методе, используемом в настоящей работе, плотность биполяронов определяется энергией связи

биполярона (вместе с уровнем допирования) и резко падает до нуля, когда энергия системы с биполяронами становится выше энергии системы без них, поскольку это происходит при более низких температурах и уровнях допирования, чем разрушение биполяронов, обусловленное высокой температурой. В усовершенствованной описанным образом модели тепловое разрушение биполяронов при приближении свободной энергии системы с биполяронами к свободной энергии системы без них будет более постепенным. Соответственно, границы фаз псевдощели и ЗУ будут дальше друг от друга.

Зависимость от допирования волнового вектора зарядового упорядочения K_{CO} (линии 1, 2, 3) в сравнении с экспериментальными данными [7] (символы) показана на рисунке 3.9. На каждой из двух панелей все параметры системы одинаковы для всех трех линий, различие в зависимости $K_{CO}(p)$ возникает вследствие использования различных значений энергии $\overline{E}_{el}$, при которой рассчитывается угол открытия псевдощели ϕ_0 . Из рисунка видно, что место линий 1 и 2 на рисунке согласуется с экспериментальными данными для семейств $YBCO$ и $BSCO$, а восходящая часть линии 3 при $p = 0.1 - 0.15$ находится в соответствии с $K_{CO}(p)$, полученным для ВТСП на основе лантана и также повышающимся с ростом допирования в этой области.

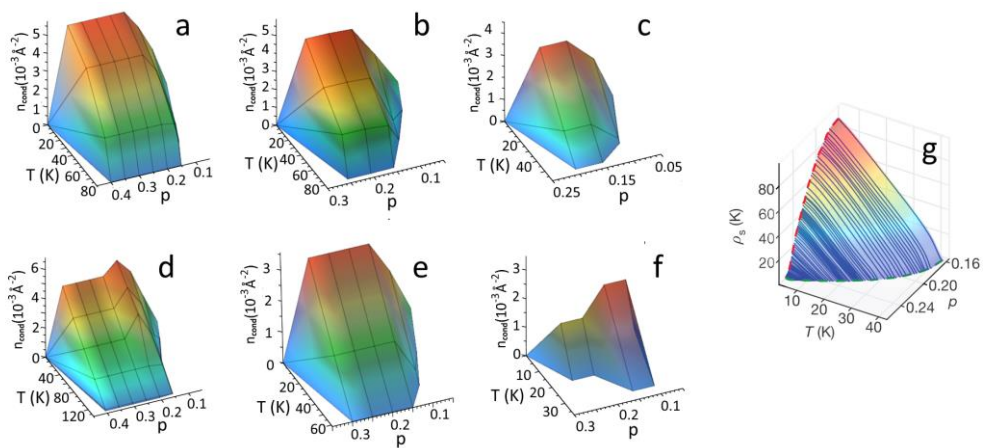


Рисунок 3.8 - Плотность сверхтекучей компоненты, рассчитанная $\epsilon_0 = 30$ и различных средних энергий электронов $\overline{E}_{el}$: (a) 0.56 эВ, (b) и (d) 0.577 эВ, (c) и (e) 0.59 эВ, (f) 0.6 эВ. Параметры системы: (a-c) $(\epsilon^*)^{-1} = 0.26$, $u = 2000$ м/сек;

(d-f) $(\epsilon^*)^{-1} = 0.3$, $u = 1000$ м/сек; (g) экспериментальная «жесткость сверхтекучей фазы» («superfluid phase stiffness») ρ_s , прямо пропорциональная n_{cond} [85].

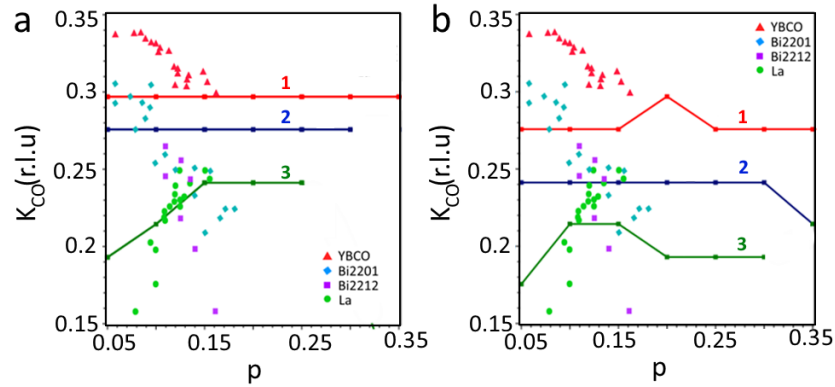


Рисунок 3.9 - Волновой вектор зарядового упорядочения $K_{CO} = \frac{a}{2R_{bip}}$ (r.l.u.),

выраженный в единицах обратной решетки (r.l.u. = $\frac{2\pi}{a}$, a – постоянная решетки) как функция допирования, символы – экспериментальные данные [7].

Радиусы $R_{bip}(p)$ получены минимизацией свободной энергии системы при фиксированной температуре $T=10$ К. Средняя энергия электрона $\overline{E}_{el}$: панель (a):

0.56 эВ (линия 1), 0.577 эВ (2), 0.59 эВ (3), панель (b): 0.577 эВ (линия 1), 0.59 эВ (2), 0.6 эВ (3). Параметры системы: (a) $(\epsilon^*)^{-1} = 0.26$, $u = 2000$ м/сек; (b) $(\epsilon^*)^{-1} = 0.3$, $u = 1000$ м/сек.

Таким образом, можно сформулировать два заключительные *научные положения*, выносимые на защиту:

3. Область на фазовой диаграмме высокодопированных сильно взаимодействующих электрон-фоонных систем в координатах «уровень допирования – температура», в которой наблюдается псевдощель, совпадает с областью существования биполяронной жидкости, граница которой определяется равенством минимизированной по радиусу биполярона свободной энергии системы с биполяронной жидкостью и свободной энергии системы без нее. Область на фазовой диаграмме, в которой наблюдается зарядовое упорядочение, меньше области существования биполяронной жидкости, так как

для наблюдения зарядового упорядочения требуется достаточное количество биполяронных капель. Рассчитанное положение областей существования псевдощели и зарядового упорядочения на фазовой диаграмме совпадает с положением аналогичных фаз, наблюдаемых в купратах.

4. Область на фазовой диаграмме высокодопированных сильно взаимодействующих электрон-фоонных систем в координатах «уровень допирования – температура», в которой существует сверхтекучая компонента биполяронной жидкости, определенная на основе плотности биполяронной жидкости и спектра ее элементарных возбуждений, совпадает с положением сверхпроводящей фазы на фазовой диаграмме купратов. Рассчитанная плотность сверхтекучей компоненты биполяронной жидкости в области допирования выше оптимального (с количеством дырок на атом меди, большим 0.15) уменьшается с ростом допирования в согласии с экспериментами на купратах.

Заключение

Основные результаты диссертации сводятся к следующему:

1. Разработан метод решения уравнения Шрёдингера для получения стационарных состояний делокализованных носителей в высокодопированных системах с сильным (фрёлиховским) электрон-фононным взаимодействием, находящихся в дополнительном потенциале автолокализованных носителей.
2. Показано, что стационарные состояния делокализованных носителей в дополнительном потенциале автолокализованных носителей в высокодопированных системах с сильным электрон-фононным взаимодействием представляют собой распределенные в пространстве волновые пакеты блоховских волн с различными импульсами в областях с различными значениями дополнительного потенциала.
3. Установлено, что влияние потенциала автолокализованных носителей на стационарные состояния делокализованных носителей и топологии дырочно-подобного закона дисперсии приводит к отсутствию стационарных состояний со средними импульсами вблизи антинодального направления, что проявляется в спектрах фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением и сканирующей туннельной спектроскопии как псевдощель;
4. Рассчитан спектр фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением в антинодальном направлении для носителей заряда с купратоподобной дисперсией, находящихся в дополнительном потенциале зарядового упорядочения, который демонстрирует хорошее согласие с экспериментальным фотоэмиссионным спектром дырочно-допированных купратов;
5. Рассчитана величина неоднородности локального потенциала, создаваемого автолокализованными носителями и ионами-допантами, и ее влияние на стационарные состояния делокализованных носителей, что подтверждает возникновение пространственной неоднородности ширины

псевдощели, экспериментально наблюдаемой в системах с неоднородным расположением ионов примесей.

6. Предложена двужидкостная модель, включающая жидкость биполяронов большого радиуса и Ферми-жидкость делокализованных носителей заряда для описания свойств высокодопированных систем с сильным электрон-фононным взаимодействием и развит метод определения области существования двужидкостной системы носителей заряда путем сравнения минимизированной по радиусу биполярона свободной энергии системы с биполяронной жидкостью и свободной энергии системы без нее;

7. Построена фазовая диаграмма «уровень допирования – температура» систем с сильным электрон-фононным взаимодействием, включающая псевдощелевую фазу, фазу волны зарядовой плотности и сверхпроводящую фазу, причем они занимают те же места на фазовой диаграмме, что и соответствующие фазы в купратных сверхпроводниках;

8. Развит и применен метод расчета температуры сверхпроводящего перехода, обусловленного Бозе-конденсацией жидкости биполяронов большого радиуса как функции уровня допирования, на основе спектра элементарных возбуждений биполяронной жидкости.

Список литературы

1. Keimer, B. From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides. / B. Keimer, S. A. Kivelson, M. N. Norman, S. Uchida, J. Zaanen // *Nature*. – 2015. – Vol. 518. – P. 179-186.
2. Wang, Q. Interface-Induced High-Temperature Superconductivity in Single Unit-Cell FeSe Films on SrTiO₃. / Q. Y. Wang, Z. Li, W. H. Zhang, Z. C. Zhang, J. S. Zhang, W. Li, H. Ding, Y. B. Ou, P. Deng, K. Chang, J. Wen, C. L. Song, K. He, J. F. Jia, S. H. Ji, Y. Y. Wang, L. L. Wang, X. Chen, X. C. Ma, Q. K. Xue // *Chin. Phys. Lett.* – 2012. – Vol. 29. – P. 037402.
3. Ge, G. Superconductivity above 100 K in single-layer FeSe films on doped SrTiO₃. / J. F. Ge, Z. L. Liu, C. Liu, C. L. Gao, D. Qian, Q. K. Xue, Y. Liu, J. F. Jia // *Nat. Mater.* – 2015. – Vol. 14. – P. 285-289.
4. Miyata, Y. High-temperature superconductivity in potassium-coated multilayer FeSe thin films. / Y. Miyata, K. Nakayama, K. Sugawara, T. Sato, T. Takahashi // *Nat. Mater.* – 2015. – Vol. 14. – P. 775-779.
5. Bozovic, I. A new frontier for superconductivity. / I. Bozovic and Ch. Ahn // *Nat. Phys.* – 2014. – Vol. 10. – P. 892-895.
6. Song, Q. Evidence of cooperative effect on the enhanced superconducting transition temperature at the FeSe/SrTiO₃ interface. / Q. Song, T. L. Yu, X. Lou, B. P. Xie, H. C. Xu, C. H. P. Wen, Q. Yao, S. Y. Zhang, X. T. Zhu, J. D. Guo, R. Peng, D. L. Feng // *Nat. Commun.* – 2019. – Vol. 10. – P. 758.
7. Comin, R. Resonant X-Ray Scattering Studies of Charge Order in Cuprates. / R. Comin, A. Damascelli // *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* – 2016. – Vol. 7. – P. 369-405.
8. Proust, C. The Remarkable Underlying Ground States of Cuprate Superconductors. / C. Proust, L. Taillefer // *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* – 2019. – Vol. 10. – P. 409.
9. Loret, B. Energy Scale of the Charge Density Wave in Cuprate Superconductors. / B. Loret, N. Auvray, Y. Gallais, M. Cazayous, A. Forget, D.

Colson, M.-H. Julien, I. Paul, M. Civelli, and A. Sacuto // *Nat. Phys.* – 2019. – Vol. 15. – P. 771-775.

10. Myasnikova, A. Strong long-range electron–phonon interaction as possible driving force for charge ordering in cuprates. / A. E. Myasnikova, T. F. Nazdracheva, A. V. Lutsenko, A. V. Dmitriev, A. H. Dzhanemirov, E. A. Zhileeva, and D. V. Moseykin // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2019. – Vol. 31. – P. 235602.

11. Физика сегнетоэлектриков: современный взгляд, под ред. К.М. Рабе, Ч.Г. Ана, Ж.-М. Трискона. М.: БИНОМ. Лаб. Знаний. 2011. – 440 с.

12. Mao, Y. Interfacial polarons in van der Waals heterojunction of monolayer SnSe₂ on SrTiO₃ (001). / Y. Mao, X. Ma, D. Wu, C. Lin, H. Shan, X. Wu, J. Zhao, A. Zhao, and B. Wang // *Nano Lett.* – 2020. – Vol. 20. – P. 8067.

13. Абрикосов, А. А. Методы квантовой теории поля в статистической физике / А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский. – М.: Физматгиз, 1962. – 446 с.

14. Badoux, S. Change of carrier density at the pseudogap critical point of a cuprate superconductor. / S. Badoux, W. Tabis, F. Laliberté, G. Grissonnache, B. Vignolle, D. Vignolles, J. Béard, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud, L. Taillefer, C. Proust. // *Nature.* – 2016. – Vol. 531. – P. 210-214.

15. Shen, Z. Role of the electron-phonon interaction in the strongly correlated cuprate superconductors. / Z.-X. Shen, A. Lanzara, S. Ishihara, N. Nagaosa // *Philos. mag., B.* – 2002. – Vol. 82. – P. 1349-1368.

16. Le Tacon, M. Giant phonon anomalies and central peak due to charge density wave formation in YBa₂Cu₃O_{6.6}. / M. Le Tacon, A. Bosak, S. M. Souliou, G. Dellea, T. Loew, R. Heid, K.-P. Bohnen, G. Ghiringhelli, M. Krisch, B. Keimer // *Nat. Phys.* – 2014. – Vol. 10. – P. 52-58.

17. Reznik, D. Electron-phonon coupling reflecting dynamic charge inhomogeneity in copper oxide superconductors. / D. Reznik, L. Pintschovius, M. Ito, S. Iikubo, M. Sato, H. Goka, M. Fujita, K. Yamada, G. D. Gu, J. M. Tranquada // *Nature.* – 2006. – Vol. 440. – P. 1170-1173.

18. Shen, K. Missing quasiparticles and the chemical potential puzzle in the doping evolution of the cuprate superconductors. / K. M. Shen, D. H. Lu, W. S. Lee, N. J. C. Ingle, W. Meevasana, F. Baumberger, A. Damascelli, N. P. Armitage, L. L. Miller, Y. Kohsaka, M. Azuma, M. Takano, H. Takagi, Z.-X. Shen // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93. – P. 267002.

19. Mishchenko, A. Electron-Phonon coupling and a polaron in the t-J model: from the weak to the strong Coupling Regime. / A. S. Mishchenko and N. Nagaosa // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93. – P. 036402.

20. Rösch, O. Polaronic behavior of undoped high- T_c cuprate superconductors from angle-resolved photoemission spectra. / O. Rösch, O. Gunnarsson, X. J. Zhou, T. Yoshida, T. Sasagawa, A. Fujimori, Z. Hussain, Z.-X. Shen, and S. Uchida // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – Vol. 95. – P. 227002.

21. Myasnikova, A. Relaxation of strongly coupled electron and phonon fields after photoemission and high-energy part of ARPES spectra of cuprates. / A. E. Myasnikova, E. A. Zhileeva and D. V. Moseykin // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2018. – Vol. 30. – P. 125601.

22. Zhu, J. Effects of pairing potential scattering on Fourier-transformed inelastic tunneling spectra of high- T_c cuprate superconductors with bosonic mode. / J. X. Zhu, K. McElroy, J. Lee, T. P. Devereaux, Q. Si, J. C. Davis, and A. V. Balatsky // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97. – P. 177001.

23. Bastiaans, K. Charge trapping and super-Poissonian noise centres in a cuprate superconductor. / K. M. Bastiaans, D. Cho, T. Benschop, I. Battisti, Y. Huang, M. S. Golden, Q. Dong, Y. Jin, J. Zaanen, M. P. Allan // *Nat. Phys.* – 2018. – Vol. 14. – P. 1183-1187.

24. Forgan, E. The microscopic structure of charge density waves in underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.54}$ revealed by X-ray diffraction. / E. M. Forgan, E. Blackburn, A. T. Holmes, A. K. R. Briffa, J. Chang, L. Bouchenoire, S. D. Brown, Ruixing Liang, D. Bonn, W. N. Hardy, N. B. Christensen, M. V. Zimmermann, M. Hücker, S. M. Hayden // *Nat. Commun.* – 2015. – Vol. 6. – P. 10064.

25. Torchinsky, D. Fluctuating charge density waves in a cuprate superconductor. / D. H. Torchinsky, F. Mahmood, A. T. Bollinger, I. Božović and N. Gedik // Nat. Mater. - 2013. – Vol. 12. – P. 387.

26. Blackburn, E. Inelastic x-ray study of phonon broadening and charge-density wave formation in ortho-II-ordered YBaCuO. / E. Blackburn, J. Chang, A. H. Said, B. M. Leu, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, E. M. Forgan, and S. M. Hayden // Phys. Rev. B. – 2013. – Vol. 88. – P. 054506.

27. Hinton, J. New collective mode in YBaCuO observed by time-domain reflectometry. / J. P. Hinton, J. D. Koralek, Y. M. Lu, A. Vishwanath, J. Orenstein, D. A. Bonn, W. N. Hardy and Ruixing Liang // Phys. Rev. B. – 2013. – Vol. 88. – P. 060508(R).

28. Blinc, R. Commensurability and Defect-Induced Phason Gaps in Incommensurate Systems. / R. Blinc, D. C. Ailion, J. Dolinsek and S. Zumer // Phys. Rev. Lett. – 1985. – Vol. 54. – P. 79.

29. Bak, P. Commensurate phases, incommensurate phases and the devil's staircase. / P. Bak // Rep. Prog. Phys. – 1982. – Vol. 45. – P. 587.

30. Harrison, N. Fermi surface reconstruction from bilayer charge ordering in the underdoped high temperature superconductor YBaCuO. / N. Harrison and S. E. Sebastian // New J. Phys. – 2012. – Vol. 10. – P. 095023.

31. Hamidian, M. Detection of a Cooper-pair density wave in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$. / M. H. Hamidian, S. D. Edkins, S. H. Joo, A. Kostin, H. Eisaki, S. Uchida, M. J. Lawler, E. A. Kim, A. P. Mackenzie, K. Fujita, J. Lee, J. C. Davis // Nature. – 2016. – V. 532. – P. 343.

32. Michon, B. Wiedemann-Franz Law and Abrupt Change in Conductivity across the Pseudogap Critical Point of a Cuprate Superconductor. / B. Michon, A. Ataei, P. Bourgeois-Hope, C. Collignon, S. Y. Li, S. Badoux, A. Gourgout, F. Laliberté, J.-S. Zhou, N. Doiron-Leyraud, L. Taillefer // Phys. Rev. X. – 2018. – Vol. 8. – P. 041010.

33. Ando, Y. Evolution of the Hall Coefficient and the Peculiar Electronic Structure of the Cuprate Superconductors. / Y. Ando, Y. Kurita, S. Komiya, S. Ono, and K. Segawa // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 92. – P. 197001.

34. Gor'kov, L. Interplay of Externally Doped and Thermally Activated Holes in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ and Their Impact on the Pseudogap Crossover. / L. P. Gor'kov and G. B. Teitelbaum // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97. – P. 247003.

35. Damascelli, A. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors. / A. Damascelli, Z. Hussain and Z.-X. Shen // *Rev. Mod. Phys.* – 2003. – Vol. 75. – P. 473.

36. Lanzara, A. Evidence for ubiquitous strong electron-phonon coupling in high-temperature superconductors. / A. Lanzara, P. V. Bogdanov, X. J. Zhou, S. A. Kellar, D. L. Feng, E. D. Lu, T. Yoshida, H. Eisaki, A. Fujimori, K. Kishio, J. I. Shimoyama, T. Noda, S. Uchida, Z. Hussain, Z. X. Shen // *Nature*. – 2001. – Vol. 412. – P. 510.

37. Xie, B. High-Energy Scale Revival and Giant Kink in the Dispersion of a Cuprate Superconductor. / B. P. Xie, K. Yang, D. W. Shen, J. F. Zhao, H. W. Ou, J. Wei, S. Y. Gu, M. Arita, S. Qiao, H. Namatame, M. Taniguchi, N. Kaneko, H. Eisaki, K. D. Tsuei, C. M. Cheng, I. Vobornik, J. Fujii, G. Rossi, Z. Q. Yang, and D. L. Feng // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 98. – P. 147001.

38. Graf, J. Universal High Energy Anomaly in the Angle-Resolved Photoemission Spectra of High Temperature Superconductors: Possible Evidence of Spinon and Holon Branches. / J. Graf, G.-H. Gweon, K. McElroy, S. Y. Zhou, C. Jozwiak, E. Rotenberg, A. Bill, T. Sasagawa, H. Eisaki, S. Uchida, H. Takagi, D.-H. Lee, and A. Lanzara // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 98. – P. 067004.

39. Moritz, B. Effect of strong correlations on the high energy anomaly in hole- and electron-doped high- T_c superconductors. / B. Moritz, F. Schmitt, W. Meevasana, S. Johnston, E. M. Motoyama, M. Greven, D. H. Lu, C. Kim, R. T. Scalettar, Z.-X. Shen¹, T. P. Devereaux // *New J. Phys.* – 2009. – Vol. 11. – P. 093020.

40. Ronning, F. Anomalous high-energy dispersion in angle-resolved photoemission spectra from the insulating cuprate $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$. / F. Ronning, K. M. Shen, N. P. Armitage, A. Damascelli, D. H. Lu, Z.-X. Shen, L. L. Miller and C. Kim // *Phys. Rev. B.* – 2005. – Vol. 71. – P. 094518.

41. Dagotto, E. Correlated electrons in high-temperature superconductors. / E. Dagotto // *Rev. Mod. Phys.* – 1994. – Vol. 66. – P. 763.

42. Hashimoto, M. Particle-hole symmetry breaking in the pseudogap state of Bi2201 . / M. Hashimoto, R. H. He, K. Tanaka, J. P. Testaud, W. Meevasana, R. G. Moore, D. Lu, H. Yao, Y. Yoshida, H. Eisaki, T. P. Devereaux, Z. Hussain, Z. X. Shen. // *Nat. Phys.* – 2010. – Vol. 6. – P. 414.

43. He, R. From a Single-Band Metal to a High-Temperature Superconductor via Two Thermal Phase Transitions. / R. H. He, M. Hashimoto, H. Karapetyan, J. D. Koralek, J. P. Hinton, J. P. Testaud, V. Nathan, Y. Yoshida, H. Yao, K. Tanaka, W. Meevasana, R. G. Moore, D. H. Lu, S.-K. Mo, M. Ishikado, H. Eisaki, Z. Hussain, T. P. Devereaux, S. A. Kivelson, J. Orenstein, A. Kapitulnik, Z.-X. Shen // *Science.* – 2011. – Vol. 331. – P. 1579.

44. Hashimoto, M. Energy gaps in high-transition-temperature cuprate superconductors. / M. Hashimoto, I. M. Vishik, R. H. He, T. P. Devereaux, Z. X. Shen // *Nat. Phys.* – 2014. – Vol. 10. – P. 483.

45. Fujita, K. Spectroscopic Imaging Scanning Tunneling Microscopy Studies of Electronic Structure in the Superconducting and Pseudogap Phases of Cuprate High- T_c Superconductors. / K. Fujita, A. R. Schmidt, E. A. Kim, M. J. Lawler, D. H. Lee, J. C. Davis¹, H. Eisaki, S. Uchida // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 2012. – Vol. 81. – P. 011005.

46. Lee, P. Amperean Pairing and the Pseudogap Phase of Cuprate Superconductors. / P. A. Lee // *Phys. Rev. X.* – 2014. – Vol. 4. – P. 031017.

47. Agterberg, D. Physics of Pair-Density Waves: Cuprate Superconductors and Beyond. / D. F. Agterberg, J.C. Séamus Davis, S. D. Edkins, E. Fradkin, D. J. Van Harlingen, S. A. Kivelson, P. A. Lee, L. Radzihovsky, J. M. Tranquada, Y. Wang // *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* – 2020. – Vol. 11. – P. 231.

48. Comin, R. Symmetry of charge order in cuprates. / R. Comin, R. Sutarto, F. He, E. H. da Silva Neto, L. Chauviere, A. Fraño, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, Y. Yoshida, H. Eisaki, A. J. Achkar, D. G. Hawthorn, B. Keimer, G. A. Sawatzky, A. Damascelli // *Nat. Mater.* – 2015. – Vol. 14. – P.796-800.

49. Kamihara, Y. Iron-Based Layered Superconductor: LaOFeP. / Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano, R. Kawamura, H. Yanagi, T. Kamiya, H. Hosono // *J. Am. Chem. Soc.* – 2006. – Vol. 128. – P. 10012.

50. Stewart, G. Superconductivity in iron compounds. / G. R. Stewart // *Rev. Mod. Phys.* – 2011. – Vol. 83. – P. 1589.

51. Li, W. Stripes developed at the strong limit of nematicity in FeSe film. / W. Li, Y. Zhang, P. Deng, Z. Xu, S.-K. Mo, M. Yi, H. Ding, M. Hashimoto, R. G. Moore, D.-H. Lu, X. Chen, Z.-X. Shen, Q. K. Xue // *Nat. Phys.* – 2017. – Vol. 13. – P. 957.

52. Lee, J. Interfacial mode coupling as the origin of the enhancement of T_c in FeSe films on SrTiO₃. / J. J. Lee, F. T. Schmitt, R. G. Moore, S. Johnston, Y.-T. Cui, W. Li, M. Yi, Z. K. Liu, M. Hashimoto, Y. Zhang, D. H. Lu, T. P. Devereaux, D.-H. Lee, Z.-X. Shen // *Nature*. – 2014. – Vol. 515. – P. 245.

53. Chen, Y. Enhancement of effective masses of the surface polaron in FeSe thin film on SrTiO₃ substrate. / Y. H. Chen, Y. Sun, S. Y. Ji, W. Xiong, Z. C. Pei, Z. W. Wang // *Superlattices Microstruct.* – 2020. – Vol. 144. – P. 106573.

54. Wang, L. Interface high-temperature superconductivity. / L. Wang, X. Ma, Q. K. Xue // *Supercond. Sci. Technol.* - 2016. – Vol. 29. – P. 123001.

55. Мясников, Э. Н. О множественном рождении фононов при фотодиссоциации поляронов Ландау-Пекара / Э. Н. Мясников, А.Э. Мясникова, З.П. Мastroпас // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.* – 2006. – Vol. 129. – P. 548.

56. Myasnikova, A. Correlation of optical conductivity and angle-resolved photoemission spectra of strong-coupling large polarons and its display in cuprates. / A. E. Myasnikova and E. N. Myasnikov // *Phys. Rev. B.* – 2008. – Vol. 77. – P. 165136.

57. Makarov, I. Polaronic approach to strongly correlated electron systems with strong electron-phonon interaction. / I. A. Makarov, E. I. Shneyder, P. A. Kozlov and S. G. Ovchinnikov // *Phys. Rev. B.* – 2015. – Vol. 92. – P. 155143.

58. Шнейдер, Е. И. Влияние диагонального и недиагонального электрон-фононных взаимодействий на формирование локальных поляронов и их зонной структуры в веществах с сильными электронными корреляциями / Е. И. Шнейдер, И. А. Макарова, М. В. Зотова, С. Г. Овчинников // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.* – 2018. – Vol. 153. – P. 820.

59. Mishchenko, A. Polaronic metal in lightly doped high- T_c cuprates. / A. S. Mishchenko, N. Nagaosa, K. M. Shen, Z.-X. Shen, T. P. Devereaux // *Europhysics Letters.* – 2011. – Vol. 95. – P. 57007.

60. Mishchenko, A. Diagrammatic Monte Carlo Method for Many-Polaron Problems / A. S. Mishchenko, N. Nagaosa, N. Prokof'ev // *Phys. Rev. Lett.* – 2014. – Vol. 113. – P. 166402.

61. Cancellieri C. Polaronic metal state at the $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ interface / C. Cancellieri, A. S. Mishchenko, U. Aschauer, A. Filippetti, C. Faber, O. S. Barišić, V. A. Rogalev, T. Schmitt, N. Nagaosa, V. N. Strocov // *Nature Communications.* – 2016. – V. 7. – P. 10386.

62. Holstein T. Studies of polaron motion: Part II. The “small” polaron / T. Holstein // *Annals of Physics.* – 1959. – V. 8. – P. 343.

63. Alexandrov A. S. Mobile Small Polaron / A. S. Alexandrov, P.E. Kornilovitch // *Physical Review Letters.* – 1999. – V. 82. – P. 807.

64. Мясников Э. Н. Об условиях существования поляронов Ландау-Пекара / Э. Н. Мясников, А. Э. Мясникова // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.* – 1999. – V. 116. – P. 1386.

65. Myasnikova A. E. Distribution of charge carriers at strong electron-phonon interaction and “vertical dispersion” in ARPES spectra of cuprates / A. E. Myasnikova, E. N. Myasnikov, D. V. Moseykin, I. S. Zuev // *Physics Letters A.* – 2015. – V. 379. – P. 458.

66. Emin D. In-plane conductivity of a layered large-bipolaron liquid / D. Emin // *Philosophical Magazine*. - 2015. – V. 95. – P. 918.

67. Chikina A. Band-Order Anomaly at the γ -Al₂O₃/SrTiO₃ Interface Drives the Electron-Mobility Boost / A. Chikina, D. V. Christensen, V. Borisov, M. A. Husanu, Y. Chen, X. Wang, T. Schmitt, M. Radovic, N. Nagaosa, A. S. Mishchenko, R. Valenti, N. Pryds, V. N. Strocov // *ACS Nano*. – 2021. – V. 15. – P. 4347.

68. Schmidt A. R. Electronic structure of the cuprate superconducting and pseudogap phases from spectroscopic imaging STM / A. R. Schmidt, K. Fujita, E. A. Kim, M. J. Lawler, H. Eisaki, S. Uchida, D. H. Lee, J. C. Davis // *New Journal of Physics*. – 2011. – V. 13. – P. 065014.

69. McElroy K. Coincidence of Checkerboard Charge Order and Antinodal State Decoherence in Strongly Underdoped Superconducting Bi₂Sr₂CaCu₂O₈ / K. McElroy, D. H. Lee, J. E. Hoffman, K. M. Lang, J. Lee, E. W. Hudson, H. Eisaki, S. Uchida, J. C. Davis // *Physical Review Letters*. – 2005. – V. 94. – P. 197005.

70. Myasnikova A. E. Band structure in autolocalization and bipolaron models of high-temperature superconductivity / A. E. Myasnikova // *Physical Review B*. – 1995. – V. 52. – P. 10457.

71. Abrikosov A. A. Experimentally observed extended saddle point singularity in the energy spectrum of YBa₂Cu₃O_{6.9} and YBa₂Cu₄O₈ and some of the consequences / A. A. Abrikosov, J. C. Campuzano, K. Gofron // *Physica C*. – 1993. – V. 214. – P.73.

72. Doiron-Leyraud N. Pseudogap phase of cuprate superconductors confined by Fermi surface topology / N. Doiron-Leyraud, O. Cyr-Choiniere, S. Badoux, A. Ataei, C. Collignon, A. Gourgout, S. Dufour-Beausejour, F.F. Tafti, F. Laliberte, M.-E. Boulanger, M. Matusiak, D. Graf, M. Kim, J.-S. Zhou, N. Momono, T. Kurosawa, H. Takagi, L. Taillefer // *Nature Communications*. – 2017. – V. 8. – P. 2044.

73. Hanaguri T. Quasiparticle interference and superconducting gap in Ca_{2-x}Na_xCuO₂Cl₂ / T. Hanaguri, Y. Kohsaka, J.C. Davis, C. Lupien, I. Yamada, M.

Azuma, M. Takano, K. Ohishi, M. Ono, H. Takagi // Nature Physics. – 2007. – V. 3. – P. 865.

74. Lang K. M. Imaging the granular structure of high- T_c superconductivity in underdoped $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_{8+\delta}$ / K.M. Lang, V. Madhavan, J.E. Hoffman, E.W. Hudson, H. Eisaki, S. Uchida, J. C. Davis // Nature. – 2002. – V. 415. – P. 412.

75. Fischer Ø. Scanning tunneling spectroscopy of high-temperature superconductors / Ø. Fischer, M. Kugler, I. Maggio-Aprile, C. Berthod, C. Renner // Reviews Of Modern Physics. – 2007. – V. 79. – P. 353.

76. Wise W. D. Imaging nanoscale Fermi-surface variations in an inhomogeneous superconductor / W.D. Wise, K. Chatterjee, M.C. Boyer, T. Kondo, T. Takeuchi, H. Ikuta, Z. Xu, J. Wen, G.D. Gu, Y. Wang, E.W. Hudson // Nature Physics. – 2009. – V. 5. – P. 213.

77. Ландау Л. Д. О движении электронов в кристаллической решетке / Л. Д. Ландау // Phys. Zs. Sowjet. – 1933. – V. 3. – P. 504.

78. Мясникова, А. Э. Электрон-фононные системы со спонтанным нарушением трансляционной симметрии: монография / А. Э. Мясникова. – Ростов н/Д: Изд-во ЮФУ, 2010. – 240 с.

79. Emin D. Effect of electronic correlation on the shape of a large bipolaron: Four-lobed planar large bipolaron in an ionic medium / D. Emin // Physical Review B. – 1995. – V. 52. – P. 13874.

80. Мясникова А. Э. Масса полярона большого радиуса / А. Э. Мясникова, Э. Н. Мясников // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1997. – V. 112. – P. 278.

81. Myasnikov E. N. Coherence of the lattice polarization in large-polaron motion / E. N. Myasnikov, A. E. Myasnikova, F.V. Kusmartsev // Physical Review B. – 2005. – V. 72. – P. 224303.

82. Miao, H. Charge density waves in cuprate superconductors beyond the critical doping. / H. Miao, G. Fabbri, R. J. Koch, D. G. Mazzone, C. S. Nelson, R. Acevedo-Esteves, Y. Li, G. D. Gu, T. Yilmaz, K. Kaznatcheev, E. Vescovo, M. Oda,

K. Kurosawa, N. Momono, T. A. Assefa, I. K. Robinson, E. Bozin, J. M. Tranquada, P. D. Johnson, and M. P. M. Dean // *Quantum Materials*. – 2021. – Vol. 6. – P. 31.

83. Thomas, G. Optical excitations of a few charges in cuprates. / Thomas G.A., Rapkine D.H., Cooper S.L., Cheong S-W., Cooper A.S., Schneemeyer L.F., Waszczak J.V. // *Phys. Rev. B*. – 1992. - V.45.- P.2474-2479.

84. Kondo, T. Formation of Gapless Fermi Arcs and Fingerprints of Order in the Pseudogap State of Cuprate Superconductors. / T. Kondo, A. D. Palczewski, Y. Hamaya, T. Takeuchi, J. S. Wen, Z. J. Xu, G. Gu, and A. Kaminski // *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – Vol. 111. - P. 157003.

85. Božović, I. Dependence of the critical temperature in overdoped copper oxides on superfluid density. / I. Božović, X. He, J. Wu et al. // *Nature*. – 2016. – Vol. 536. – P. 309–311.

86. Luttinger, J. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields. / J. M. Luttinger and W. Kohn // *Phys. Rev.* – 1955. – Vol. 97. - P. 869.

87. Valla, T. High-energy kink observed in the electron dispersion of high-temperature cuprate superconductors. / T. Valla, T. E. Kidd, W. G. Yin, G. D. Gu, P. D. Johnson, Z. H. Pan, and A. V. Fedorov // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 98. – P. 167003.

88. Lee, P. Amperean Pairing and the Pseudogap Phase of Cuprate Superconductors. / P. A. Lee // *Phys. Rev. X*. – 2014. – Vol. 4. - P. 031017.

89. Frohlich, H. On the Theory of Superconductivity: The One-Dimensional Case. / H. Frohlich // *Proc. R. Soc. Lond. A*. – 1954. – Vol. 223. – P. 296-305.

90. Lee, P. Conductivity from charge or spin density waves / P. A. Lee, T. M. Rice and P.W. Anderson // *Solid State Communications*. – 1974. - Vol. 14. – P. 703-709.

91. Myasnikova, A. Inertial mass of the large polaron. / A. E. Myasnikova and E. N. Myasnikov // *Physical Review B*. – 1997. - Vol. 56. - P. 5316.

Список основных публикаций автора

Статьи, опубликованные в журналах, входящих в базы данных международных индексов научного цитирования Scopus и/или Web of Science

A1. Topological pseudogap in highly polarizable layered systems with 2D hole-like dispersion. / **S. V. Doronkina**, A. E. Myasnikova, A. H. Dzhantemirov, A. V. Lutsenko // Physica E: Low-dimensional systems and nanostructures. – 2022. – Vol. 136. – Art. No 115052 (11 p.). – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physe.2021.115052>.

A2. Myasnikova, A. E. Modelling quasiparticles and inhomogeneous pseudogap emergence in cuprates in presence of charge ordering potential. / A. E. Myasnikova, **S. V. Doronkina** and R. R. Arutyunyan // Journal of Physics: Conference Series. – 2022. – Vol. 2043. – Art. No 012008 (11 p.). – DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2043/1/012008>.

Статья, опубликованная в журнале, входящем в Перечень ВАК:

A3. **Доронкина, С. В.** Фазовая диаграмма сильно взаимодействующих электрон-фононных систем с высокой плотностью носителей заряда / С. В. Доронкина, Р. Р. Арутюнян, А. Э. Мясникова // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2023. – Т. 20, № 2. – С. 192-200. – Режим доступа: <https://doi.org/10.25712/ASTU.1811-1416.2023.02.006> (дата обращения 11.07.2023)

Статьи, опубликованные в сборниках тезисов и трудах конференций:

A4. **Доронкина, С. В.** Изменение в спектре делокализованных носителей заряда в купратных сверхпроводниках вследствие их рассеяния на зарядовом упорядочении. / С. В. Доронкина, А. Э. Мясникова // Современные методы и проблемы теории операторов и гармонического анализа и их приложения (ОТНА 2019) : материалы IX международной конференции, Ростов-на-Дону, 21-26 апреля 2019 года. : – Ростов-на-Дону: Ростовское отделение Российской инженерной академии, 2019. – С. 80-81. –Режим доступа:

https://otha.sfedu.ru/upload/documents/abstracts/tethis_conf_2019_SFEDU.pdf

(дата обращения 03.07.2023).

A5. **Доронкина, С. В.** Образование псевдощели в купратных высокотемпературных сверхпроводниках как следствие сильного электрон-фононного взаимодействия и топологии закона дисперсии. / С. В. Доронкина // Ломоносов-2021 : материалы Международного молодежного научного форума, Москва, 12-23 апреля 2021 года. : – Москва: МАКС Пресс, 2021. – 1 электрон. опт. диск (DVD-ROM). – ISBN 978-5-317-06593-5. – Режим доступа:

https://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2021/data/section_34_22395.htm

(дата обращения 03.07.2023)

A6. **Доронкина, С. В.** Образование псевдощели в купратных высокотемпературных сверхпроводниках как следствие сильного электрон-фононного взаимодействия и топологии закона дисперсии. / С. В. Доронкина // Наука и технологии Юга России : XVII Ежегодная молодежная научная конференция, Ростов-на-Дону, 15-30 апреля 2021 г. : тезисы докладов. – Ростов-на-Дону : ЮНЦ РАН, 2021. – С. 222. – Режим доступа: https://www.ssc-ras.ru/ckfinder/userfiles/files/Sbornik_BK_2021_.pdf (дата

обращения 03.07.2023)

A7. Myasnikova, A. E. Modeling Quasiparticles and Pseudogap in Cuprates in Presence of Charge Ordering Potential. // A. E. Myasnikova, **S. V. Doronkina** / 7th International Workshop on Numerical Modelling of High Temperature Superconductors (HTS 2020), Nancy, 22-23 June 2021. – Nancy : Université de Lorraine, 2021. – hal-03295743. –

– Режим доступа: <https://hal.univ-lorraine.fr/HTS2020/hal-03295743v1> (дата обращения 03.07.2023)

A8. Two-Component Ground Normal State and Pseudogap in Systems with Strong Electron-Phonon Interaction and Cuprates-Like Dispersion. // **S. V. Doronkina**, A. H. Dzhanemirov, A. V. Lutsenko, A. E. Myasnikova / 7th International Conference on Superconductivity and Magnetism (ICSM 2021), Milas-

Bodrum, 21-27 Oct 2021. – Milas-Bodrum, Turkey, 2021. – С. 384. – Режим доступа: <https://supermag.com.tr/icsm/2020/scientific-program/abstract-book> (дата обращения 03.07.2023)

А9. **Доронкина, С. В.** Фазовая диаграмма сильно взаимодействующих электрон-фононных систем и сверхпроводящих купратов / С. В. Доронкина, А. Э. Мясникова // Ломоносов-2022 : материалы Международного молодежного научного форума, Москва, 11-22 апреля 2022 года. : – Москва: МАКС Пресс, 2022. – ISBN 978-5-317-06824-0. – Режим доступа: https://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2022/data/section_35_25749.htm (дата обращения 03.07.2023)

А10. **Доронкина, С. В.** Совпадение фазовой диаграммы купратов и систем с сильным электрон-фононным взаимодействием / С. В. Доронкина, А. Э. Мясникова // Наука и технологии Юга России : XVIII Ежегодная молодежная научная конференция, г. Ростов-на-Дону, 18-29 апреля 2022 г. : тезисы докладов. – Ростов-на-Дону: ЮНЦ РАН, 2022. – С.195. – Режим доступа: https://www.ssc-ras.ru/ckfinder/userfiles/files/BK_2022_Complete%20PDF_fix.pdf (дата обращения 03.07.2023).

Приложение. Список сокращений

ARPES (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy) – фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением

ВТСП – высокотемпературные сверхпроводники

ЭФВ – электрон-фононное взаимодействие

СТМ (STM) – сканирующая туннельная микроскопия (Scanning Tunneling Microscopy)

ВЗП (CDW) – волна зарядовой плотности (Charge Density Wave)

ЗУ – зарядовое упорядочение

РВП – распределенный волновой пакет

КЧ – квазичастица

СНП – слой с нулевым потенциалом

EDC (Energy Distribution Curve) – кривая распределения фотоэлектронов по энергии

СП – сверхпроводимость

ББР – биполярон большого радиуса

ПЗБ – первая зона Бриллюэна

ДН – делокализованные носители

УШ – Уравнение Шрёдингера

LDOS (Local density of states) – локальная плотность состояний носителей