

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования*

«ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

На правах рукописи

ДЖАНТЕМИРОВ Ауес Хасамбиевич

**ДВУХЖИДКОСТНАЯ СИСТЕМА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА
В СИЛЬНО СВЯЗАННЫХ ЭЛЕКТРОННОМ И ФОНОННОМ ПОЛЯХ
И СВОЙСТВА СВЕРХПРОВОДЯЩИХ КУПРАТОВ**

Специальность: 1.3.8. Физика конденсированного состояния

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук

профессор **Мясникова** Анна Эдуардовна

Ростов-на-Дону-2025

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|-----|
| Введение | 3 |
| 1 Зарядовое упорядочение в купратных высокотемпературных сверхпроводниках и системы с сильным электрон-фононным взаимодействием (<i>обзор литературы</i>) | 9 |
| 2 Расчёт основного состояния системы с сильным дальнодействующим ЭФВ и высокой концентрацией носителей заряда | 15 |
| 2.1 Разработка вариационного метода..... | 15 |
| 2.1.1 Учёт взаимодействия между биполяронами одного типа..... | 27 |
| 2.1.2 Учёт взаимодействия дырочных и электронных биполяронов. Средняя температура теплового распада зарядового упорядочения..... | 29 |
| 2.2 Расчёт резонансного упругого рассеяния рентгеновских лучей на полученном основном состоянии системы | 37 |
| 2.3 Влияние потенциала автолокализованных носителей на спектр делокализованных | 39 |
| 2.4 Численное моделирование свойств основного состояния | 40 |
| 3 Моделирование эволюции системы с ростом температуры | 52 |
| 3.1 Расчёт свободной энергии системы..... | 52 |
| 3.1.1 Распределение носителей по автолокализованным и делокализованным состояниям | 53 |
| 3.1.2 Поправка к свободной энергии вследствие появления псевдощели..... | 59 |
| 3.1.3 Вариация свободной энергии..... | 66 |
| 3.2 Температура сверхтекучего перехода в жидкости биполяронов большого радиуса..... | 74 |
| 3.3 Моделирование коэффициента Холла..... | 77 |
| 3.3.1 Носители заряда из верхней половины нижней хаббардовской зоны..... | 77 |
| 3.3.2 Коэффициент Холла для систем с носителями заряда, имеющими различные подвижности | 80 |
| 3.4 Численное моделирование свойств системы с ростом температуры..... | 82 |
| Заключение..... | 94 |
| Список литературы..... | 96 |
| Приложение А. Список основных публикаций автора..... | 102 |
| Приложение Б. Список сокращений и обозначений..... | 105 |

Введение

Актуальность темы. Несмотря на значительный прогресс в экспериментальных методах исследования высокотемпературных сверхпроводников, выявление ряда уникальных характеристик, а также обнаружение высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в новых классах материалов [1], решающего прогресса в теоретическом расчёте температуры перехода или в понимании природы необычных фаз допированных купратов, таких как псевдощелевая фаза или фаза странного металла [2], на сегодняшний день достигнуто не было. Решить эту проблему возможно, включив в модель допированных купратов другие взаимодействия, помимо электронных корреляций [2], в частности, электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ), что позволило бы учесть в расчётах зависимость свойств системы от её структуры [3].

Смягчение оптических фононных мод с волновыми векторами, близкими к волновому вектору зарядового упорядочения (ЗУ) [4, 5], а также широкие полосы, наблюдаемые в спектрах фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) и оптических спектрах [6-14] обычно рассматриваются как признаки сильного ЭФВ в купратах. Модуляция локальной плотности состояний за счёт связи с фононной модой B_{1g} , наблюдаемой в спектрах неупругого туннелирования [15], и флуктуации тока, зафиксированные методом сканирующей спектроскопии шумов [16], представляют собой новые экспериментальные доказательства сильного ЭФВ в купратах.

Открытие ВТСП с $T_c = 109$ К на границе мономолекулярного слоя FeSe, эпитаксиально выращенного на подложке из SrTiO₃ [17-19], позволило лучше понять важность учёта ЭФВ при исследовании природы ВТСП. Действительно, с одной стороны, сильное ЭФВ характерно для подложки из SrTiO₃, с другой – свойства нового интерфейсного сверхпроводника существенно отличаются от предсказаний подходов, учитывающих только электронные корреляции [1]. Поскольку построение отдельной теории для каждого типа высокотемпературных сверхпроводников не представляется привлекательным [1], имеет смысл

учитывать, помимо электронных корреляций, также роль кристаллической решётки (в частности, ЭФВ) для более унифицированного описания их свойств [1, 20].

Электронные корреляции, определяющие зонную структуру купратов, обычно рассматриваются в узельном представлении, что технически облегчает добавление к ним короткодействующего холстейновского электрон-фононного взаимодействия [9, 10, 21, 22], но такое ЭФВ приводит к формированию поляронов и биполяронов малого радиуса, с очень низкой подвижностью и ограниченных по размеру элементарной ячейкой, что исключает сосуществование с делокализованными носителями, в отличие от случая с сильным дальнедействующим ЭФВ. В результате проводимость систем с малыми поляронами и биполяронами оказывается на порядки ниже, чем та, что наблюдается в купратах. Кроме того, сильно поляризуемая ионная кристаллическая решётка купратов благоприятствует дальнедействующему фрелиховскому ЭФВ [23].

Таким образом, изучение роли ЭФВ в формировании свойств купратных высокотемпературных сверхпроводников имеет важнейшее значение для понимания природы сверхпроводимости в них и развитие теоретических моделей, учитывающих ЭФВ, остаётся актуальной проблемой современной физики конденсированного состояния.

Цель работы: развить биполяронную модель сверхпроводимости купратных высокотемпературных сверхпроводников на основе двухжидкостной системы носителей заряда в сильно связанных электронном и фононном полях, рассчитать наблюдаемые свойства модели и сравнить с экспериментальными данными по сверхпроводящим купратам.

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

1) разработать двухжидкостную модель системы носителей заряда в сильно связанных электронном и фононном полях при высокой плотности носителей заряда;

2) развить метод определения основного и возбуждённых состояний системы сильно связанных электронного и фононного полей при высокой плотности носителей заряда;

3) получить зависимость энергии связи биполярона от его радиуса, используя модифицированный вариационный метод, в рамках которого варьирование ведётся при фиксированном радиусе биполярона по остальным параметрам волновой функции носителей заряда в биполяроне;

4) вариационным методом получить вектор основного состояния системы с периодическим расположением биполяронов в области ближнего порядка в биполяронной жидкости, включая вектор состояния фононного поля в представлении когерентных состояний и определить связь размера биполярона и волнового вектора \mathbf{K}_{CO} зарядового упорядочения;

5) в рамках двухжидкостной модели системы носителей заряда выявить связь \mathbf{K}_{CO} и \mathbf{k}_0 – вектора, разделяющего импульсное пространство на две области: с возможностью автолокализации носителей заряда и без такой возможности;

6) рассчитать спектр резонансного упругого рассеяния рентгеновских лучей от двухжидкостной системы носителей заряда, зависимость интенсивности его максимума при $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{CO}$ от соотношения плотностей автолокализованных и делокализованных носителей заряда и форму его сечения при $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{CO}$ и сравнить с наблюдаемыми в купратах;

7) определить влияние потенциала автолокализованных носителей заряда на спектр делокализованных;

8) исследовать зависимость температуры бозе-конденсации биполяронной жидкости от числа проводящих слоёв в элементарной ячейке и

9) развить метод расчёта постоянной Холла в системах сосуществующих автолокализованных и делокализованных носителей заряда; рассчитать постоянную Холла для различных уровней допирования как функцию температуры.

Научная новизна результатов. Впервые

1) предложена двухжидкостная модель системы носителей заряда в сильно связанных электронном и фононном полях при высокой плотности носителей заряда и развит метод определения основного и возбуждённых состояний системы сильно связанных электронного и фононного полей при высокой плотности носителей заряда с использованием функции распределения носителей заряда по автолокализованным и делокализованным состояниям в системах, где возможно их сосуществование;

2) выявлена связь размера биполярона и волнового вектора зарядового упорядочения на основе полученного вектора основного состояния системы с периодическим расположением;

3) определена связь вектора зарядового упорядочения и вектора, разделяющего в рамках двухжидкостной модели импульсное пространство на область сосуществования автолокализованных и делокализованных носителей и область, доступную делокализованным носителям независимо от присутствия в системе автолокализованных носителей;

4) рассчитан спектр резонансного упругого рассеяния рентгеновских лучей от двухжидкостной системы носителей заряда и получена асимметрия сечения пика в спектре вблизи волнового вектора зарядового упорядочения;

5) вариационным методом найдена зависимость равновесного радиуса биполярона от уровня допирования и показано, что равновесный радиус биполярона при высокой плотности носителей заряда меньше радиуса изолированного биполярона и

6) развит метод расчёта постоянной Холла в системах сосуществующих автолокализованных и делокализованных носителей заряда.

Теоретическая значимость определяется тем, что предложена двухжидкостная модель системы носителей в сильно связанных электронном и фононном полях при высокой плотности носителей заряда, в рамках которой удалось получить основное и слабо возбуждённые состояния сильно взаимодействующих электрон-фононных систем с дисперсией, наблюдаемой в

сверхпроводящих купратах, а также установить связь волнового вектора зарядового упорядочения и равновесного радиуса биполярона и рассчитать свойства этих систем, которые находятся в согласии с наблюдаемыми в купратных сверхпроводниках. Полученные результаты закладывают основу теории систем с сильным дальнедействующим электрон-фононным взаимодействием и высокой плотностью носителей заряда и вносят вклад в развитие теории высокотемпературной сверхпроводимости.

Практическая значимость. Развитие теоретических моделей высокотемпературной сверхпроводимости имеет ключевое значение для фундаментального понимания природы этого явления. Углублённый анализ механизмов сверхпроводящего перехода, в частности, с учётом свойств биполяронного конденсата, позволяет выявить факторы, определяющие критическую температуру и другие важные характеристики высокотемпературных сверхпроводников. Полученные результаты могут в перспективе определить более оптимальные пути разработки новых соединений с улучшенными параметрами. Это, в свою очередь, открывает перспективы для применения таких материалов в ряде прикладных областей – от квантовых вычислений и магнитной томографии до энергетики и транспорта. Таким образом, развитие теоретических моделей напрямую влияет на расширение возможностей практического использования сверхпроводящих технологий.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Основное и слабо возбуждённые состояния сильно взаимодействующих электрон-фононных систем с купратоподобной дисперсией при плотности носителей заряда, соответствующей уровню допирования дырками $0,05 < p < 0,25$, представляет собой двухжидкостную систему носителей заряда, включающую бозе-жидкость биполяронов большого радиуса двух знаков заряда и ферми-жидкость делокализованных носителей заряда. В дырочно-допированной системе с уровнем допирования $p \leq 0,1$ при низкой температуре делокализованные дырки отсутствуют, что согласуется со спектрами фотоэмиссионной спектроскопии с

угловым разрешением и с чисто электронной поверхностью Ферми купратов при таких условиях.

2. Биполярная жидкость проявляется в экспериментах как зарядовое упорядочение с малой длиной когерентности, соответствующей размеру области ближнего порядка в жидкости. Равновесный размер биполярона связан с волновым вектором зарядового упорядочения, рассчитанные значения этого вектора и их зависимость от допирования находятся в согласии с наблюдаемыми в купратах.

3. В рамках двухжидкостной модели системы носителей заряда равновесный размер биполярона определяет величину волнового вектора, ограничивающего область, доступную делокализованным носителям независимо от присутствия в системе автолокализованных носителей. Его рассчитанные значения согласуются с наблюдаемыми в купратах величинами волнового вектора “водопада” в спектре фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением и волнового вектора зарядового упорядочения.

4. Полученные в рамках двухжидкостной модели рост температуры сверхпроводящего перехода при увеличении числа проводящих слоёв в элементарной ячейке, температурная и концентрационная зависимость коэффициента Холла, а также положение и форма сечения пика в спектре резонансного рассеяния рентгеновских лучей на биполярной жидкости согласуются с наблюдаемыми в купратах.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 3 статьях в международных научных журналах, индексируемых в базе данных Scopus, а также в тезисах 10 докладов в сборниках трудов конференций различного уровня. Список основных публикаций автора по теме диссертации, снабжённых литерой А, приведён в конце диссертации.

1 Зарядовое упорядочение в купратных высокотемпературных сверхпроводниках и системы с сильным электрон-фононным взаимодействием (обзор литературы)

Большой массив экспериментальной информации о зарядовом упорядочении в купратах, полученный в последнее время [4, 24 - 32], представляет собой как вызов для теоретиков, так и возможность достичь более глубокого понимания этих систем. Действительно, выяснение природы основного состояния купратов в нормальном состоянии будет полезно при теоретическом моделировании их транспортных, тепловых, магнитных и других свойств. Наиболее интригующим результатом недавних экспериментов является сильно различающаяся зависимость волнового вектора ЗУ от уровня допирования в разных купратах, допированных дырками [31]. Едва ли такие данные можно объяснить в рамках традиционной модели волн зарядовой плотности (ВЗП), поскольку проводящий слой CuO_2 во всех купратах одинаков с похожей формой дисперсии носителей и поверхности Ферми (ПФ). Возможно, физическая причина таких различий может проясниться в модели, учитывающей ЭФВ, которое часто рассматривается как источник различий между различными купратами [33].

Было отмечено ещё несколько особенностей, отличных от характерных для традиционных ВЗП. Во-первых, обнаружена электрон-дырочная асимметрия проявления ЗУ в экспериментах со сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) в купратах в отличие от явления ВЗП [26]. В литературе эту особенность часто связывают с отсутствием проявления ЗУ в спектрах купратов, полученных с помощью фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES). Во-вторых, в купратах, допированных электронами, ЗУ возникает, но в антинодальном направлении отсутствуют проявления псевдощели на ПФ [29]. В-третьих, длина когерентности ЗУ в купратах довольно мала [31]. Наконец, фононные моды с волновым вектором в окрестности волнового вектора ЗУ заметно смягчаются [4], однако их частота не обращается в ноль, как это характерно для голдстоуновских мод [31], хотя трансляционная симметрия нарушается. Следует отметить, что при образовании автолокализованного состояния (АС) голдстоуновской степенью

свободы является движение центра АС [34], энергии фононов меняются, но не радикально.

Все указанные различия были сконцентрированы в термине «нетрадиционная ВЗП», и была отмечена необходимость изучения движущей силы ЗУ в купратах [31]. Зарядовое упорядочение в купратах представляет собой пример спонтанного нарушения трансляционной симметрии, которое, как известно, происходит не только в системах с нестингом поверхности Ферми, но и в допированных диэлектриках с сильным ЭФВ за счёт образования поляронов и биполяронов. Смягчение фононных мод с волновым вектором, близким к волновому вектору ЗУ [4], указывает на наличие сильного ЭФВ в купратах. Известным признаком сильного ЭФВ в купратах являются широкие полосы в спектрах ARPES [8, 10, 11, 14, 35, 36] и в спектрах оптической проводимости [14, 15, 36, 37]. Некоторые другие свойства купратов были успешно описаны в моделях с сильным ЭФВ [38 - 40]. Это не удивительно, поскольку у купратов, в отличие от металлов, хорошо поляризуемая ионная решётка, с несколькими ветвями оптических фононов, взаимодействующих с носителями заряда [3, 41].

Недавно было показано, что сильное фрелиховское ЭФВ и высокая плотность коррелированных носителей могут приводить к высокоэнергетической аномалии в спектрах ARPES купратов [42]. А именно, разделение импульсного пространства между автолокализованными и делокализованными согласно принципу Паули, приводит к появлению «водопадов» в спектре ARPES из-за разной энергии релаксации системы после фотоэмиссии из этих двух типов состояний. Положение «водопада» в импульсном пространстве купратов, связанное с размером АС [42], показывает, что при высокой плотности носителей размер АС меньше размера одиночного биполарона. Это также указывает на необходимость изучения основного состояния систем с сильным фрелиховским ЭФВ и высокой плотностью носителей.

Как известно, при сильном дальнедействующем ЭФВ основным состоянием одиночного носителя заряда является большой полярон, радиус которого намного больше постоянной решётки [23, 43]. При высокой плотности носителей

биполярон энергетически более выгоден, чем полярон и делокализованный носитель [44]. При дальнейшем увеличении плотности носителей наступает момент, когда все локализованные состояния, различающиеся областями локализации в пространстве, полностью заняты. Дальнейшее увеличение концентрации носителей, должно приводить к появлению делокализованных носителей [44].

Следует отметить, что различные двухкомпонентные модели, то есть модели с двумя типами состояний носителей, широко и успешно используются для описания экспериментально наблюдаемых свойств купратов [45, 46]. Однако метод изучения основного состояния системы с сильным фрелиховским ЭФВ и высокой плотностью носителей заряда, в которой этими двумя типами являются автолокализованные и делокализованные носители, всё ещё не разработан.

Богатая фазовая диаграмма допированных дырками купратов, включающая частично сосуществующие псевдощель, зарядовое упорядочение или волну зарядовой плотности, и сверхпроводящую фазу, поражает воображение [2, 31, 47]. Ещё более захватывающим является неизменное присутствие этих фаз в различных купратных сверхпроводниках, что указывает на их общую природу. Связь между ВЗП и перестройкой поверхности Ферми, приводящая к образованию псевдощели, первоначально была предположена в купратах в соответствии с традиционной моделью ВЗП. Однако экспериментальные исследования проявления псевдощели в спектрах ARPES купратов, выявили отличие от традиционной модели ВЗП, известное как электронно-дырочная асимметрия [48, 49]. Интересно, что исследование ЗУ методом туннельной микроскопии также демонстрирует электрон-дырочную асимметрию: ЗУ наблюдалось только при туннелировании электронов в образец из наконечника сканирующего туннельного микроскопа, но не при обратном туннелировании [50].

В ряде работ высказывается идея о едином происхождении фаз псевдощели, зарядового упорядочения и сверхпроводимости, основываясь на сходстве поведения их критических температур при изменении уровня допирования [51]. Данные спектроскопии резонансного рентгеновского рассеяния (RXS) показывают

наличие пика ЗУ при уровне допирования $p = 0,21$, который исчезает при дальнейшем допировании примерно на уровне $p = 0,25$ [52]. При близких значениях уровня допирования наблюдалось исчезновение признаков сверхпроводимости [53], что указывает на возможную связь этих фаз. Можно выделить три универсальных признака, характерных для купратов, подчёркивающих общую природу фаз сверхпроводимости (СП) и ЗУ. Один из них – близкие значения длины волны ЗУ и длины когерентности пары в сверхпроводящем состоянии. Связь ВЗП и псевдощели с образованием пар предполагалась в модели волны плотности пар [54, 55], где ВЗП и псевдощель возникают в результате объединения в пары делокализованных носителей с противоположными импульсами. Модель волны плотности пар воспроизводит электрон-дырочную асимметрию для псевдощели в антинодальном направлении. Однако она предлагает одновременную реализацию двух различных видов спаривания носителей: амперовский антинодальный и d -волновой нодальный, предполагая без обоснования, что свободная энергия системы в этих фазах близка.

Ещё одной важной особенностью является большая замороженная деформация решётки в фазе ВЗП купратов, наблюдаемая непосредственно с помощью рентгеновской дифракции [56] и косвенно через сильное смягчение фононных мод с волновыми векторами, близкими к волновому вектору ЗУ [4, 5]. Стоит подчеркнуть, что наблюдаемая деформация решётки в фазе ВЗП купратов не является переходной, как в куперовской паре, а является классической, с ненулевыми средними значениями, как в поляроне, что особенно хорошо видно в представлении когерентных состояний [34]. Как в ВЗП, так и в поляроне, сформированном в сильно поляризуемой решётке, деформация решётки одновременно формируется носителями и представляет собой потенциальные ямы для них, причём размер ямы значительно больше постоянной решётки. Поэтому обе эти задачи изучаются с помощью гамильтониана Фрёлиха электрон-фононного взаимодействия [57 - 59].

Как было отмечено Л. Д. Ландау в монографии [60], если поляризационная потенциальная яма достаточно глубока, чтобы в ней мог возникнуть дискретный

уровень носителя, то в основном состоянии носитель автолокализуется. Глубина потенциальной ямы в основном состоянии определяется минимизацией энергии взаимодействующих электронного и фононного полей по параметрам деформации фононного вакуума и волновой функции носителя (при соблюдении условия адиабатического приближения) [34, 61]. Этот вывод может быть обобщён на систему из нескольких носителей и поляризационных потенциальных ям. Широкие полосы в спектрах ARPES и оптических спектрах, а также отсутствие пересечений с уровнем Ферми в спектрах ARPES при уровнях допирования $p < 0,1$ свидетельствуют о наличии автолокализованных состояний носителей в купратах при низких уровнях допирования и температурах [8, 10, 11, 14, 15, 36, 37, 62, 63].

Хотя термин «полярон» иногда используется для обозначения делокализованных состояний носителей, возникающих при слабом или среднем ЭФВ, в дальнейшем он применяется только для автолокализованных состояний носителей, возникающих при сильном ЭФВ, когда постоянная ЭФВ $\alpha \gg 1$ [64], при условии, что кинетическая энергия движения носителей внутри полярона значительно превышает энергию фонона, что соответствует адиабатическому приближению. Сильное дальнедействующее фрелиховское ЭФВ приводит к образованию поляронов большого радиуса, размеры которых значительно превышают размер элементарной ячейки [61, 62]. Тогда как сильное короткодействующее холстейновское ЭФВ приводит к образованию малых поляронов, в которых носитель локализован в окрестности узла решётки [62, 65, 66]. Учитывая высокую поляризуемость ионной решётки купратов и тот факт, что период ВЗП в них намного больше постоянной решётки, фрелиховское ЭФВ представляется более подходящим.

В контексте СП в купратах биполяроны малого радиуса были подробно изучены группой А. С. Александрова в работах [66, 21], а свойства больших биполяронов и их систем обсуждались Д. Эмином в работах [62, 67]. Хотя многие проявления (би)поляронов малого и большого радиуса схожи, например, широкие полосы в ARPES и оптических спектрах [8, 10, 11, 14, 36, 62], существует важное различие между сильно допированными системами с сильным фрелиховским ЭФВ

и системами с сильным холстейновским ЭФВ. Это различие заключается в возможности сосуществования автолокализованных и делокализованных носителей в первых системах [42, 44, 69].

Изначально предположение о сосуществовании локализованных и делокализованных носителей в купратах было сделано феноменологически на основе зависимости поляризуемости от уровня допирования, а локализованные носители предполагались как биполярны малого радиуса [70]. Однако вычисление основного состояния и состояний с конечной температурой системы многих носителей, сильно взаимодействующих с фононным полем, оказалось не простой задачей. Диаграммный метод Монте-Карло позволил решить её лишь недавно для случая сильного холстейновского (короткодействующего) ЭФВ [71]; сосуществования (би)полярнов малого радиуса с делокализованными носителями получено не было. Применение диаграммного метода Монте-Карло к случаю многих носителей и сильного дальнедействующего фрёлиховского ЭФВ затруднено проблемой знака.

Следует отметить, что спаривание Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) и спаривание при кроссовере БКШ–бозе–эйнштейновского конденсата [72] принципиально отличаются от образования биполярнов. Последние образуются носителями с энергией вблизи минимума [61], в то время как пары БКШ и кроссоверные пары образуются носителями, близкими к ПФ [72]. Адиабатическим условием для случаев БКШ и БКШ–БЭК кроссовера является энергия Ферми, значительно превышающая энергию фонона [72], тогда как для автолокализованного носителя кинетическая энергия движения носителя в поляризационной потенциальной яме должна быть значительно выше энергии фонона [61]. Константа ЭФВ, λ , используемая в теориях БКШ и кроссовера которая пропорциональна плотности состояний вблизи ПФ, в купратах невелика. Однако энергия ЭФВ в сильно взаимодействующих электронных и фононных полях, то есть в системах, где образуются автолокализованные состояния носителей), не зависит от плотности состояний вблизи ПФ, а определяется статической и высокочастотной диэлектрическими константами [61, 62].

2 Расчёт основного состояния системы с сильным дальнедействующим ЭФВ и высокой концентрацией носителей заряда

Как было описано выше, до работы [A1] отсутствовали строго формализованные методы теоретического анализа основного состояния систем с сильным дальнедействующим ЭФВ и высокой концентрацией носителей заряда. Здесь предлагается методологический подход, основанный на вариационном принципе, традиционно применяемом к системам с сильным ЭФВ, при этом в качестве базиса для фононного поля используется представление когерентных состояний.

2.1 Разработка вариационного метода

Если учитывать взаимодействия между носителями заряда в купратах последовательно по мере убывания их силы, то в рамках такого подхода в первую очередь должно быть учтено кулоновское взаимодействие носителей на одном узле, а также обменное взаимодействие между носителями, расположенными на соседних узлах решётки. В настоящем подходе дисперсионные характеристики нижней и верхней хаббардовских зон, формируемые в том числе за счёт спиновых и зарядовых корреляций, извлекаются из экспериментальных данных ARPES, согласно методике, изложенной в работе [42]. Эти дисперсии служат исходными данными для вычисления эффективной массы носителей в окрестности экстремумов указанных зон. Такой подход оправдан, поскольку при наличии сильного ЭФВ и низком уровне дырочного допирования наблюдаемая в ARPES дисперсия носителей воспроизводит дисперсию свободных (неэкранированных) носителей заряда, но со значительным сдвигом вдоль оси энергии связи [15, 16, 26]. Сопоставимые значения эффективной массы также воспроизводятся в расчётах, выполненных в рамках модели Хаббарда и t - J модели [73].

В системах с сильным фрелиховским ЭФВ носители заряда в основном состоянии автолокализуются в области пространства, размеры которой существенно превышают параметры элементарной ячейки кристаллической

решётки [23, 43]. В таких состояниях волнового пакета импульс носителя заряда обладает высокой неопределённостью. Вследствие такой неопределённости использование функции распределения по состояниям с определённым значением импульса становится затруднительным. Более оптимальным способом описания в таком случае оказывается функция распределения по локализованным в координатном пространстве состояниям.

Для построения распределения носителей по состояниям, локализованным в объёме V_0 , а значит и в объёме импульсного пространства $(2\pi\hbar)^3/V_0$, может быть использован метод Гиббса [44, 69]. В случае изотропной среды с сильным фрёлиховским ЭФВ импульсное пространство носителей подразделяется на две области: с модулем импульса $k < k_0$, соответствующую "холодным" носителям, и с $k > k_0$, в которой находятся "горячие" носители. Пороговое значение импульса k_0 соответствует максимальному значению импульса автолокализованного состояния. Оно может быть определено из соотношения неопределённостей:

$$\frac{4}{3}\pi(\hbar k_0)^3 V_0 = (2\pi\hbar)^3, \quad k_0 = \frac{(9\pi/2)^{1/3}}{R_{\text{bip}}}. \quad (2.1)$$

В квазидвумерной системе, подобной купратам, наибольший интерес представляет определение максимального импульса k_0 в плоскости проводимости, либо его проекции $k_{0x} = k_{0y}$. Для оценки этих компонент в модели рассматриваются области пространственной локализации носителей заряда в биполярном состоянии, имеющие квадратные проекции на плоскость проводимости. Геометрическая интерпретация таких проекций изображена на рисунке 2.1, а.

$$(2\hbar k_{0x})^2 (2R_{\text{bip}})^2 = (2\pi\hbar)^2, \quad k_{0x} = \pi/2R_{\text{bip}}. \quad (2.2)$$

Причиной выбора именно таких областей локализации является возможность покрытия ими всей плоскости проводимости.

Поскольку импульс АС не может превышать пороговое значение k_0 ввиду низкой максимальной групповой скорости фононов [34], горячие носители остаются в делокализованном состоянии даже при абсолютном нуле температуры.

Поэтому для описания статистических свойств таких носителей применимо стандартное распределение Ферми.

Холодные носители при сильном ЭФВ, напротив, характеризуются распределением по состояниям волновых пакетов и при нуле температур оказываются все автолокализованными [44]. Указанное разделение импульсного пространства носителей на две качественно различные области получает наглядное подтверждение в виде так называемой “вертикальной дисперсии”, наблюдаемой в высокоэнергетических областях спектров ARPES купратов при импульсе, близком к k_0 [42]. Поскольку предметом настоящего исследования являются системы с высокой концентрацией носителей, в дальнейшем под АС будут пониматься исключительно биполярны. Это допущение не влияет на корректность описания при уровнях допирования $p > 0,04$, причины этого обсуждаются в следующей главе. При более низких значениях уровня допирования могут присутствовать поляроны, вклад которых здесь не рассматривается.

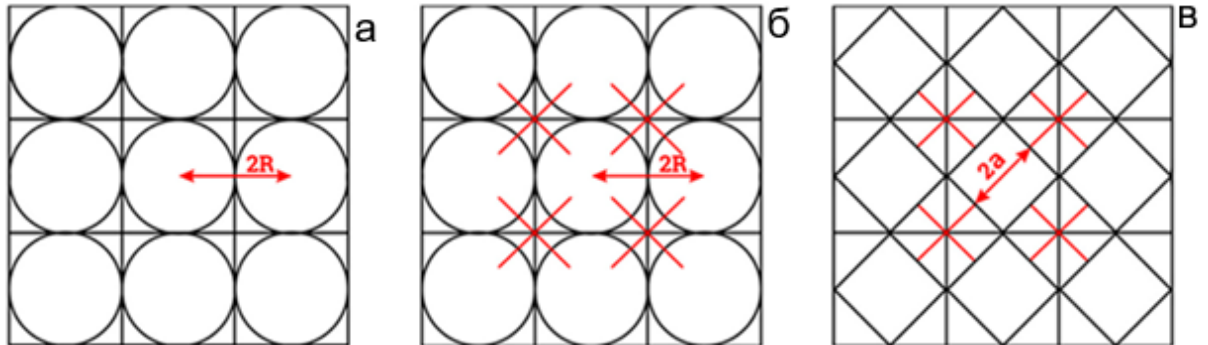


Рисунок 2.1 – Расположение электронных биполяронов при плотности носителей $n > n'_0$ – (а); расположение электронных биполяронов и дырочных биполяронов (крестики) при плотности $n \geq n_0$, где $n_0 = 2/(2R_{\text{bip}})^2$ – плотность электронов в электронных биполярных состояниях – (б) ; форма и размеры электронных и дырочных биполяронов, использованные в расчётах с учётом их взаимодействия: квадраты – электронные биполярны, не окружённые дырочными биполяронами, ромбы – дырочные биполярны и электронные биполярны, окружённые дырочными биполяронами – (в).

В отличие от предыдущих работ, где радиус биполярнов принимался фиксированным [44], в нашем исследовании выдвигается и проверяется гипотеза о возможном уменьшении размеров автолокализованных состояний при росте плотности носителей. Варьирование размеров биполярнов не может осуществляться независимо от энергии делокализованных состояний, поскольку последняя зависит от первого. Во-первых, импульсы, которые могут быть у делокализованных носителей, ограничены снизу максимально возможным импульсом автолокализованных состояний, как следствие принципа запрета Паули, так как область с импульсами $k < k_0$ уже занята этими автолокализованными состояниями. Кроме этого, в системе происходит перераспределение носителей между локализованными и делокализованными состояниями.

Для описания основного нормального состояния системы разработан вариационный метод [A1], в рамках которого используются два класса волновых функций, соответствующие автолокализованным и делокализованным носителям. В предлагаемом методе минимизируется средняя энергия системы, поэтому она представляется в виде суммы энергий биполярнов и делокализованных носителей:

$$E = E_{\text{bip}}(R_{\text{bip}})n_{\text{bip}}(R_{\text{bip}})/2 + E_{\text{deloc}}(R_{\text{bip}}), \quad (2.3)$$

где n_{bip} – плотность автолокализованных носителей.

Сильное электрон-фононное взаимодействие приводит к эффективному экранированию взаимодействий между носителями на расстояниях, превышающих характерный размер биполярона, за счёт высокой статической диэлектрической проницаемости среды [9, 23], либо, в более точной формулировке, за счёт взаимного экранирования поляризационных зарядов и зарядов носителей в различных биполяронах. Это обстоятельство обосновывает применение кластерного подхода [22, 74]: в первом приближении анализируются взаимодействия внутри одного кластера (биполярона), после чего учитывается вклад межкластерных взаимодействий в рамках приближения среднего поля. Соответственно, функция энергии биполярнов $E_{\text{bip}}(R_{\text{bip}})$ включает, помимо

внутренней энергии, также энергию взаимодействия между кластерами, определяемую согласно подходу, изложенному далее в подразделах 2.1.1 и 2.1.2.

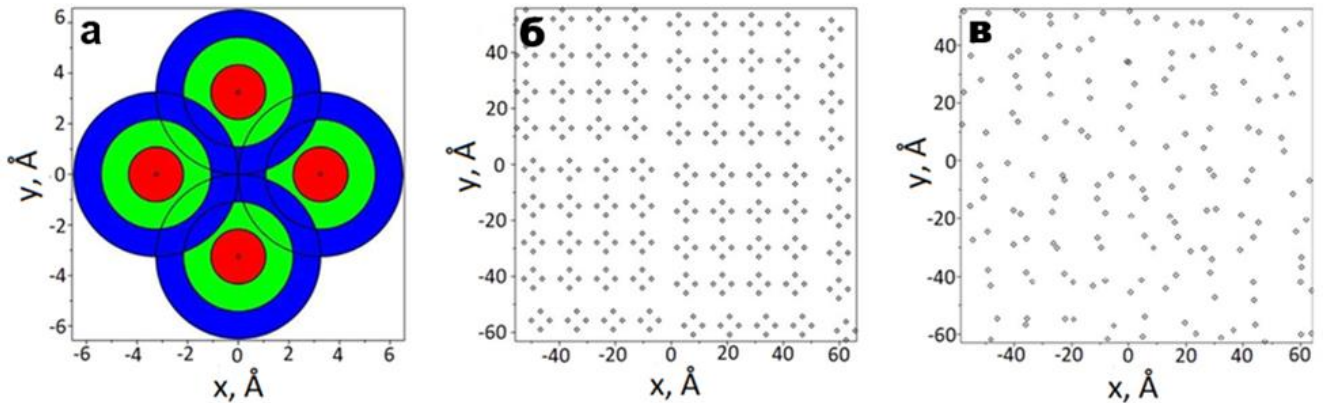


Рисунок 2.2 – Моделирование волновой функции (2.15) с использованием случайных сдвигов мгновенных положений носителей относительно их среднего значения – **(а)**; моделирование областей ближнего порядка биполярной жидкости размером порядка длины когерентности (кружками отмечены наиболее вероятные положения носителей) – **(б)**; результат совместного применения подходов (а) и (б) при высокой плотности носителей – **(в)**.

Экранирование ЭФВ делокализованными носителями заряда оказывается невозможным вследствие принципа Паули [42]. Действительно, эффективное экранирование требует локализации делокализованных носителей внутри биполярона, однако такие состояния уже полностью заняты автолокализованными носителями. Деление импульсного пространства волновым вектором с модулем k_0 в купратах проявляется наличием высокоэнергетической аномалии (“водопада”, или области “вертикальной дисперсии”) [7, 12, 75, 76] в спектрах ARPES дырочно-допированных и недопированных купратов [42]. Влияние автолокализованных состояний на спектр горячих носителей обсуждается в разделе 2.3 и работе [A2].

Учитывая, что в купратных сверхпроводниках носители заряда локализуются преимущественно в проводящих плоскостях CuO_2 , уравнение (2.3) применяется для расчёта средней энергии, отнесённой к единице площади такой плоскости. Первая функция в уравнении (2.3) $E_{\text{bip}}(R_{\text{bip}})$ представляет собой энергию биполярона как функцию его радиуса. В первом приближении, в пренебрежении межбиполярным взаимодействием, эта функция соответствует энергии связи

биполярона, получаемой посредством условного вариационного метода с использованием гамильтониана Фр е́лиха. В рамках этого подхода радиус R_{bip} определялся как размер области V_{bip} , в которой сосредоточено 90% плотности заряда биполярона: $\int_{V_{\text{bip}}} |\Psi(r_1, r_2)|^2 dr_1 dr_2 = 0,9$.

На следующем этапе с учётом взаимодействия между биполяронными квазичастицами функция $E_{\text{bip}}(R_{\text{bip}})$ дополняется вкладом соответствующего взаимодействия, что позволяет проводить вариационную минимизацию полной энергии биполярона при фиксированном значении R_{bip} , варьируя остальные параметры его волновой функции. Полученная зависимость $E_{\text{bip}}(R_{\text{bip}})$ далее используется для минимизации полной энергии системы по радиусу R_{bip} , который представляет собой (см. рисунок 2.1) половину минимального расстояния между центрами соседних биполяронов, при условии, что плотность носителей превышает критическое значение $n > n'_0 = 2/(2R_0)^2$, где R_0 – радиус несжатого изолированного биполярона.

Второй компонент уравнения (2.3) – плотность носителей в автолокализованных состояниях – может быть выражен как функция от радиуса биполярона: $n_{\text{bip}}(R_{\text{bip}}) = 2/(2R_{\text{bip}})^2$ при $n > n'_0$. В этом режиме R_{bip} перестаёт интерпретироваться как радиус АС, а представляет собой половину стороны квадрата (см. рисунок 2.1, а), вписанного в элементарную ячейку плотной упаковки биполяронов. Таким образом, концентрация биполяронов на единицу площади определяется значением R_{bip} , которое минимизирует полную среднюю энергию системы на заданной плотности носителей.

Важно отметить, что сжатие биполяронов может происходить только, пока это энергетически выгодно. Существует предел концентрации биполяронов, выше которой сжатие биполяронов становится невозможным, так как их энергия связи становится положительной.

Функция $E_{\text{deloc}}(R_{\text{bip}})$ в выражении (2.3), представляет собой энергию делокализованных носителей, отнесённую к единице площади проводящей плоскости. При нулевой температуре квазичастицы, находящиеся в делокализованных состояниях, соответствуют исключительно “горячим”

носителям [44]. В рассматриваемом диапазоне уровней допирования их энергетическое распределение может быть адекватно описано в приближении параболической зоны около экстремума, при этом используется эффективная масса в пределах проводящей плоскости $m^* = m_e$, полученная из анализа спектров ARPES [42], и считается бесконечно большой в направлении, перпендикулярном плоскости:

$$E_{\text{deloc}} = \int_{k_0}^{k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}. \quad (2.4)$$

Верхний предел интегрирования, k_F определяется плотностью делокализованных носителей:

$$n_{\text{deloc}} = n - n_{\text{bip}} = \int_{k_0}^{k_F} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}, \quad n_{\text{bip}} = \frac{2}{(2R_{\text{bip}})^2}, \quad (2.5)$$

где при $n < n'_0$ значение $n_{\text{deloc}} = 0$, что соответствует отсутствию делокализованных носителей.

Функция $E_{\text{bip}}(R_{\text{bip}})$ определяется на основе гамильтониана Фр елиха, модифицированного для случая высокой плотности носителей следующим образом:

$$H = \sum_{i=1, j=1}^{2, N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_{\mathbf{r}_{ij}} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{V\varepsilon^*}} [b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{ij}} + b_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_{ij}}] \right) + \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + \frac{e^2}{\varepsilon_{\infty}} \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_{1,j} - \mathbf{r}_{2,j}|}, \quad (2.6)$$

где N – число биполяронов в рассматриваемом объёме V , $\mathbf{r}_{i,j}$ – координаты i -го электрона в j -м биполяроне. Обратная эффективная диэлектрическая проницаемость определяется выражением $1/\varepsilon^* = 1/\varepsilon^{\infty} - 1/\varepsilon_0$, отражающим интенсивность электрон-фононного взаимодействия.

Взаимодействие между носителями, находящимися в разных биполяронах, эффективно экранируется высокой статической диэлектрической проницаемостью

купратов [23], и в уравнении (2.6) оно учитывается в виде поправки к энергии биполярона $E_{\text{bip}}(R_{\text{bip}})$.

В адиабатическом приближении вектор состояния полной системы, включающей электронные и фоновые подсистемы, представляется в виде произведения электронной волновой функции и вектора состояния фононного вакуума. Для расчёта энергии биполярона применяется кластерный подход [7, 76], в котором сначала учитываются взаимодействия внутри отдельных кластеров, а затем – взаимодействия между ними.

Таким образом, волновая функция основного состояния системы имеет вид:

$$|S\rangle = \prod_i \psi(\mathbf{r}_{1i} - \mathbf{R}_i, \mathbf{r}_{2i} - \mathbf{R}_i) \prod_{\mathbf{k}} |d_{\mathbf{k}}\rangle, \quad (2.7)$$

где \mathbf{R}_i – координаты центра i -го биполярона.

Рассматривая нулевую (или близкую к нулю) температуру, можно пренебречь возбуждёнными фоновыми состояниями. Деформация фононного вакуума, индуцируемая сильным электрон-фононным взаимодействием, описывается в базисе когерентных состояний, где средние значения фононных операторов рождения/уничтожения принимают вид:

$$\langle b_{\mathbf{k}} \rangle = d_{\mathbf{k}}, \quad \langle b_{\mathbf{k}}^+ \rangle = d_{\mathbf{k}}^*, \quad d_{\mathbf{k}} = |d_{\mathbf{k}}| e^{i\varphi_{\mathbf{k}}}. \quad (2.8)$$

Среднее значение гамильтониана (2.6) в описанном в уравнении (2.7) состоянии принимает форму:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = & \sum_{i=1, j=1}^{2, N} \left\langle -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_{\mathbf{r}_{ij}} \right\rangle + \frac{e^2}{\epsilon_{\infty}} \sum_{j=1}^N \left\langle \frac{1}{|\mathbf{r}_{1,j} - \mathbf{r}_{2,j}|} \right\rangle \\ & - \sum_{i=1}^N \sum_{\mathbf{k}} \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{V\epsilon^*}} \iint [d_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{1i}} + d_{\mathbf{k}}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_{2i}} + d_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{2i}} \\ & + d_{\mathbf{k}}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_{1i}}] |\psi(\mathbf{r}_{1i} - \mathbf{R}_i, \mathbf{r}_{2i} - \mathbf{R}_i)|^2 d\mathbf{r}_{1i} d\mathbf{r}_{2i} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} |d_{\mathbf{k}}|^2. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Используя трансляционную инвариантность волновой функции биполярона [34, 77], можно перейти к переменным $\mathbf{r}_{1i} = \mathbf{R}_i + \mathbf{r}'_1$, $\mathbf{r}_{2i} = \mathbf{R}_i + \mathbf{r}'_2$, и, в результате, выражение для среднего значения энергии взаимодействия ЭФВ принимает вид:

$$\langle H_{\text{EPI}} \rangle = - \sum_k \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V\varepsilon^*}} \iint \{ (d_k e^{ikr'_1} + d_k e^{ikr'_2}) \sum_{i=1}^N e^{ikR_i} + (d_k^* e^{-ikr'_1} + d_k^* e^{-ikr'_2}) \sum_{i=1}^N e^{-ikR_i} \} |\psi(r'_1, r'_2)|^2 dr'_1 dr'_2. \quad (2.10)$$

В случае периодического размещения биполяронов по квадратной решётке (см. рисунок 2.1, а), суммы по индексам принимают вид:

$$\sum_{i=1}^N e^{ikR_i} = \sum_{i=1}^N e^{-ik \cdot R_i} = N \delta_{\mathbf{k} \mathbf{K}_{\text{CO}}}, \quad (2.11)$$

где \mathbf{K}_{CO} удовлетворяет условию $\mathbf{K}_{\text{CO}} \mathbf{R}_i = 2\pi m$, $m \in Z$. Важно отметить, что в отличие от обычных кристаллических систем, \mathbf{K}_{CO} не является вектором обратной решётки в классическом смысле, поскольку периодичность здесь обусловлена пространственным расположением биполяронов, зависящим от уровня допирования.

Периодичность определяется векторами $i2R_{\text{bip}}$ и $j2R_{\text{bip}}$ вдоль осей x и y , соответственно, а, значит, проекции волнового вектора \mathbf{K}_{CO} :

$$K_{\text{CO}x} = K_{\text{CO}y} = \frac{2\pi}{2R_{\text{bip}}} = \frac{a_0}{2R_{\text{bip}}} \text{ (r.l.u.)}, \quad (2.12)$$

где a_0 – параметр решётки, а r. l. u. – единица обратной решётки: 1 r. l. u. = $2\pi/a$.

Таким образом можно

Используя (2.11) и чётность функции плотности вероятности $|\psi(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2)|^2$, уравнение (2.10) можно существенно упростить:

$$\langle H_{\text{EPI}} \rangle = - \sum_k \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V\varepsilon^*}} |d_k| [\eta(k, 0) + \eta(0, k)] 2 \cos \varphi_k N \delta_{\mathbf{k}\mathbf{K}_{\text{CO}}}, \quad (2.13)$$

$$\eta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \iint |\psi(r'_1, r'_2)|^2 \cos(kr'_1) \cos(k'r'_2) dr'_1 dr'_2.$$

Подстановка выражения для $\langle H_{\text{EPI}} \rangle$ в уравнение (2.9) позволяет выполнить вариационную минимизацию энергии системы по параметрам когерентного состояния фононного поля – амплитуде $|d_{\mathbf{k}}|$ и фазе $\varphi_{\mathbf{k}}$. Вариация функционала по $|d_{\mathbf{k}}|$, который входит только в два последних слагаемых, приводит к следующему результату:

$$|d_{\mathbf{k}}| = \frac{\sqrt{2\pi}}{|k|\sqrt{\varepsilon^*V\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} [\eta(k, 0) + \eta(0, k)] \cos(\varphi_{\mathbf{k}}) N \delta_{\mathbf{k}\mathbf{K}_{\text{CO}}}. \quad (2.14)$$

Минимизация по фазе $\varphi_{\mathbf{k}}$ показывает, что энергетически выгодным значением является $\varphi_{\mathbf{k}} = 0$. Это означает, что при плотности носителей $n > n'_0$ деформация фононного вакуума концентрируется в определённых модах фононного поля с волновыми векторами $\mathbf{K}_{\text{CO}} = n\mathbf{K}_{\text{CO}_x} + m\mathbf{K}_{\text{CO}_y}$, $m, n \in \mathbb{Z}$, отражающими пространственную периодичность $2R_{\text{bip}}$, обусловленную упорядочением биполяронов. Это теоретическое предсказание подтверждается экспериментальными данными, свидетельствующими о смягчении фононных мод вблизи волнового вектора зарядового упорядочения в купратах [4].

Таким образом, в отличие от случая изолированного полярона или биполярона, где деформация фононного вакуума затрагивает широкий спектр мод с длинами волн, превышающими размер АС [34], в системе с высокой плотностью носителей фононная деформация локализуется в узком наборе гармоник. Однако, учёт малого размера областей ближнего порядка “возвращает в игру” гармоники с большими длинами волн и, соответственно, малыми волновыми векторами.

Сумма двух последних членов в уравнении (2.9) для основного состояния принимает форму $-\sum_{\mathbf{k}=\mathbf{K}_{\text{CO}}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} |d_{\mathbf{k}}|^2$ и после подстановки выражения (2.14),

полный функционал энергии становится функцией исключительно электронной волновой функции биполярона.

Для вариационного анализа далее предполагается, что потенциалы, создаваемые внешними по отношению к данному биполярону электронами и поляризационными зарядами, можно считать пренебрежимо малыми. Это допущение оправдано высокой степенью экранирования, обусловленного высоким значением статической диэлектрической проницаемости [9, 23], а также тем, что расстояние между биполяронами значительно превышает характерные размеры внутри одного биполярона. Оставшийся вклад этих взаимодействий будет включён на следующем этапе анализа в виде межкластерного взаимодействия.

В первом приближении минимизация проводится по параметрам когерентного состояния фононного поля ($|d_{\mathbf{k}}|$, $\varphi_{\mathbf{k}}$) и по вариационным параметрам электронной волновой функции при фиксированном размере биполярона. Результатом минимизации по $|d_{\mathbf{k}}|$ и $\varphi_{\mathbf{k}}$ становится: $|d_{\mathbf{k}}| = \frac{\sqrt{2\pi}}{|\mathbf{k}|\sqrt{\varepsilon^*V\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} [\eta(\mathbf{k}, 0) + \eta(0, \mathbf{k})] \cos(\varphi_{\mathbf{k}} - \mathbf{k}\mathbf{R})$ и $\varphi_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}\mathbf{R}$, где \mathbf{R} – радиус-вектор, задающий положение центра биполярона. В случае одиночного биполярона \mathbf{R} можно выбрать равным нулю.

В нашей работе рассматриваются как изотропные, так и анизотропные пробные формы электронной волновой функции. В качестве изотропного варианта используется функция [78]: $\psi(r_1, r_2) = Ae^{-\alpha(r_1^2+r_2^2)}[1 + \beta(r_1 - r_2)^2]$, однако в случае купратных сверхпроводников, характеризующихся выраженной анизотропией электронной дисперсии и отсутствием проводимости вдоль оси, перпендикулярной к плоскости проводимости, анизотропная форма биполярона оказывается энергетически более предпочтительной. Более того, в пределах плоскости проводимости нодальные и антинодальные направления также оказываются неэквивалентными.

Для описания такой ситуации использована форма электронной волновой функции (схематичный рисунок 2.2, а), предложенная Эмином [9]. Здесь мы предлагаем её обобщение на трёхмерный анизотропный случай, в котором

электронная плотность биполярона распределена в четырёх, возможно, сплюснутых сферах. Две из них смещены вдоль оси x , а две другие – вдоль оси y , образуя конфигурацию, отражающую анизотропию среды:

$$\begin{aligned}\psi &= \phi_{x1}\phi_{y2} + \phi_{x2}\phi_{y1}; \\ \phi_{xi} &= \exp\left(-\frac{x_i^2 + y_i^2 + (gz_i)^2}{2R^2}\right) \cosh\left(\frac{lx_i}{R^2}\right); \\ \phi_{yi} &= \exp\left(-\frac{x_i^2 + y_i^2 + (gz_i)^2}{2R^2}\right) \cosh\left(\frac{ly_i}{R^2}\right).\end{aligned}\tag{2.15}$$

Параметры вариации – радиус сфер R , расстояние от центра биполярона до центров сфер l и g – мера анизотропии в направлении, перпендикулярном плоскости CuO_2 .

Таким образом, для каждой фиксированной плотности носителей n проводится вычисление полной энергии системы в соответствии с уравнением (2.3) при различных значениях радиуса биполярона R_{bip} , при условии, что энергия биполярона остаётся отрицательной. Минимизация позволяет определить такое значение R_{bip} , при котором система достигает наиболее энергетически выгодного состояния. В результате строится зависимость радиуса биполярона от плотности носителей. Для представления этой зависимости как функции от уровня допирования p используется соотношение: $p = n3,86^2$. При превышении критической плотности $n > n'_0$, что примерно соответствует уровню допирования $p > 0,04$, в системе формируется зарядовое упорядочение с характерным пространственным периодом, равным удвоенному радиусу биполярона. Связанный с этой периодичностью волновой вектор \mathbf{K}_{CO} определяется из уравнения (2.12).

Следует подчеркнуть, что применимость использованных приближений – адиабатического и континуального – сохраняется и в случае сжатого биполярона. Адиабатическое приближение остаётся справедливым, если кинетическая энергия носителя значительно превышает энергию фононов. Поскольку при уменьшении радиуса биполярона его кинетическая энергия возрастает, выполнение адиабатического условия при сжатии является гарантированным, если оно соблюдалось в несжатом состоянии.

Континуальное приближение также остаётся допустимым, поскольку оно требует, чтобы характерный размер биполярона был существенно больше постоянной решётки. Как будет показано ниже, минимальный радиус, достигаемый при сжатии, составляет порядка 11–12 Å, что значительно превышает межатомное расстояние в проводящих плоскостях купратов.

2.1.1 Учёт взаимодействия между биполяронами одного типа

На следующем этапе анализа учитывается взаимодействие биполяронов одного типа. Это соответствует рассмотрению сжимаемого неидеального газа. В случае достаточно высокой плотности биполяронов, среднее расстояние между ними можно представить как удвоенный радиус биполярона, $2R_{\text{bip}}$. В этих условиях энергия взаимодействия между биполяронами может быть представлена в виде:

$$W(R_{\text{bip}}) = \frac{(2e)^2}{2\varepsilon_0} \sum_{\substack{j_1, j_2=1, \\ j_1 \neq j_2}}^N \frac{1}{|\mathbf{R}_{j_1} - \mathbf{R}_{j_2}|} + H_{\text{comp}}(R_{\text{bip}}), \quad (2.16)$$

где ε_0 – статическая диэлектрическая проницаемость среды, а $H_{\text{comp}}(R_{\text{bip}})$ – энергетический вклад, обусловленный компенсирующими зарядами допирующих ионов, обеспечивающих нейтральность системы. В рамках данного приближения биполяроны рассматриваются как точечные заряды, экранированные ε_0 ; взаимодействие их поляризационных зарядов не учитывается. Вклад от взаимодействия с делокализованными носителями и соответствующим компенсирующим зарядом исключается, так как предполагается их равномерное пространственное распределение и взаимная компенсация.

Таким образом, функционал энергии на единицу площади принимает вид:

$$E = E_{\text{bip}} n_{\text{bip}} + E_{\text{deloc}} + E_{\text{bb}} + E_{\text{bk}} + E_{\text{kk}}, \quad (2.17)$$

где E_{bip} – энергия связи одного биполярона, n_{bip} – плотность биполяронов; E_{deloc} – энергия делокализованных носителей на единицу площади, E_{bb} – плотность

энергии взаимодействия биполярнов, E_{bk} – энергия взаимодействия биполярнов с компенсирующим зарядом автолокализованных носителей на единицу площади, E_{kk} – плотность энергии компенсирующего заряда. Первые два члена определяются аналогично случаю отсутствия взаимодействий.

Потенциал, создаваемый остальными биполярнами в точке нахождения данного биполярна, при моделировании заряда как точечного и учёте экранирования, выражается как:

$$\varphi_{bb} = \frac{2e}{2R_{bip}\epsilon_0} 4 \sum_{i=1}^{N/2} \left(\sum_{j=1}^{N/2} \frac{1}{\sqrt{i^2 + j^2}} + \frac{1}{i} \right). \quad (2.18)$$

При переходе к континуальному приближению тот же потенциал может быть выражен как интеграл по поверхностной плотности заряда:

$$\varphi_{bb} = \int_{R_{bip}}^L \frac{2\pi n_{bip}e}{r\epsilon_0} r dr, \quad (2.19)$$

где L – характерный размер кристаллической области. Сравнительный анализ показывает, что для расстояний, превышающих $16R_{bip}$, дискретное выражение (2.18) может быть заменено интегральной формой (2.19). На этом основании плотность энергии взаимодействия между биполярнами может быть записана как:

$$E_{bb} = \frac{1}{2} en_{bip} \left[\frac{2e}{2R_{bip}\epsilon_0} 4 \sum_{i=1}^8 \left(\sum_{j=1}^8 \frac{1}{\sqrt{i^2 + j^2}} + \frac{1}{i} \right) + \int_{16R_{bip}}^L \frac{2\pi n_{bip}e}{r\epsilon_0} r dr \right]. \quad (2.20)$$

Энергия компенсирующего заряда, распределённого с той же плотностью, что и биполярны, вычисляется аналогично, но с нижним пределом интегрирования, равным нулю:

$$E_{kk} = \frac{1}{2} n_{\text{bip}} e \int_0^L \frac{2\pi n_{\text{bip}} e}{r \epsilon_0} r dr. \quad (2.21)$$

Взаимодействие между биполяронами и компенсирующим зарядом также описывается интегралом типа (2.19), с тем отличием, что между плоскостями их расположения имеется расстояние h . Тогда:

$$E_{bk} = -n_{\text{bip}} e \int_{R_{\text{bip}}}^L \frac{2\pi n_{\text{bip}} e}{\sqrt{r^2 + h^2} \epsilon_0} r dr. \quad (2.22)$$

Подставляя выражения (2.18)–(2.22) в уравнение (2.17), можно показать, что большие члены, возникающие на верхних границах интегралов, взаимно компенсируются. Следует также отметить, что при малой плотности носителей ($n < n'_0$) в уравнениях (2.18) и (2.20) необходимо заменить $R_{\text{bip}} \rightarrow x$, где x определяется из условия $n = \frac{2}{(2x)^2}$.

Каждое слагаемое в уравнении (2.17) зависит от величины R_{bip} , что позволяет определить её оптимальное значение, соответствующее минимуму полной энергии при фиксированном уровне допирования p . Включение взаимодействия между биполяронами приводит к модификации их энергии. Если объединить все члены уравнения (2.17), за исключением энергии делокализованных носителей и энергию компенсирующего заряда, можно определить скорректированную (эффективную) энергию биполярона. Условие устойчивого существования таких автолокализованных состояний состоит в сохранении отрицательного значения этой энергии.

2.1.2 Учёт взаимодействия дырочных и электронных биполяронов. Средняя температура теплового распада зарядового упорядочения

В случае допирования системы дырками возможны два подхода к рассмотрению формирующихся автолокализованных состояний. Первый подход

такой же, как и для электронного допирования. Но в этом подходе не учитываются принципиальные различия систем.

При допировании дырками они появляются вблизи вершины нижней половины нижней хаббардовской зоны, при этом электронные биполярны существуют вблизи дна зоны и остаются в основном состоянии даже при полном заполнении зоны. Это обусловлено тем, что делокализованные носители не могут эффективно экранировать электрон-фононное взаимодействие внутри биполярона в силу действия принципа Паули, как описано в подразделе 2.1.

Наличие отрицательного поляризационного окружения делает энергетически выгодным размещение положительно заряженных дырочных биполярнов в промежутках между электронами. Таким образом, в системе возникает сжимаемая биполяронная жидкость, состоящая из электронных и дырочных биполярнов. Такой подход является вторым вариантом рассмотрения случая дырочного допирования. Период зарядового упорядочения в таком случае определяется равновесием биполярнов обоих знаков и делокализованных дырок. Отметим, что хоть при низких уровнях допирования возможно образование дырочных поляронов, в данной работе их вклад не рассматривается ввиду усложнения расчётов и незначительного влияния на поведение системы.

Для дальнейшего анализа нижняя хаббардовская зона делится на две области: нижнюю часть (в окрестности точки Γ первой зоны Бриллюэна при $k < K$), в которой носители могут быть как локализованными, так и делокализованными, и верхнюю часть ($k > K$), где носители всегда находятся в делокализованном состоянии. Вклад делокализованных электронов в верхней части НХЗ остаётся постоянным, а значит может быть исключён из варьирования.

Минимизация полной энергии системы осуществляется по сумме вкладов локализованных и делокализованных электронов из нижней части нижней хаббардовской зоны, локализованных и делокализованных дырок, а также всех форм взаимодействий между биполяронными состояниями и компенсационными зарядами. Общая плотность энергии записывается в виде:

$$E = E_{\text{ebip}}n_{\text{ebip}} + E_{\text{hbip}}n_{\text{hbip}} + E_{\text{edeloc}} + E_{\text{hdeloc}} + E_{\text{bb}} + E_{\text{bbk}} + E_{\text{bhk}} + E_{\text{bk}} + E_{\text{hh}} + E_{\text{hhk}} + E_{\text{hbk}} + E_{\text{hk}} + E_{\text{hb}} + E_{\text{hbk}}. \quad (2.23)$$

В случае дырочного допирования каждый дырочный биполярон, как правило, окружён электронными, что приводит к уменьшению его размера приблизительно в $\sqrt{2}$ раза по сравнению с размером электронного биполярона при электронном допировании.

Проанализируем отличия в минимизации энергии анизотропной системы для случая дырочного допирования с учётом межбиполяронного взаимодействия, с использованием пробной волновой функции, заданной выражением (2.15). В данной конфигурации дырочные биполяроны принимают форму ромбов с длиной стороны $2a = 2R_{\text{bip}}/\sqrt{2}$, что проиллюстрировано на рисунке 2.1 (в). Аналогичная геометрия характерна и для электронных биполяронов при условии $n > n_0 = 2/(2R_{\text{bip}})^2$.

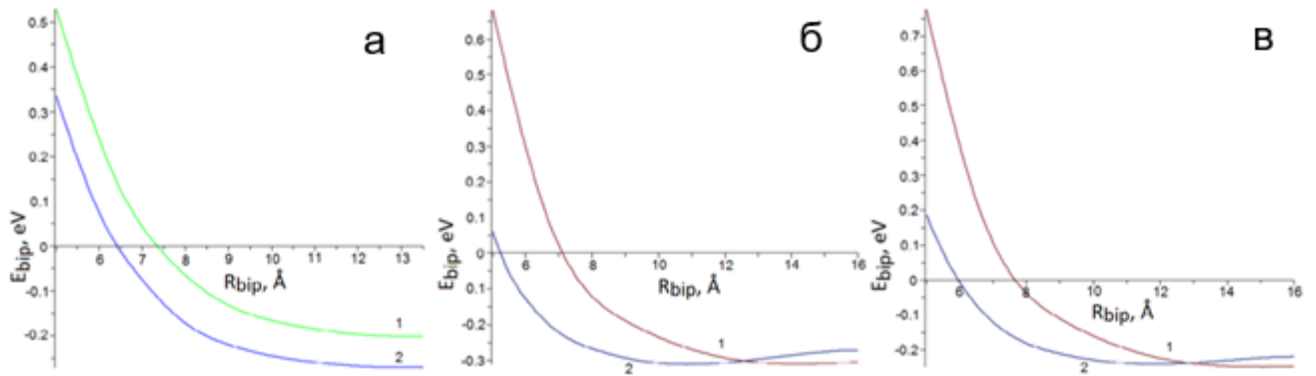


Рисунок 2.3. Зависимость энергии связи биполярона от его радиуса: (а) в изотропной системе с $m^* = m_e$, кривые 1 и 2 соответствуют $1/\epsilon^* = 0.3$ и 0.28 , соответственно; (б) и (в) в анизотропной системе с $m^* = m_e$ в проводящей плоскости и $m^* = 10m_e$ в перпендикулярном направлении, при $1/\epsilon^* = 0.3$, $\epsilon_0 = 30$ и при $1/\epsilon^* = 0.27$, $\epsilon_0 = 60$, соответственно, кривые 1 и 2 показывают энергию связи квадратного биполярона (со стороной $2R_{\text{bip}}$) и ромбический со стороной $2a = 2R_{\text{bip}}/\sqrt{2}$), соответственно, как показано на рисунке 2.1, в.

Вычисление энергии связи таких биполяронов осуществляется по аналогии с соответствующими расчётами для электронного или дырочного допирования при отсутствии межбиполярного взаимодействия, обозначаемой $E_{\text{bip}}(R_{\text{bip}})$. Однако в силу специфики геометрии области интегрирования – в данном случае ромбовидной (см. рисунок 2.1, в) энергетические характеристики дырочного биполярона, обозначаемые $E_{\text{rh_bip}}(R_{\text{bip}})$, отличаются от $E_{\text{bip}}(R_{\text{bip}})$. Соответствующие расчётные зависимости представлены кривой 2 (рисунки 2.3, б и в).

При значениях плотности носителей ниже критического уровня $n < n_0$ применяется линейная интерполяция для энергии связи электронного биполярона: $E_{\text{ebip}} = E_{\text{rh_bip}}(R_{\text{bip}})n/n_0 + E_{\text{bip}}(R_{\text{bip}})(1 - n/n_0)$.

Для определения плотности энергии делокализованных электронов, находящихся в нижней части НХЗ, применяется тот же параболический закон дисперсии в окрестности минимума зоны, что и в выражении (2.4), поскольку соответствующие эффективные массы носителей имеют близкие значения [40]. В этом приближении энергия делокализованных электронов определяется следующим интегралом:

$$E_{\text{deloc}} = \int_S \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \cdot \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}, \quad (2.24)$$

где область интегрирования S представляет собой область импульсного пространства, ограниченную двумя ромбами с длинами сторон $k_0\sqrt{2}$ и $K\sqrt{2}$. Значение K соответствует максимальному импульсу в нижней части НХЗ, определяющейся границей области в которой носители находятся либо в автолокализованном, либо в делокализованном состоянии. Это значение вычисляется исходя из минимально возможного размера биполярона с длиной стороны a_{min} , аналогично уравнению (2.2): $K = \pi/(2a_{\text{min}})$. Аналогично производится расчёт плотности энергии для делокализованных дырок. В этом случае соответствующее выражение имеет вид:

$$E_{\text{hdeloc}} = \int_{S'} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \cdot \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}, \quad (2.25)$$

где область интегрирования S' представляет собой область импульсного пространства между значениями $k_0\sqrt{2}$ и k_f , где k_f определяется степенью дырочного допирования согласно уравнению (2.5).

Взаимодействие между электронными биполяронами, а также соответствующий компенсационный заряд, рассчитываются в соответствии с уравнениями (2.19) – (2.22), аналогично случаю электронного допирования. Однако при этом плотность биполяронов n_{bip} заменяется на n_0 , где n_0 – плотность электронов, образующих электронные биполяроны; в то время как новую переменную n_{bip} будем использовать для обозначения плотности дырок в дырочных биполяронных состояниях.

Дырочные биполяроны размещаются (схематичные рисунки 2.1, б и в) между электронными биполяронами. Удобным выбором элементарной ячейки такой структуры является квадрат со стороной $4R_{\text{bip}}$, вершины которого совпадают с центрами электронных биполяронов (рисунок 2.4). При соотношении $n/n_0 = 1/4$ каждая такая элементарная ячейка содержит (см. рисунок 2.4, а) один дырочный биполярон.

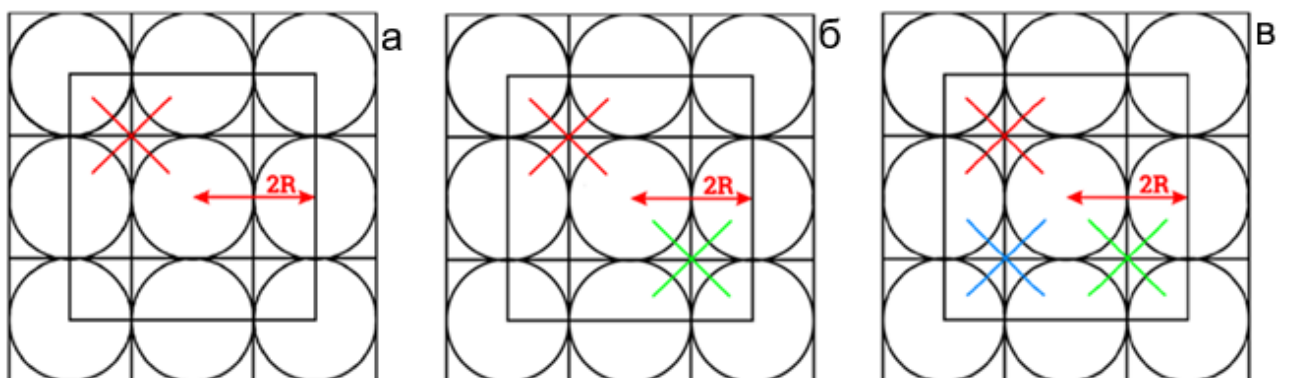


Рисунок 2.4 - Расположение электронных и дырочных биполяронов в «элементарной ячейке» для изотропного случая при $n/n_0 = 1/4$, $2/4$ и $3/4$, соответственно.

По аналогии с рассмотренным ранее случаем электронного допирования, расчёт создаваемого дырочными автолокализованными состояниями потенциала осуществляется на основе приближенной модели, в которой на малых расстояниях заряды трактуются как точечные, а на больших – как непрерывно распределённые. В частности, в диапазоне до расстояния $16R_{bip}$ потенциал моделируется как суперпозиция кулоновских потенциалов дискретных зарядов. Для расстояний, превышающих $16R_{bip}$, используется приближение непрерывного распределения заряда, что позволяет упростить вычисления на макроскопических масштабах.

В результате, полный потенциал можно представить в виде суммы двух слагаемых, соответствующих различным диапазонам расстояний. Первый вклад от области $[R_{bip}, 16R_{bip}]$, обусловлен взаимодействием с дискретными (точечными) источниками поля:

$$\varphi_{hh1} = \frac{2e}{2R_{bip}\epsilon_0} \cdot \frac{n}{n_0} \cdot 4 \sum_{i=1}^8 \left(\sum_{j=1}^8 \frac{1}{\sqrt{(2i)^2 + (2j)^2}} + \frac{1}{2i} \right). \quad (2.26)$$

Второй вклад – от области $[16R_{bip}, L]$, описываемый в рамках модели непрерывно распределённого заряда:

$$\varphi_{hh1} = \int_{16R_{bip}}^L \frac{2\pi}{4r\epsilon_0} \cdot \frac{n}{n_0} \cdot r dr. \quad (2.27)$$

Предполагается, что при условии $0 < n/n_0 < 1/4$ потенциал, создаваемый дырочными биполяронами, линейно возрастает с увеличением плотности носителей и пропорционален отношению n/n_0 . В этом диапазоне концентраций энергия взаимодействия между дырочными автолокализованными состояниями принимает следующий вид:

$$E_{hh1} = \frac{e}{2} \cdot n \cdot \left[\frac{2e}{2R_{bip}\epsilon_0} \cdot \frac{n}{n_0} \cdot 4 \sum_{i=1}^8 \left(\sum_{j=1}^8 \frac{1}{\sqrt{(2i)^2 + (2j)^2}} + \frac{1}{2i} \right) + \int_{16R_{bip}}^{\infty} \frac{2\pi n}{4r\epsilon} \cdot r dr \right], \quad (2.28)$$

где область радиусов $[0, R_1]$ ограничена величиной $R_1 = \sqrt{1/8n}$.

Потенциалы, соответствующие различным диапазонам концентраций дырок, определяются аналогично уравнению (2.26). Так, в интервале $[n_0/4, n_0/2]$ потенциал φ_{hh3} вычисляется как:

$$\varphi_{hh2} = \frac{2e}{2R_{bip}\epsilon_0} \cdot \frac{n}{n_0} \cdot 4 \sum_{i=1}^8 \left(\sum_{j=1}^8 \frac{1}{\sqrt{(2i-1)^2 + (2j-1)^2}} \right), \quad (2.29)$$

а в последующих интервалах $[n_0/2, 3n_0/4]$ и $[3n_0/4, n_0]$, потенциалы φ_{hh3} и φ_{hh4} принимают одинаковый вид:

$$\varphi_{hh3} = \varphi_{hh4} = \frac{2e}{2R_{bip}\epsilon_0} \cdot \frac{n}{n_0} \cdot 4 \sum_{i=1}^8 \left(\sum_{j=1}^8 \frac{2}{\sqrt{(2i-1)^2 + (2j)^2}} + \frac{2}{\sqrt{(2i)^2 + (2j-1)^2}} + \frac{2}{2i-1} \right). \quad (2.30)$$

Потенциал в области $[16R_{bip}, L]$ рассчитывается на основе выражения (2.27) на примерах (см. рисунки 2.4, б и в) размещения дырочных биполяронов. При $n = n_0$ результирующий потенциал, создаваемый дырочными биполяронами, идентичен потенциалу электронных биполяронов:

$$\varphi_{hh1} + \varphi_{hh2} + \varphi_{hh3} + \varphi_{hh4} = \varphi_{bb}. \quad (2.31)$$

Таким образом, функция энергии взаимодействия дырочных АС оказывается кусочно-определённой в интервалах: $[0, R_1]$, $[R_1, R_2]$, $[R_2, R_3]$, $[R_3, R_4]$, $[R_4, L]$, и формируется на основе соответствующих потенциалов φ_{hh1} , φ_{hh2} , φ_{hh3} , φ_{hh4} , φ_{bb} .

Потенциал, создаваемый электронными АС в точке нахождения дырочного биполярона, можно представить как:

$$\varphi_{\text{hb}} = \frac{2e}{2R_{\text{bip}}\epsilon_0} \cdot 4 \sum_{i=1}^8 \left(\sum_{j=1}^8 \frac{1}{\sqrt{(i-0,5)^2 + (j-0,5)^2}} \right) + \int_{16R_{\text{bip}}}^{\infty} \frac{2\pi n_0}{r\epsilon_0} r dr, \quad (2.32)$$

что позволяет определить энергию взаимодействия между электронными и дырочными автолокализованными состояниями как:

$$E_{\text{hb}} = -ne \left[\frac{2e}{2R_{\text{bip}}\epsilon_0} \cdot 4 \sum_{i=1}^8 \left(\sum_{j=1}^8 \frac{1}{\sqrt{(i-0,5)^2 + (j-0,5)^2}} \right) + \int_{16R_{\text{bip}}}^{\infty} \frac{2\pi n_0}{r\epsilon_0} r dr \right]. \quad (2.33)$$

Энергию взаимодействия АС с соответствующими компенсирующими зарядами можно определить так же, как и в случае допирования электронами (см. уравнение (2.22)), за исключением пространственного расположения компенсирующего заряда. В то время как в случае допирования электронами он распределён с плотностью n_0 в той же проводящей плоскости, где находятся АС, компенсирующий заряд дырочных АС располагается в параллельной плоскости (в области расположения допирующих ионов), находящейся на расстоянии h от проводящего слоя. Энергия взаимодействия между этими зарядами имеет следующий вид:

$$E_{\text{hkbk}} = -n \cdot \int_0^{\infty} \frac{2\pi n_0}{\sqrt{r^2 + h^2}\epsilon_0} \cdot r dr \quad (2.34)$$

Энергия самих компенсирующих зарядов аналогична выражению для случая электронного допирования (уравнение (2.21)), с заменой $n_0 \rightarrow n$ в расчетах для дырочных состояний. Как можно убедиться, при подстановке в уравнение (2.23)

вклады компенсирующих зарядов в энергетическое взаимодействие взаимно сокращаются, как и в случае допирования электронами.

Температура распада ЗУ будет подробнее рассмотрена в главе 3, здесь же приведём выражение для оценки этой температуры:

$$T_{CO} \approx 0,278E \left(\frac{m^*u}{\varepsilon^* \hbar k_0} \right)^{0,176}, \quad (2.35)$$

где E – модуль энергии автолокализованного состояния, m^* – эффективная масса носителя, u – максимальная групповая скорость фононов, принимающих участие в формировании автолокализованных состояний [69, 79].

2.2 Расчёт резонансного упругого рассеяния рентгеновских лучей на полученном основном состоянии системы

ЗУ в купратах активно исследуется с использованием методов резонансного упругого рентгеновского рассеяния (REXS) [28 - 31], что делает актуальным рассмотрение проявлений рассчитанного основного нормального состояния исследуемой системы в спектрах рассеяния. Отметим, что при применении REXS к купратным соединениям энергия рентгеновского излучения соответствует переходам электронов из $2p$ -состояния в $3d$ [31], формирующих структуру ЗУ. Ввиду этого, при моделировании сигнала REXS для систем с дырочным допированием учитывается наличие пустых d^9 -состояний, появляющихся в результате допирования и ответственных за формирование ЗУ.

Следует подчеркнуть, что каждая из четырёх наиболее вероятных положений локализованных носителей в пределах одного биполярона (рисунок 2.2, а) обладает равной вероятностью, однако в каждый момент времени заняты только две из них. Предполагается, что в структуре купратов максимумы волновой функции Эмина (см. уравнение (2.15)) смещены вдоль направлений, соответствующих наименьшему сопротивлению движению носителей – то есть вдоль связей Cu–O.

С учётом того, что характерная длина когерентности ЗУ в купратах сравнительно не велика, порядка 4–5 периодов ЗУ, в моделировании вводятся

относительные смещения между биполярными кластерами, как на примере пространственной конфигурации наиболее вероятных положений носителей с учётом таких смещений (см. рисунок 2.2, б).

Для описания мгновенных положений носителей внутри биполярона, вероятность которых определяется распределением Гаусса (2.15), применяется приближённое трёхступенчатое вероятностное распределение (см. рисунок 2.2, а). Согласно данной модели, случайное отклонение носителя от наиболее вероятной позиции принимается каждый раз в случае попадания в область максимальной плотности вероятности - во внутреннюю зону. При попадании в среднюю зону отклонение принимается с вероятностью 1/2, а для внешней – с вероятностью 1/4. Такая схема позволяет имитировать флуктуации положений носителей в пределах биполярона с учётом пространственной структуры волновой функции. Иллюстрацией итогового распределения мгновенных положений автолокализованных носителей является рисунок 2.2, в.

Наконец, для оценки сигнала REXS от полученного распределения носителей, рассеянная волна вычисляется как суперпозиция волн, рассеянных каждым индивидуальным носителем с учётом соответствующей фазовой составляющей [31]:

$$S = \sum_{m=1}^n e^{ikr_m} . \quad (2.36)$$

Для каждого значения волнового вектора проводится генерация ряда реализаций конфигурации носителей, на основе которых далее вычисляется усреднённая интенсивность рассеяния согласно выражению:

$$I = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N [(\operatorname{Re} S_j)^2 + (\operatorname{Im} S_j)^2], \quad (2.37)$$

где N – количество сгенерированных конфигураций мгновенного расположения носителей внутри биполяронов. Расчёт показывает, что 20 конфигураций достаточно для получения усреднённой картины.

Используемая модель позволяет оценить характеристики рассеяния, в частности полуширину на половине максимума пика REXS вблизи волнового вектора \mathbf{K}_{CO} как функцию угла поворота. Особенно интересным представляется сопоставление полученной в рамках модели угловой зависимости ширины пика с экспериментальными данными, полученными для купратов на основе иттрия [28]. В частности, важным аспектом анализа является сравнение полученной асимметрии полуширины на полумаксимуме вдоль двух антинодальных направлений. Сами результаты расчётов будут представлены дальше, в подразделе 2.4.

2.3 Влияние потенциала автолокализованных носителей на спектр делокализованных

Как уже говорилось выше, системы с сильным дальнедействующим ЭФВ и высокой плотностью носителей заряда отличаются сосуществованием автолокализованных и делокализованных носителей. Периодическое распределение АС в координатном пространстве эффективно рассеивает рентгеновские лучи, распространяющиеся вдоль антинодальных направлений. Это также влияет на распространение блоховских волн, соответствующих делокализованным состояниям носителей. Это явление напоминает хорошо известный эффект фотонного кристалла. Для изучения этого проявления ЗУ рассмотрим делокализованный носитель, распространяющийся вдоль оси x или y на фоне потенциала, создаваемого биполяронами зарядового упорядочения.

В исследовании используется простейшая модель среды с периодически модулированным (гармоническим) электрическим потенциалом, обусловленным распределением заряда биполяронов. Каждый период потенциала разбивается на большое число слоёв с постоянным потенциалом в слое и применяется стандартный матричный метод для описания распространения квантовых частиц через слоистую среду. Матрица, связывающая амплитуды волновых функций слева и справа от границы между слоями, получается из стандартных граничных условий. Эффект многослойности описывается как умножение этих матриц. Распространение

квазичастиц с заданной энергией в непоглощающей среде легко вычисляется из полученной матрицы.

Здесь мы рассмотрели только случай, когда волновые векторы делокализованных носителей перпендикулярны слоям с разным потенциалом. Эта упрощённая модель позволяет рассматривать только электроны с импульсами в антинодальных направлениях. Для изучения зависимости щели, возникающей в спектре делокализованных носителей, от уровня допирования и направления волнового вектора необходимо учитывать рассеяние носителей по всей первой зоне Бриллюэна.

2.4 Численное моделирование свойств основного состояния

Для расчёта периода ЗУ как функции уровня допирования описанным выше вариационным методом требуется энергия связи биполярона при его заданном радиусе как функции последнего. Для расчётов энергии изотропного (рисунок 2.5, а) и анизотропного биполярона (см. рисунок 2.5, б и в) в зависимости от размера биполярона использовались два значения ϵ^* , близких к единице, полученных из спектров ARPES купратов. Для анизотропного случая при расчёте энергии биполярона использовались два значения статической диэлектрической проницаемости: $\epsilon_0 = 30$ и 60 . На примерах зависимости равновесного радиуса биполярона от уровня допирования без учёта взаимодействия биполяронов (см. рисунок 2.5) первые две кривые соответствуют расчётам для изотропной системы с использованием значений обратной эффективной диэлектрической проницаемости $1/\epsilon^* = 0,28$ и $0,3$. Третья кривая соответствует расчёту для анизотропного биполярона с волновой функцией (2.15) при $1/\epsilon^* = 0,3$. Все три кривые совпадают с функцией (см. рисунок 2.5, а), которая имеет вид $R_{\text{bip}}^2 p = b$, $b \approx 7,26 \text{ \AA}^2$ с разницей только в уровнях насыщенности при низких и высоких p .

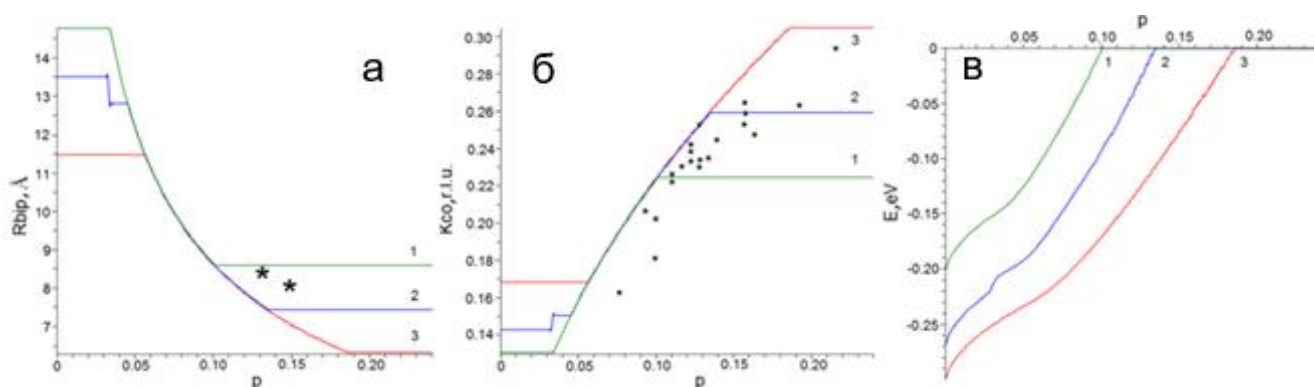


Рисунок 2.5 – Зависимость от уровня допирования равновесного радиуса биполярона (а), волнового вектора ЗУ (б) и энергии биполярона (в), соответственно, рассчитанные без учёта взаимодействия биполяронов. Кривые 1 (зелёная) и 2 (синяя) соответствуют случаю изотропной системы с $1/\epsilon^* = 0.28$ и 0.3 , соответственно, $m^* = m_e$; кривые 3 (красные) показывают результаты расчёта для анизотропного биполярона при $1/\epsilon^* = 0.3$, $m_{\perp}^* = 10m_{\parallel}^*$ где $m_{\parallel}^* = m_e$ и m^* – эффективная масса носителя в проводящей плоскости и в перпендикулярном направлении, соответственно. Звёздочками на панелях (а) и (б) приведены экспериментальные результаты для купратов, допированных электронами [29] и купратов на основе La [31], соответственно (точнее, на панели (а) изображены R_{bip} рассчитанные с помощью уравнения (2.12) с использованием K_{CO} из эксперимента на допированном электронами купрате [6], чтобы изобразить его отдельно от случая дырочного допирования, показанного на панели (б)).

Такой результат получается из-за исключения из системы делокализованных носителей вследствие выигрыша в энергии из-за отрицательности энергии биполяронов. Выход на постоянное значение радиуса в области высоких уровней допирования соответствует пределу сжимаемости биполярона. Эти значения определяются как минимальный радиус биполярона с отрицательной энергией. В области слабого допирования значения радиуса соответствуют радиусу одиночного (несжатого) биполярона.

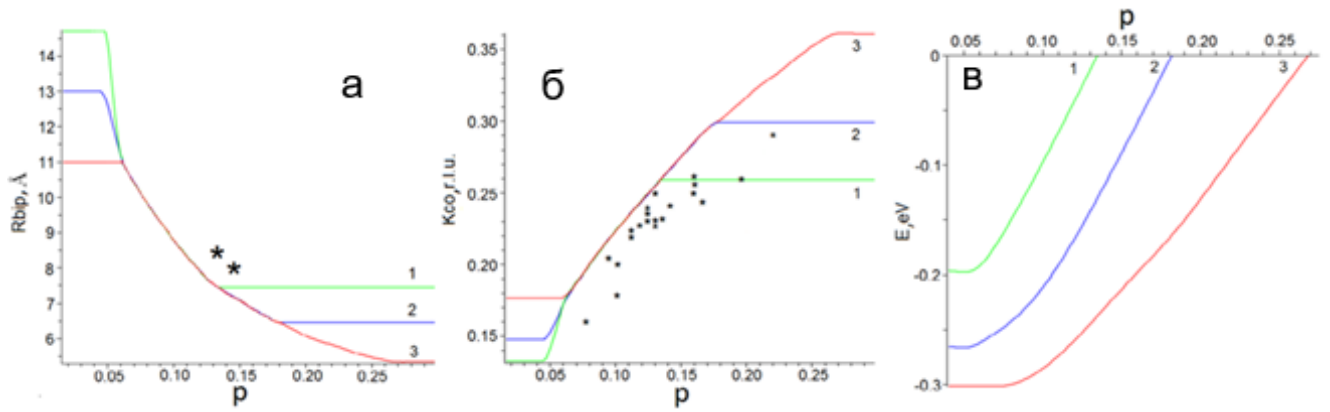


Рисунок 2.6. – Зависимость от уровня допирования равновесного радиуса биполярона - (а), волнового вектора ЗУ - (б) и энергии биполярона - (в), соответственно, рассчитанные с учётом взаимодействия биполяронов для одного типа биполяронов. Кривые 1, 2 и 3 соответствуют случаям изотропного биполярона при $1/\epsilon^* = 0.28$ и 0.3 , $m^* = m_e$ и анизотропного биполярона при $1/\epsilon^* = 0.3$, $m_{\perp}^* = 10m_{\parallel}^*$, $m_{\parallel}^* = m_e$, соответственно. Звёздочками на панелях (а) и (б) приведены экспериментальные результаты для купратов, допированных электронами [29] и купратов на основе La [31], соответственно (точнее, на панели (а) изображены R_{bip} , рассчитанные с помощью уравнения (2.12) с использованием K_{CO} из эксперимента на допированном электронами купрате [6], чтобы изобразить его отдельно от случая дырочного допирования, показанного на панели (б).

Кривые 3 (см. рисунки 2.5, а и б) соответствуют анизотропным системам. Эффективная масса носителя для этого случая в десять раз больше в направлении z , чем в направлениях x и y : $m_z^* = 10m_e$, $m_x^* = m_y^* = m_e$. Это приводит к более компактному биполярону в области низкой и высокой плотности носителей, поскольку средняя кинетическая энергия носителей оказывается меньше, чем в изотропной системе. На рисунке 2.5 (в) представлены зависимости энергии связи биполяронов от уровня допирования.

Значки звезды (см. рисунки 2.5, а и б) соответствуют экспериментальным данным, полученным в системе с электронным допированием [29], и в системах на основе лантана, допированных дырками, соответственно. Как видно из сравнения с экспериментальными данными, характер и скорость изменения периода

зарядового упорядочения с допированием в электронно-допированной системе находятся в согласии с полученными в расчёте. Рассчитанная без учёта взаимодействия биполярнон зависимость волнового вектора зарядового упорядочения от уровня допирования также находится в хорошем согласии с измеренной в купратах на основе лантана. Такое совпадение можно объяснить большим периодом зарядового упорядочения в купратах на основе лантана по сравнению с купратами на основе иттрия и висмута. Взаимодействие биполярнон на большом расстоянии не сильно влияет на общую энергию. Для дырочно-допированных систем период ЗУ без учёта взаимодействия биполярнон рассчитывается так же, как и для случая электронного допирования.

Далее представлены (см. рисунок 2.6) те же зависимости, что и ранее (см. рисунок 2.5), но рассчитанные с учётом взаимодействия между биполярнон согласно уравнению (2.17) при наличии одного типа биполярнон. Как показывает сравнение рисунков 2.5 и 2.6, при низком допировании результаты идентичны за исключением энергии биполярнон. Различия возникают в области высоких уровней допирования. При учёте межбиполярнон взаимодействия значения насыщения радиуса биполярнон оказывается больше, а значит значения насыщения для волнового вектора ЗУ оказываются меньше. Такие различия объясняются кулоновским отталкиванием биполярнон. Насыщение, наблюдаемое в теоретической и экспериментальной зависимости $K_{Co}(p)$ с увеличением уровня допирования, возникает на значениях уровня допирования, при которых в системе появляются делокализованные носители, сосуществующие с биполярнон. Дальнейшее увеличение уровня допирования приводит к возрастанию плотности делокализованных носителей.

Из зависимостей волнового вектора ЗУ $K_{Co}(p)$ от уровня допирования для систем допированных дырками (рисунок 2.7, а и б), рассчитанных с учётом взаимодействия между биполярнон обоих зарядов, Видно, что энергия системы, рассчитанная с помощью уравнения (2.23), имеет минимум при других значениях радиуса биполярнон при том же уровне допирования по сравнению с полученной с использованием уравнения (2.3) или (2.17).

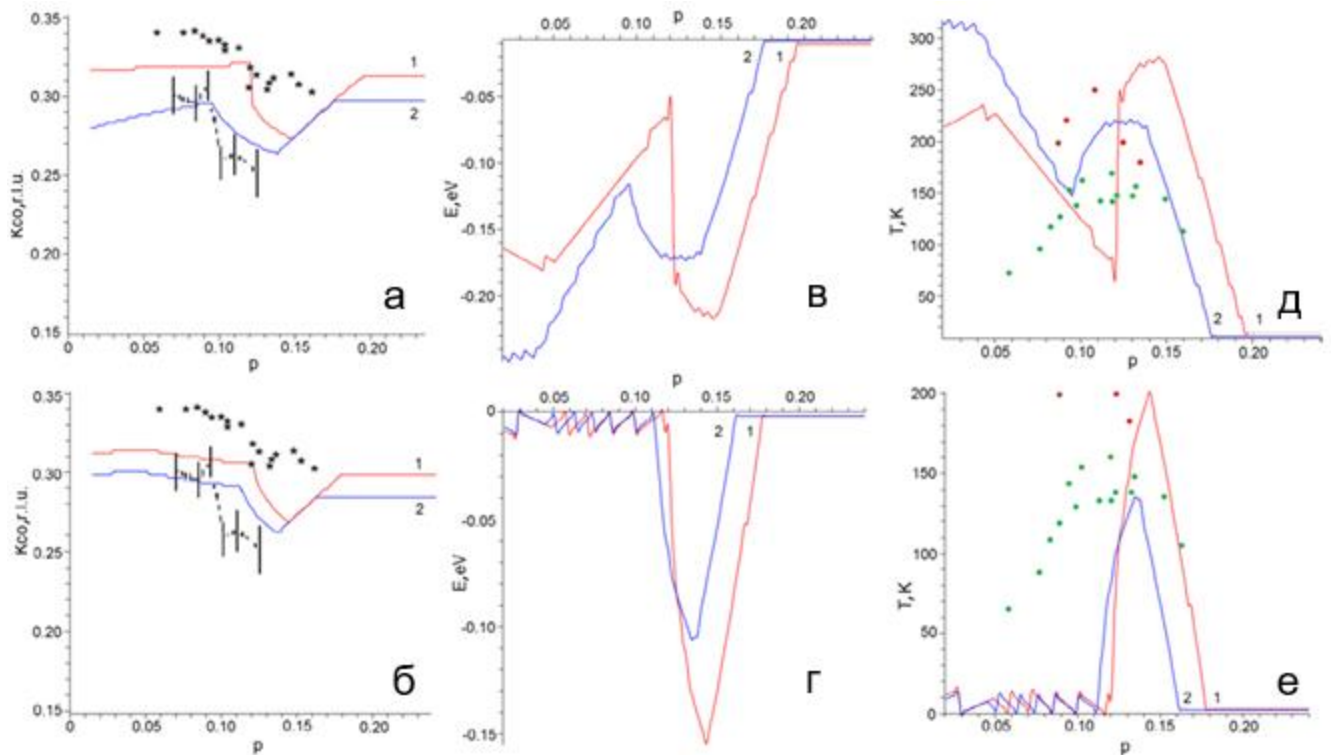


Рисунок 2.7 – Зависимость волнового вектора ЗУ в системе с дырочным допированием, рассчитанная с учётом взаимодействия биполяронов для анизотропной системы с $m_{\perp}^* = 10m_{\parallel}^* = 10m_e$ при $\epsilon_0 = 30$ и $\epsilon_0 = 60$, соответственно; кривые 1 и 2 соответствуют $1/\epsilon^* = 0.3$ и 0.27 , соответственно; звёздочками изображены экспериментальные результаты купратов на основе иттрия [31], а вертикальные линии – экспериментальные данные (с учётом шибки измерений), полученные на $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ [26] – (а) и (б); энергия дырочного биполярона, рассчитанная с учётом взаимодействия биполяронов при $\epsilon_0 = 30$ и $\epsilon_0 = 60$, соответственно, кривые 1 и 2 соответствуют $1/\epsilon^* = 0.3$ и 0.27 , соответственно – (в) и (г), и средняя температура распада дырочных биполяронов (и ЗУ), рассчитанная из энергии биполяронов, показанной на панелях (б) и (в), согласно уравнению (2.35); кружки – экспериментальные данные [31] по температуре исчезновения ЗУ в системах на основе висмута (красные кружки на верхней части обеих панелей) и иттрия (зелёные кружки) – (д) и (е).

Такое уменьшение K_{CO} при промежуточном допировании наблюдалось экспериментально в системе $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$. Экспериментальные результаты, полученные на этой системе [26], показаны вертикальными линиями,

демонстрирующими возможную погрешность измерений (см. рисунки 2.7, а и б). Чуть менее резкое уменьшение значения волнового вектора ЗУ наблюдается и в экспериментальных результатах по купратам на основе иттрия [31], показанных звёздочками.

При дальнейшем увеличении уровня допирования зависимость $K_{CO}(p)$ следует функции, аналогичной $K_{CO}(p)$ в электронно-допированной системе: с увеличением уровня допирования наблюдается рост K_{CO} с дальнейшим выходом на постоянное значение. Однако значения насыщения K_{CO} различны, как и уровень допирования, при котором оно достигается. В области сильного допирования может не наблюдаться насыщения (см. рисунки 2.7, в и г) из-за близкой к нулю энергии дырочных биполяронов.

Температуру распада ЗУ как функцию уровня допирования, оценённую с помощью уравнения (2.35), демонстрируют построенные кривые (см. рисунки 2.7, д и е). Отношение максимальной групповой скорости фононов u к максимальной скорости носителей в биполяроне $\hbar k_0/m^*$ было получено из экспериментального рассеяния фононов на YBCO вблизи K_{CO} [4]. Следует отметить, что изменение этого соотношения незначительно влияет на температуру распада ЗУ. Круги на рисунках 2.7 (д) и (е) соответствуют экспериментальным данным, наблюдаемым в купратах [31].

Поскольку в предложенном подходе ЗУ и ВЭА ("вертикальная дисперсия") в спектре ARPES купратов имеют одинаковое происхождение, он предсказывает связь между волновым вектором ЗУ и волновым вектором ВЭА в ARPES. А именно, "вертикальная дисперсия" появляется в спектре ARPES системы с сильным дальнедействующим ЭФВ и высокой плотностью носителей при волновом векторе k_0 , разделяющем пространство импульсов между автолокализованными и делокализованными электронами [42]. Этот волновой вектор определяется радиусом биполярона в соответствии с уравнениями (2.1) и (2.2). Волновой вектор зарядового упорядочения K_{COx} также определяется радиусом биполярона R_{bir} в соответствии с уравнением (2.12) и в два раза больше k_{0x} (2.2). Однако для представления экспериментальных результатов, полученных с помощью ARPES и

с помощью REXS или СТМ, обычно используются разные единицы измерения волнового вектора: в первом случае волновой вектор выражается в единицах π/a_0 [7, 75, 76], а во втором – в г. л. у. ($1 \text{ г. л. у.} = 2\pi/a_0$). Выраженные в этих единицах расчётные k_{0x} и $K_{\text{CO}x}$ имеют одинаковые значения.

Это предсказание согласуется с экспериментальными результатами по зарядовому упорядочению, полученными с помощью REXS или СТМ и накопленными в [31], и по ВЭА в спектре ARPES купратов [7, 12, 75, 76].

Как указывалось ранее, одним из ключевых экспериментальных подходов к исследованию зарядового упорядочения в купратных материалах является метод REXS. Здесь представлены результаты численного моделирования сигнала REXS от зарядового упорядочения, формирующейся в анализируемой системе за счёт биполярной жидкости [A1, A5]. Расчёты проведены в соответствии с методикой, изложенной в подразделе 2.2. В первую очередь была исследована зависимость интенсивности рассеяния от направления и от плотности носителей заряда:

Расчётные данные для нодального (рисунок 2.8, а) и антинодального направлений (рисунок 2.8, б), демонстрирующие хорошее соответствие с результатами, полученными в экспериментальных исследованиях [30] и рассчитанные интенсивности REXS для нескольких значений концентрации носителей (см. рисунок 2.8, б). Дополнительно был проведён анализ устойчивости пика, соответствующего ЗУ в антинодальном направлении, при варьировании пространственных сдвигов между биполярными кластерами (см. рисунок 2.8, г), а также при увеличении концентрации делокализованных носителей (см. рисунок 2.8, в).

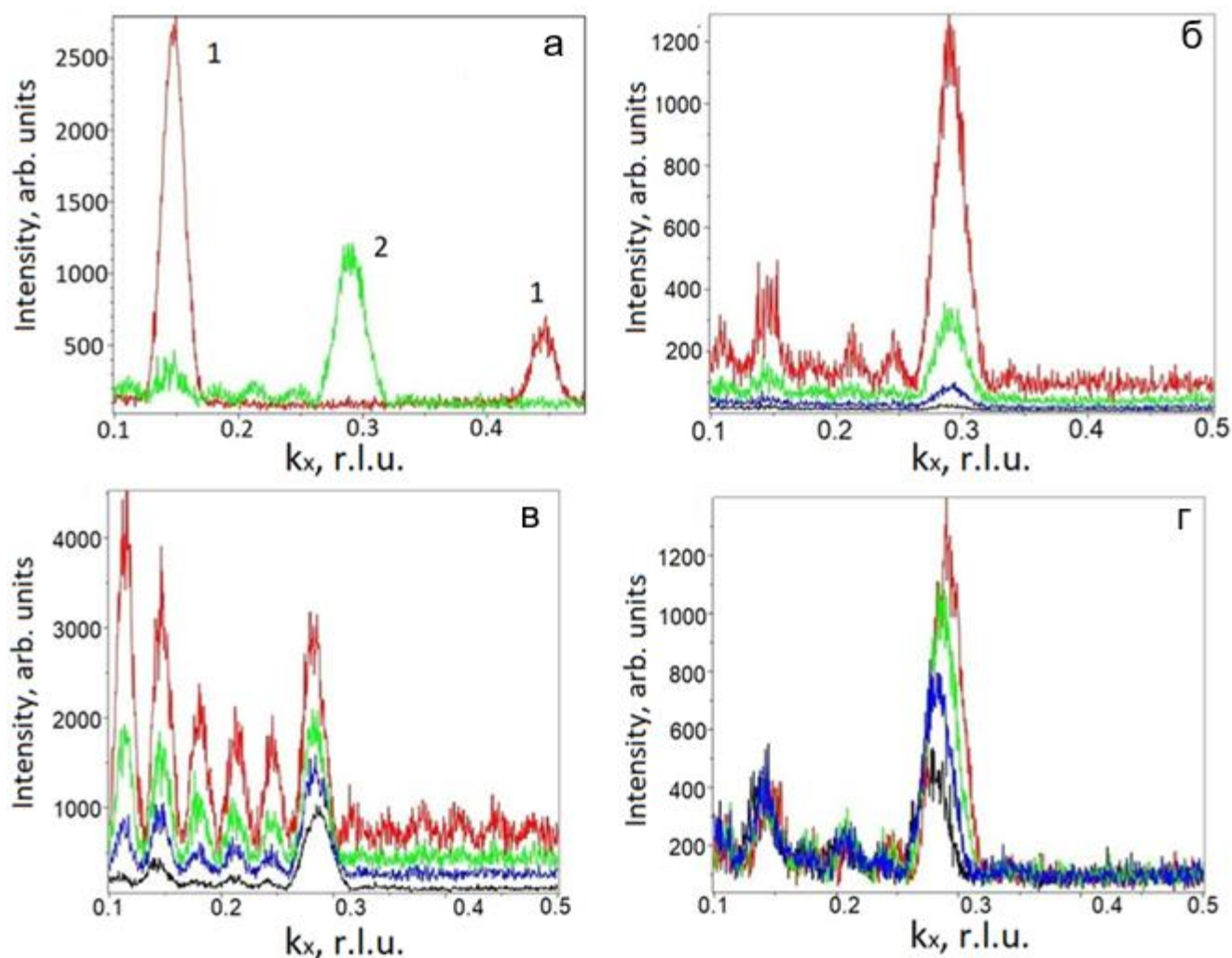


Рисунок 2.8 – Спектры REXS, рассчитанные при высокой плотности биполяронов (пример мгновенных позиций носителей показан на рисунок 2.2, в) в нодальном (кривая 1, красная) и антинодальном (кривая 2, зелёная) направлениях как функции k_x , расстояния между кластерами биполяронов вдоль осей x и y составляют $\Delta x = 6a/81$, $\Delta y = 6a/80$ – (а); Спектры REXS в антинодальном направлении, рассчитанные для четырёх уровней допирования, от нижней кривой к верхней: 5, 10, 20 и 40 позиций биполяронов заполнены из 40 возможных, соответственно, $\Delta x = a/15$, $\Delta y = a/14$ – (б); спектры REXS в антинодальном направлении, рассчитанные при различной плотности делокализованных носителей, от нижней кривой к верхней: 0, 160, 320 и 560 делокализованных носителей на 40 биполяронов, соответственно, $\Delta x = 11a/81$, $\Delta y = 11a/80$ – (в) и спектры REXS в антинодальном направлении, рассчитанные на различных расстояниях $\Delta x = \Delta y = 5a/81, 10a/81, 15a/81, 20a/81$ между кластерами когерентно расположенных биполяронов, от верхней кривой к нижней, соответственно – (г).

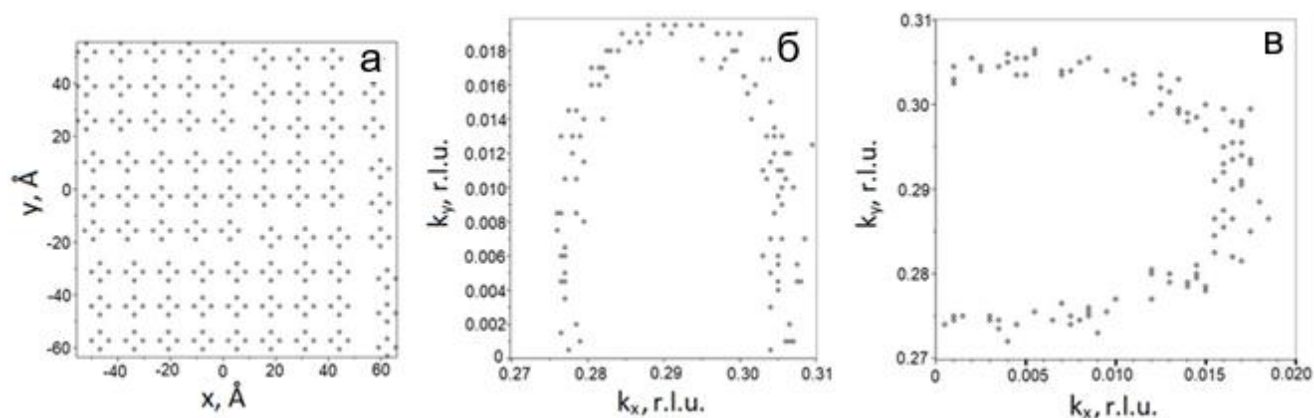


Рисунок 2.9 – Наиболее вероятные положения носителей в кластерах биполяронов, используемых в моделировании – (а); сечение рассчитанного пика REXS вблизи $(K_{CO}, 0)$ на половине высоты пика – (б); сечение рассчитанного пика REXS вблизи $(0, K_{CO})$ на половине высоты пика – (в).

Такое уменьшение K_{CO} при промежуточном допировании наблюдалось экспериментально в системе $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$. Экспериментальные результаты, полученные на этой системе [26], показаны вертикальными линиями, демонстрирующими возможную погрешность измерений (см. рисунки 2.7, а и б). Чуть менее резкое уменьшение значения волнового вектора ЗУ наблюдается и в экспериментальных результатах по купратам на основе иттрия [31], показанных звёздочками.

В обоих случаях расчётов поперечных сечений интенсивности рассеяния: в кластерах биполяронов, используемых в моделировании (рисунок 2.9, б) и пика REXS вблизи $(K_{CO}, 0)$ на половине высоты пика (рисунок 2.9, в), наблюдается характерное удлинение пика в направлении, перпендикулярном волновому вектору. Для волнового вектора, ориентированного преимущественно вдоль оси x , отношение полуширины на полувысоте в перпендикулярном направлении к полуширине вдоль направления вектора составляет $(\Gamma_{\perp}/\Gamma_{\parallel})_x = 1,36$. Аналогично, для волнового вектора, ориентированного преимущественно вдоль оси y , получено значение $(\Gamma_{\perp}/\Gamma_{\parallel})_y = 1,1$.

После поворота изображенной на рисунке 2.9 системы на 90° , наблюдаемая анизотропия формы пика также изменяет своё направление, при этом количественные значения отношения полуширин воспроизводятся с высокой

точностью: $(\Gamma_{\perp}/\Gamma_{\parallel})_x = 1,1$ и $(\Gamma_{\perp}/\Gamma_{\parallel})_y = 1,36$. Такая зеркальная симметрия результатов указывает на зависимость наблюдаемой асимметрии от геометрии биполярных кластеров и соотношения между числом кластеров, ориентированных вдоль продольных и поперечных направлений. Полученная в рамках расчёта угловая асимметрия ширины рассеяния воспроизводит экспериментальные наблюдения, зафиксированные в слабо допированных образцах $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+y}$ при уровнях допирования дырками $p = 0,1$ и $p = 0,12$ [28].

Примечательно, что в отличие от предположений, выдвинутых ранее в литературе [28], о том, что зарядовое упорядочение имеет форму полос, в рамках рассматриваемой модели пространственная структура зарядового упорядочения скорее напоминает шахматный порядок. Именно такая пространственная организация автолокализованных носителей и определяет специфический характер наблюдаемой асимметрии в профиле рассеяния.

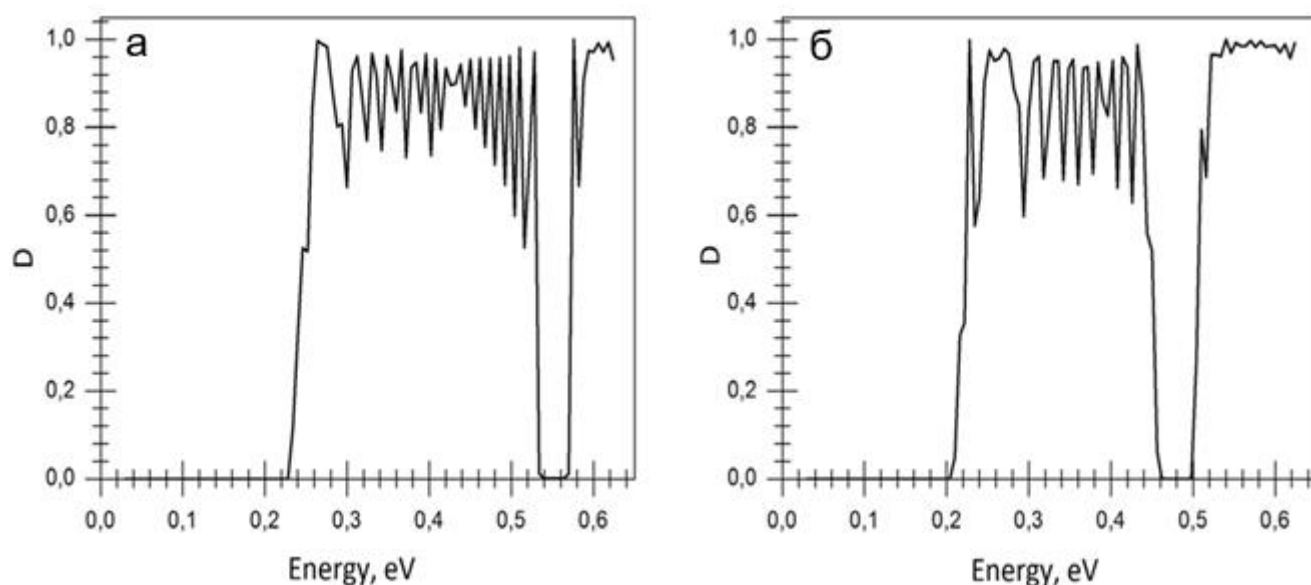


Рисунок 2.10 - Спектр пропускания делокализованных носителей в антинодальном направлении в синусоидальном потенциале, создаваемом автолокализованными носителями при амплитуде потенциала $U_0 = 0.215$ эВ, эффективной массе носителя $m^* = 1.5m_e$, и $2R_{\text{bip}} = 13 \text{ \AA}$ и 14 \AA , соответственно.

Наконец, кратко обсудим влияние автолокализованных носителей на спектр делокализованных носителей. Простейшая модель, описанная выше в подразделе 2.3), учитывающая изменение потенциала ЗУ в одном направлении, подходит для изучения изменения спектра только для носителей с импульсом в антинодальном направлении. Рассчитанный спектр пропускания для таких носителей демонстрирует (см. рисунок 2.10) появление щели, напоминающей щель в фотонных кристаллах [A6-A8].

Положение и ширина щели определяются периодом и амплитудой периода потенциала зарядового упорядочения, а также эффективной массой носителя. Ширина и энергетическое положение щели относительно дна зоны, рассчитанные при типичном периоде зарядового упорядочения, близки (см. рисунок 2.10) к экспериментально наблюдаемым в купратах [80], однако, для получения согласующихся с экспериментами энергетического положения щели относительно энергии Ферми, а также изменения щели с допированием и углом поворота необходима более совершенная модель возникновения псевдощели, предложенная в нашей работе [A2].

Таким образом, совокупность полученных в этом разделе результатов, а именно полученное основное состояние системы, а также рассчитанные зависимости вектора зарядового упорядочения и их сравнение с экспериментальными данными позволяют сформулировать *первое* научное положение, выносимое на защиту:

1. Основное и слабо возбуждённые состояния сильно взаимодействующих электрон-фононных систем с купратоподобной дисперсией при плотности носителей заряда, соответствующей уровню допирования дырками $0,05 < p < 0,25$, представляет собой двухжидкостную систему носителей заряда, включающую бозе-жидкость биполяронов большого радиуса двух знаков заряда и ферми-жидкость делокализованных носителей заряда. В дырочно-допированной системе с уровнем допирования $p \leq 0,1$ при низкой температуре делокализованные дырки отсутствуют, что согласуется со спектрами фотоэмиссионной спектроскопии с

угловым разрешением и с чисто электронной поверхностью Ферми купратов при таких условиях.

Сравнение рассчитанных зависимостей значений вектора зарядового упорядочения \mathbf{K}_{CO} от уровня допирования, а также выявленная связь значения вектора зарядового упорядочения и радиуса биполярона обосновывают *второе* основное научное положение, выносимое на защиту:

2. Биполяронная жидкость проявляется в экспериментах как зарядовое упорядочение с малой длиной когерентности, соответствующей размеру области ближнего порядка в жидкости. Равновесный размер биполярона связан с волновым вектором зарядового упорядочения, рассчитанные значения этого вектора и их зависимость от допирования находятся в согласии с наблюдаемыми в купратах.

Описанное выше разделение импульсного пространства рассматриваемой системы на две характерные области и показанная связь радиуса биполярона с пороговым значением волнового вектора k_0 , а также сравнение значений этого вектора с волновым вектором ВЭА на фотоэмиссионных спектрах позволяют сформулировать *третье* основное научное положение, выносимое на защиту:

3. В рамках двухжидкостной модели системы носителей заряда равновесный размер биполярона определяет величину волнового вектора, ограничивающего область, доступную делокализованным носителям независимо от присутствия в системе автолокализованных носителей, а его рассчитанные значения согласуются с наблюдаемыми в купратах величинами волнового вектора “водопада” в спектре фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением и волнового вектора зарядового упорядочения.

3 Моделирование эволюции системы с ростом температуры

В предыдущем разделе было получено двухкомпонентное основное нормальное состояние, включающее автолокализованные и делокализованные носители в системе с сильным фрёлиховским электрон-фононным взаимодействием и высокой плотностью носителей заряда в рамках обобщённого вариационного подхода. Ее эволюция с температурой рассматривается ниже для описания фазовой диаграммы и других характеристик такой системы путём определения плотности (би)поляронной жидкости в зависимости от уровня допирования и температуры. Для её получения мы минимизируем свободную энергию системы при фиксированной температуре и уровне допирования, варьируя размер биполарона (связанный с периодом зарядового упорядочения), и сравниваем полученную свободную энергию со свободной энергией чистой ферми-жидкости [A3].

3.1 Расчёт свободной энергии системы

Поскольку ниже мы используем дисперсию, которая моделирует дисперсию купратов, оценим константу ЭФВ α в купратах. $\alpha = e^2 \sqrt{2m^* \hbar \omega \hbar^{-2}} / (2\varepsilon^* \hbar \omega)$ [64], где m^* – эффективная масса носителя, $\hbar \omega$ – энергия фононов, сильно взаимодействующих с носителями заряда, а $1/\varepsilon^* = 1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_0$ – обратная эффективная диэлектрическая проницаемость, характеризующая поляризуемость кристаллической решётки [61], ε_0 и ε_∞ – статическая и высокочастотная диэлектрические постоянные. В купратах существует несколько ветвей фононов, сильно взаимодействующих с носителем заряда [81], их энергии составляют от 0,005 эВ [4] до 0,07 эВ [81, 82]. Все они дают вклад в (би)поляронное поляризационное облако [88], так что для оценки α можно использовать среднюю энергию этих фононов $\hbar \omega = 0,035$ эВ. Эффективная масса электронов и дырок вблизи их минимума энергии в купратах составляет $0,9 \div 1,3m_e$ для движения в плоскости проводимости и гораздо больше в перпендикулярном направлении – мы

используем $m_{\parallel}^* = m_e$ и $1,2m_e$ и $m_{\perp}^* = 40m_e$. Измеренное ϵ_{∞} составляет около 3,5 в области слабого и оптимального допирования $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-\delta}$ [83] и 5 в La_2CuO_4 [84], мы рассматриваем различные значения ϵ_{∞} от 3,2 до 5. Измеренное значение ϵ_0 в La_2CuO_4 составляет 23 в направлении оси c и 45 в плоскости ab [84], мы используем $\epsilon_0 = 30$ и 50. Если $1/\epsilon^* = 0,25$, (например, при $\epsilon_{\infty} = 3,53$, $\epsilon_0 = 30$) и $m^* = m_e$, $\alpha = 4,93$; если среднее значение m_{\parallel}^* и m_{\perp}^* используется как m^* , то α будет больше. Интересно, что для области стабильности одно-центрового биполярона большого радиуса в двумерной системе было найдено, что $\alpha_c > 4,5$ или $\alpha_c > 2,8$ в двух несколько различных подходах [85].

3.1.1 Распределение носителей по автолокализованным и делокализованным состояниям

Для расчёта свободной энергии рассматриваемой системы необходима функция распределения, учитывающая сосуществование автолокализованных и делокализованных состояний носителей заряда. Как указывалось выше, для такого случая описание состояния с определённым импульсом не может быть применено, т. к. неопределённость импульса автолокализованного носителя порядка самого импульса. Здесь мы используем описанное ранее в разделе 2 распределение, полученное методом Гиббса, применяя его к системе с дисперсией, подобной дисперсии купратов. Поэтому интегралы в функции распределения записаны для случая двумерного пространства импульсов, поскольку в купратах подвижность носителей в направлении, перпендикулярном проводящей плоскости, пренебрежимо мала. Однако волновая функция носителей в (би)поляроне является существенно трёхмерной, поскольку, согласно экспериментальным данным, деформация решётки в фазе волны зарядовой плотности купратов происходит не только в проводящей плоскости, но и во всем объёме [56].

Условие нормировки для распределения записывается для подсистемы с площадью в координатном пространстве, равной площади S_0 пересечения (би)полярона с плоскостью проводимости, которая показана (см. рисунок 3.1, а)

черной и красной пунктирными линиями для электронного и дырочного (би)поляронов, соответственно, и областью в пространстве импульсов, размер которой k_0 определяется размером (би)полярона через соотношение неопределённости, как описано ниже.

Эксперименты с использованием СТМ и RXS показывают тетрагональную координацию ЗУ в проводящей плоскости купратов [31, 86, 87], вероятно, связанную с симметрией решётки. Поэтому мы используем квадратную площадь на один (би)полярон в координатном пространстве со стороной $2R$, что является одновременно и длиной волны ВЗП, так что $S_0 = 4R^2$. Принцип запрета Паули предотвращает межбиполяронное проникновение автолокализованных электронов/дырок через черные/красные пунктирные линии. При расчёте свободной энергии ниже мы предполагаем, что 90% заряда (би)полярона сосредоточено в области, проекция которой на проводящую плоскость составляет 90° ромбы с диагоналями $2R$, показанные (см. рисунок 3.1) как серые ромбы для электронных (би)поляронов и синие – для дырочных.

В нормирующем условии учитываются все варианты заполнения подсистемы нулём, одним или двумя носителями (с противоположными спинами), которые могут [44] частично находиться в автолокализованном или делокализованном состояниях:

$$e^{\frac{\Omega}{kT}} \left(1 + e^{\frac{\mu}{kT}} \int_0^1 dN [NJ_1 + (1-N)J_2] + e^{\frac{2\mu}{kT}} \int_0^2 dN_1 \int_0^{2-N_1} \left[\sum_{i=1}^2 N_i I_i + (2-N_1-N_2)I_3 \right] dN_2 \right) = 1.$$

Это даёт следующую статистическую сумму и плотность биполяронов n_{bip} , поляронов $n_1 \equiv n_{pol}$ и делокализованных холодных (с импульсами $k < k_0$) носителей n_2 в проводящей плоскости:

$$Z = 1 + \frac{1}{2} e^{\frac{\mu}{kT}} \sum_{i=1}^2 J_i + \frac{4}{3} e^{\frac{2\mu}{kT}} \sum_{i=1}^3 I_i.$$

$$n_{bip} = \frac{4}{3} e^{\frac{2\mu}{kT}} I_3 (ZS_0)^{-1}. \quad (3.1)$$

$$n_i = \left\{ \frac{1}{2} e^{\frac{\mu}{kT}} J_i + \frac{8}{3} e^{\frac{2\mu}{kT}} I_i \right\} (ZS_0)^{-1}.$$

$$J_i = \frac{1}{S_k} \int_{p_i^{min}}^{p_i^{max}} e^{-\frac{E_i(p)}{kT}} p dp, \quad I_1 = e^{-\frac{E_C}{kT}} J_1^2, \quad I_2 = J_2^2, \quad I_3 = J_3^2,$$

где μ - химический потенциал, $E_1 = E_{pol} + \varepsilon(p)M_{pol}^*/m^*$, $E_2 = \varepsilon(p)$, $E_3 = (E_{bip} + \varepsilon(p)M_{bip}^*/m^*)/2$, $p_{1,3}^{min} = 0$, $p_{1,3}^{max} = p_2^{min} = m^*u$, $p_2^{max} = \hbar k_0$; $\varepsilon(p)$ - дисперсия носителя относительно его минимальной энергии, для электронов $\varepsilon(p) = p^2/2m^*$, для дырок определяется уравнениями (3.3) - (3.6) как описано ниже; u - максимальная групповая скорость фононов, сильно взаимодействующих с носителями заряда; E_{pol} , E_{bip} , M_{pol}^* , M_{bip}^* - энергии связи и эффективные массы полярона и биполярона соответственно, E_C - энергия кулоновского взаимодействия между двумя поляронами, занимающими одну и ту же площадь S_0 ; S_0 - площадь подсистемы в координатном пространстве, S_k - площадь подсистемы в пространстве импульсов, она различна для распределения электронов: $S_k = \pi(\hbar k_0)^2$ и дырок: $S_k = \pi\hbar^2[(k'_{min} + k_0)^2 - k'_{min}{}^2]$, k'_{min} определяется уравнением (3.5).

Энергия E_C кулоновского отталкивания двух поляронов в одной и той же области пространства размером $4R^2$ оценивается как среднее значение энергии кулоновского отталкивания носителей в биполяроне - последний член в уравнении (3.8), экранированной высокочастотной диэлектрической проницаемостью. Поляризуемость решётки не может экранировать это отталкивание, поскольку два носителя и их поляризационные потенциальные ямы

находятся в одной и той же области пространства. Пренебрежение корреляцией носителей в поляронах в этой оценке не приводит к завышению E_C , поскольку в биполароне корреляция носителей из-за их кулоновского отталкивания учитывается с помощью пробной волновой функции, предложенной Эмином [92]. В принципе, два полярона в одной и той же области пространства остаются поляронами только в том случае, если один из них проходит через другой достаточно быстро. В противном случае они релаксируют в биполарон за характерное фононное время, поскольку решётка в этой области будет поляризована удвоенным зарядом.

Интегрирование в уравнениях (3.1) производится по среднему импульсу носителя, так как мгновенный импульс не имеет определённого значения в автолокализованных состояниях. Пределы интегрирования в распределении (3.1) учитывают, что скорость большого полярона и биполарона ограничена максимальной групповой скоростью u фононов, участвующих в их образовании, поскольку они представляют собой связанные волновые пакеты полей носителя и поляризации [34, 88]. Заполнение подсистемы двумя носителями, один из которых находится в поляронном, а другой – в делокализованном холодном состоянии, оказывается маловероятным, по-видимому, из-за необходимости противоположной направленности спинов этих носителей. То есть делокализованные холодные носители должны быть локализованы только в тех областях, где присутствуют поляроны с соответствующим направлением спина. В плотности биполаронов n_{bip} множитель 2, вытекающий из $-\partial\Omega/\partial\mu$, компенсируется множителем 1/2, обусловленным тем, что число биполаронов в два раза меньше числа носителей в биполаронном состоянии.

Деление области фазового пространства, соответствующей области импульсного пространства $k < k_0$, между автолокализованными и делокализованными состояниями носителей не ограничивает заполнение делокализованных состояний с импульсами $k > k_0$, которые можно назвать “горячими” состояниями носителей. Их заполнение контролируется распределением Ферми.

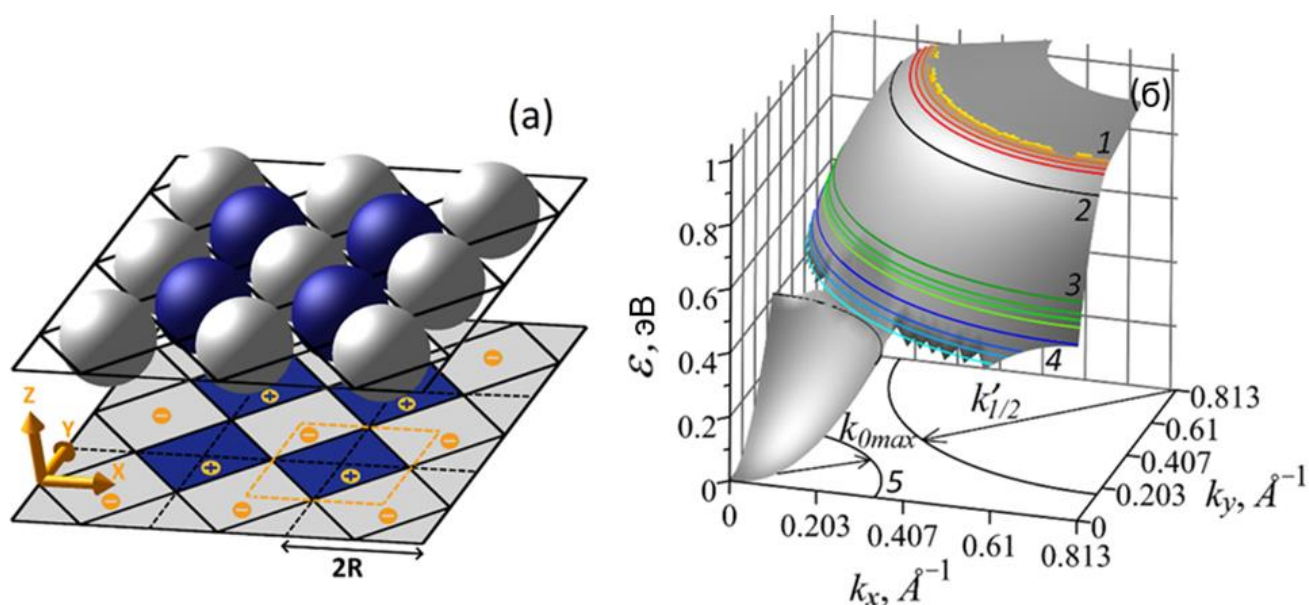


Рисунок 3.1 – Эскиз области (би)поляронной жидкости с локальным порядком, электронные и дырочные (би)поляроны – серые и синие сферы. Область, приходящаяся на один электронный (дырочный) (би)полярон, показана пунктирными черными (жёлтыми) линиями снизу. Пересечения проводящей плоскости с областями, содержащими 90% заряда электронного (дырочного) биполарона (90° ромбов с диагоналями $2R$), выделены серым (синим) цветом в нижней части- (а); дисперсия носителей в НХЗ, использованной в расчётах, параболическая вблизи дна и квазипараболическая (уравнение (3.3)) вблизи минимальной энергии дырки (линия 1) для минимального радиуса биполарона $R_{\min} = 7 \text{ \AA}$. Линия 1 – дуга с радиусом k'_{\min} , дуги (от оранжевого к красному) с несколько большими радиусами – минимумы энергии дырок (уравнение (3.5)) при $R = 7,5, 8, 9, 10, 11, 12 \text{ \AA}$, как описано в разделе 3.1.2. Линия 2 (дуга с радиусом $k'_{1/2}$) показывает ПФ при нулевом допировании в отсутствие (би)поляронов и псевдощели - (б). Линиями 3 показаны границы между холодными и горячими дырочными состояниями для того же набора R от 7 до 12 \AA . Линиями 4 показаны ПФ при $p = 0,25$ для того же набора R . Для каждого набора линий более светлый цвет соответствует меньшему R . Линия 5 показывает максимальный импульс $k_{0\max}$ холодных электронов при $1/\epsilon^* = 0,3$, $\epsilon_0 = 30$, $m_{\parallel}^{*el} = m_e$, $m_{\perp}^* = 40m_e$. Дисперсия, используемая в расчёте свободной энергии, ограничена линией 4 для дырок и линией 5 для электронов.

Если поляронные и/или биполяронные состояния полностью заполнены, то остальные носители могут занимать только “горячие” состояния. Уравнение для химического потенциала носителей требует равенства между суммой плотностей носителей в “холодных” и “горячих” состояниях и общей плотностью носителей. Для дырок оно определяется уровнем допирования, а для электронов соответствует заполнению зоны наполовину, так как дырки рассматриваются поверх заполненной электронами зоны, что соответствует заполнению наполовину в случае нижней хаббардовской зоны.

Для упрощения интегралов в распределении (3.1) мы используем изотропную дисперсию для электронов и дырок вблизи их минимальной энергии. Максимальный импульс k_0 носителя в (би)поляроне оценивается следующим образом: записываем произведение соотношений неопределённостей для координат x и y и тех же проекций импульса носителя в (би)поляроне и заменяем квадратную область $\Delta k_x \Delta k_y$ на область круга πk_0^2 :

$$4R^2 \pi (\hbar k_0)^2 = (2\pi \hbar)^2, \quad k_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{R}. \quad (3.2)$$

Как будет показано ниже, для получения свободной энергии двухжидкостной системы носителей необходимо распределение носителей заряда обоих знаков. Размеры электронных и дырочных поляронов и биполяронов в координатном пространстве одинаковы, поэтому неопределённость модуля импульса дырки в дырочном (би)поляроне также оценивается как k_0 . Однако импульс дырки отсчитывается от дугообразной поверхности Ферми (для используемой ниже дисперсии она состоит из четырёх дуг окружностей с центрами в точках $(\pm\pi, \pm\pi)$ ПЗБ и радиусом k'_{\min} показанных линией 1 (см. рисунок 3.1, б) вдоль радиуса дуги. Таким образом, для дырочного распределения площадь подсистемы в пространстве импульсов равна площади кольца толщиной k_0 .

Разделение области пространства импульсов $k < k_0$ (“холодные” состояния носителей) между автолокализованными и делокализованными носителями не ограничивает заполнение делокализованных состояний с импульсами $k > k_0$, называемых горячими состояниями носителей. Их заполнение контролируется

распределением Ферми. Когда поляронные и/или биполаронные состояния полностью заполнены, оставшиеся носители могут занимать только горячие состояния. Уравнение для химического потенциала носителей требует равенства между суммой плотностей носителей в холодных и горячих состояниях и общей плотностью носителей. Поскольку автолокализованные состояния носителей являются связанными волновыми пакетами носителя и поля поляризации [88], кроме значений k_0 и S_0 на распределение влияет также энергия связи и эффективные массы поляронов и биполаронов, дисперсия носителей и максимальная групповая скорость u фононов.

Распределение (3.1) определяет плотность поляронов $n_{\text{pol}}^{\text{h}}$ (или $n_{\text{pol}}^{\text{el}}$), биполаронов $n_{\text{bip}}^{\text{h}}$ (или $n_{\text{bip}}^{\text{el}}$), делокализованных холодных и горячих носителей в плоскости проводимости для данной температуры, размера (би)полярона и общей плотности носителей n . Для дырок n определяется уровнем допирования, для электронов соответствует половине заполнения нижней полосы Хаббарда, поскольку дырки рассматриваются на вершине заполненной полосы.

3.1.2 Поправка к свободной энергии вследствие появления псевдощели

На примере дисперсии носителей (см. рисунок 3.1, б), используемой в расчётах, целью которых является моделирование дисперсии в купратах, допированных дырками видно, что дисперсия из ARPES спектров в системах с сильным ЭФВ соответствует дисперсии незранированных носителей [10, 14]. Соответственно, дисперсия носителей в купратах может быть извлечена из экспериментальных спектров ARPES. По данным ARPES дисперсия электронов в допированных дырками купратах является параболической вблизи минимума в точке Γ первой зоны Бриллюэна [12, 31], поверхность Ферми состоит из четырёх дуг окружностей с центрами в $(\pm\pi/a, \pm\pi/a)$ [63, 75], а дисперсия дырок вблизи поверхности Ферми также может быть аппроксимирована параболой [7, 42, 48, 49]. Эффективная масса электрона и дырки внутри плоскости проводимости вблизи их минимальной энергии, оценённая с помощью спектров ARPES [7] и [12],

соответственно, удовлетворяют соотношению $m_{\parallel}^{*e} \cong m_{\parallel}^{*h} \cong m_e$; вблизи антинода дисперсия носителей в купратах плоская [63, 90]. По этим причинам в работе используется параболическая дисперсия вблизи минимума энергии электронов. Для дисперсии дырок вблизи минимума энергии дырок используется квазипараболическая форма:

$$\varepsilon(k') = c(k' - k'_{\min})^2, \quad (3.3)$$

где k' – радиус кривых постоянной энергии, представляющих собой дуги окружностей с центрами в $(\pm\pi/a, \pm\pi/a)$, k'_{\min} – радиус дуги, соответствующий минимальной энергии дырки, определённой ниже, c – постоянный параметр.

Дисперсия вблизи минимума энергии электрона может быть выражена как $3,81k^2m_e/m_{\parallel}^{*el}$ в эВ, где k измеряется в \AA^{-1} , а m_{\parallel}^{*el} – эффективная масса внутри плоскости проводимости. Но для дисперсии (3.3) с минимумами на окружности и $c = 3,81$ радиальная компонента внутри-плоскостной эффективной массы дырки вблизи минимума энергии дырки равна m_e , тогда как тангенциальная компонента бесконечна. Это приведёт к тому, что ожидаемое значение кинетической энергии носителя в дырочном (би)поляроне будет примерно в два раза меньше, чем в электронном биполяроне. В декартовых координатах, используемых при расчёте энергии связи (би)полярона, такое уменьшение ожидаемого значения кинетической энергии носителя в (би)поляроне соответствует $m_{xx}^{*h} = m_{yy}^{*h} = m_{\parallel}^{*h} = 2m_e$. Однако эффективная масса носителя в купратах изменяется от $0,9 m_e$ до $1,3 m_e$. Поэтому в дисперсии (3.3) используется $c = 3,81 \cdot 1,6667$ для энергии ε в эВ и k' в \AA^{-1} , что соответствует эффективной массе дырки в плоскости $m_{\parallel}^{*h} = 1,2m_e$.

Электронная дисперсия, которая является параболической вблизи дна зоны (см. рисунок 3.1, б) определяется уравнением (3.3) в области дырочной дисперсии. Дырочная дисперсия с другим положением минимума легко аппроксимируется в рассматриваемой области (рисунки 3.2, а и б) при расчёте свободной энергии с квазипараболической дисперсией (3.3). Отклонение одной дисперсии от другой значительно меньше кинетической энергии носителей в (би)поляроне, которая

совпадает с энергией связи при больших радиусах (би)полярона и существенно превышает (см. рисунок 3.4, а и б) максимальную энергию связи при меньших радиусах.

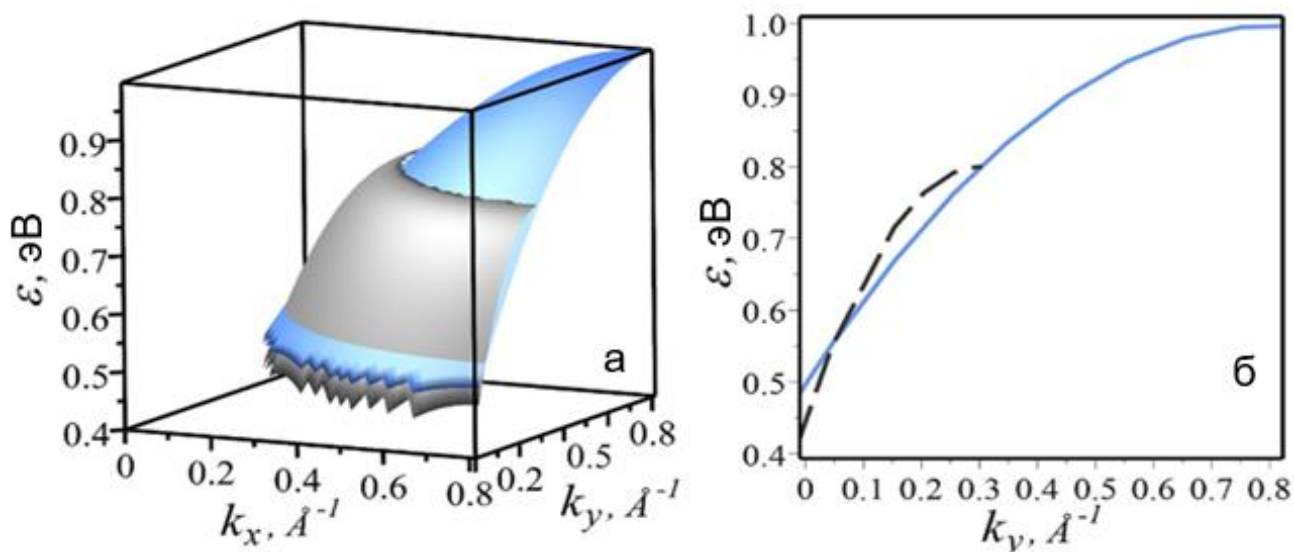


Рисунок 3.2 – Аппроксимация некоторой дисперсии с максимумами в точках $(\pm\pi/a, \pm\pi/a)$ ПЗБ (синяя поверхность) – (а) дисперсией вида (2.2) (серая поверхность) – (б) и сечение дисперсии, показанной в здесь на панели (а) плоскостью $k_x = \pi/a$.

На свободную энергию системы влияет исключение близких к антинодальным квазичастиц в присутствии потенциала (би)поляронов. Оно проявляется в спектрах ARPES и СТС в виде псевдощели [76]. Ниже подробнее рассмотрим причины появления псевдощели и её влияние на свободную энергию системы. Стационарные состояния делокализованных носителей в дополнительном потенциале биполяронов можно описать как распределённые (в пространстве) "волновые пакеты" блоховских волн, в которых импульс носителя изменяется при его распространении в потенциале зарядового упорядочения [89]. Импульс носителя k_j в j -й ячейке квадратной сетки, в которой потенциал зарядового упорядочения аппроксимируется постоянной U_j , определяется из системы уравнений [89]:

$$E(\mathbf{k}_{av}) = \varepsilon(\mathbf{k}_j) + U_j, \quad k_{g,j-1} = k_{g,j}, \quad (3.4)$$

где \mathbf{k}_{av} – импульс носителя в областях с нулевым дополнительным потенциалом (далее средний импульс), так что $E(\mathbf{k}_{av}) = \varepsilon(\mathbf{k}_{av})$; $\varepsilon(\mathbf{k})$ – дисперсия блоховского носителя, а $g = x$ или y в зависимости от ориентации границы между $j-1$ и j ячейками.

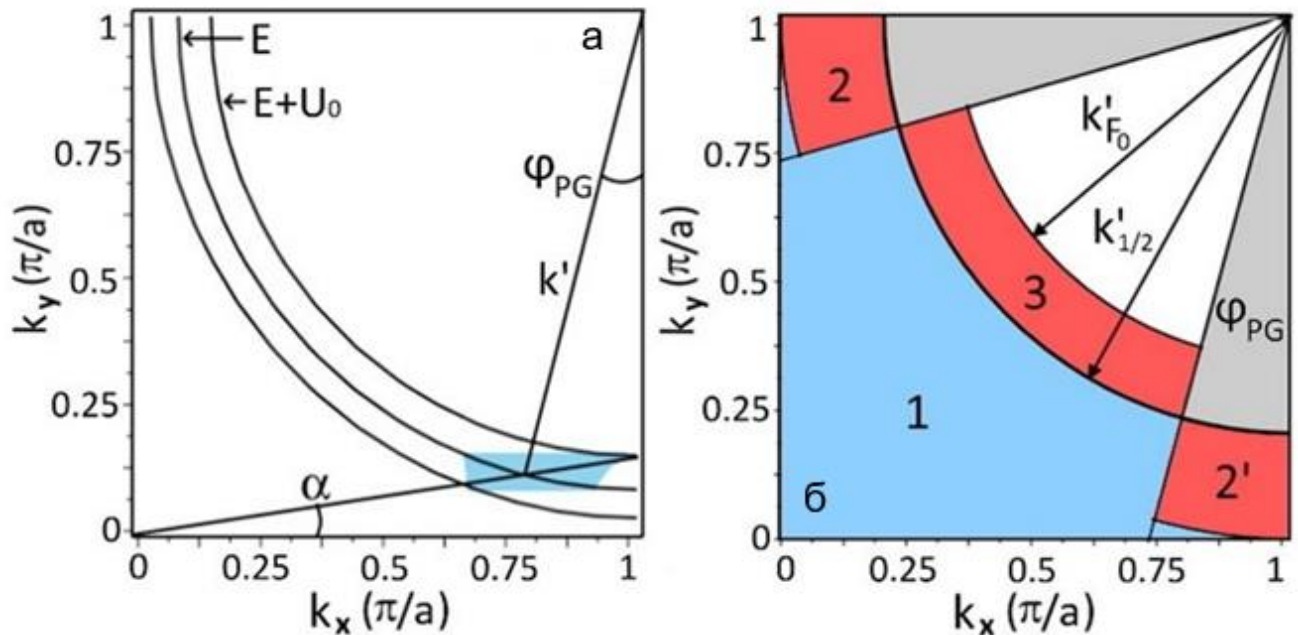


Рисунок 3.3 – Иллюстрация оценки угла ϕ_{PG} , ограничивающего исключённую область ПЗБ в присутствии (би)поляронного потенциала. Синий четырёхугольник – область траектории импульса квазичастицы, дуги – кривые, на которых энергия Блоховских носителей $\varepsilon = E(\mathbf{k}_{av})$ и $\varepsilon = E(\mathbf{k}_{av}) + U_0$, U_0 – амплитуда потенциала ЗУ – (а) и сдвиг ПФ при нулевом допировании за счёт псевдощели: области 2 и 2' становятся недоступными и область 3 оказывается занятой электронами – (б).

Пример области, в которой изменяется импульс носителя в волновом пакете (траектория импульса), показан (см. рисунок 3.3, а) светло-голубым четырёхугольником. При использовании дисперсии (3.3), (3.6) состояния волновых пакетов можно индексировать либо по \mathbf{k}_{av} , так что волновые пакеты можно назвать

квазичастицами, характеризуемыми k_{av} , либо по энергии $E(k_{av})$ и углу α или φ (см. рисунок 3.3, а).

При дырочной дисперсии система уравнений (3.4) не имеет реальных решений вблизи антинодов (при $\varphi < \varphi_{PG}$) в областях с большой отрицательной дополнительной потенциальной энергией [89]. Физической причиной этого является плоская дырочная дисперсия вблизи ПФ в области антинода, то есть большие расстояния между дугами постоянной энергии, соответствующими $\varepsilon(\mathbf{k}) = E$ и $\varepsilon(\mathbf{k}) = E + U_0$, где U_0 – амплитуда потенциала зарядового упорядочения, и специфическая топология дырочной дисперсии. Они не позволяют носителям, распространяющимся в около-антинодальных направлениях, увеличить свою "кинетическую" энергию $\varepsilon(\mathbf{k})$ настолько, чтобы компенсировать большую отрицательную потенциальную энергию U и сохранить их сумму E постоянной. Траектория импульса существующего волнового пакета показана (см. рисунок 3.3, а) синим четырёхугольником. Траектория импульса состояния с несколько меньшим φ и той же энергией E не достигает дуги $\varepsilon(\mathbf{k}) = E + U_0$ [A2], поскольку в областях с большим отрицательным U решения уравнений (3.4) для локального импульса носителя в состояниях со средним импульсом носителей вблизи антинодов оказываются комплексными, что приводит к исчезновению таких состояний, и они перестают быть стационарными.

Из-за разных расстояний между дугами с постоянной энергией, соответствующими $\varepsilon = E$ и $\varepsilon = E + U(0)$ (см. рисунок 3.3) при разных E значение φ_{PG} зависит от энергии квазичастицы E [89]. Включение этой зависимости в интегралы распределения резко увеличивает время вычислений. Поэтому здесь мы используем значение φ_{PG} , рассчитанное для средней энергии \bar{E} квазичастицы с дырочной дисперсией (усредненное по диапазону дырочной дисперсии k' от k'_{min} до π/a). Поскольку величина k'_{min} слабо зависит от минимального радиуса биполярона R_{min} , средняя энергия также слабо изменяется с R_{min} . Фазовые диаграммы, рассчитанные для нескольких значений \bar{E} , соответствующих различным R_{min} , не отличаются заметно.

Для получения приращения свободной энергии, обусловленного этим исключением, сначала вычисляется угол φ_{PG} , ограничивающий исключённую область (см. рисунки 3.3, а и б). Этот угол может быть оценён как угловая координата пересечения дуги $\varepsilon = E$ и линией от начала координат до точки, где дуга $\varepsilon = E + U_0$, где U_0 – амплитуда потенциала зарядового упорядочения, пересекает [76] границу первой зоны Бриллюэна (рисунок 3.3, а). Величина φ_{PG} зависит от дисперсии носителей, определяющей расстояние между дугами, и от U_0 , которая оценивается как амплитуда суперпозиции потенциалов, создаваемых несколькими (в данном расчёте – восемь) проводящими слоями с гармоническим распределением заряда и суммарным зарядом полярона (биполярона) e/ε_0 ($2e/\varepsilon_0$).

Далее рассмотрим расчёт приращения энергии системы за счёт открытия псевдощели. Когда в системе присутствуют биполяроны, вблизи антинодов отсутствуют квазичастицы со средним импульсом в областях, обозначенных как 2 и 2' (см. рисунок 3.3, б). Квазичастица характеризуется средним импульсом k_{av} , поскольку импульс носителей изменяется в областях с различным потенциалом ЗУ [89]. Вместо этого носители занимают область над поверхностью Ферми в отсутствие псевдощели, которая обозначена как область 3. Вычислив сумму площадей 2 и 2' и приравняв её к площади 3, получим положение k'_{min} на поверхности Ферми при нулевом допировании в присутствии псевдощели (сдвиг ПФ вследствие появления псевдощели при нулевом допировании относительно его положения в отсутствие биполяронов):

$$k'_{min} = \left(k'^2_{1/2} - \left[\left(\frac{\pi}{a} \right)^2 - k'^2_{1/2} \right] \frac{8\varphi_{PG}}{2\pi - 8\varphi_{PG}} \right)^{1/2}, \quad (3.5)$$

где $k'_{1/2}$ – радиус дуги, представляющей поверхность Ферми при нулевом допировании в отсутствие потенциала зарядового упорядочения (линия 2 на рисунке 3.1 (б)). В купратах сдвиг поверхности Ферми может быть не столь выраженным из-за формы кривых постоянной энергии, которые лучше описываются как дуги с центром за пределами первой зоны Бриллюэна. Такая "более ромбическая" дисперсия вместе с уменьшением φ_{PG} с ростом энергии

дырки [89], которая в данном расчёте не учитывается, приводит к уменьшению площади исключённых областей (2 и 2' на рисунке 3.3 (б)).

Поскольку φ_{PG} зависит от радиуса (би)полярона, то и k'_{\min} из (3.5) также зависит от него. Чем меньше R , тем больше φ_{PG} и сдвиг поверхности Ферми, а значит, тем меньше k'_{\min} . Как показал дальнейший расчёт, радиус биполярона остаётся постоянным с ростом температуры вплоть до температур выше T_c , затем он увеличивается.

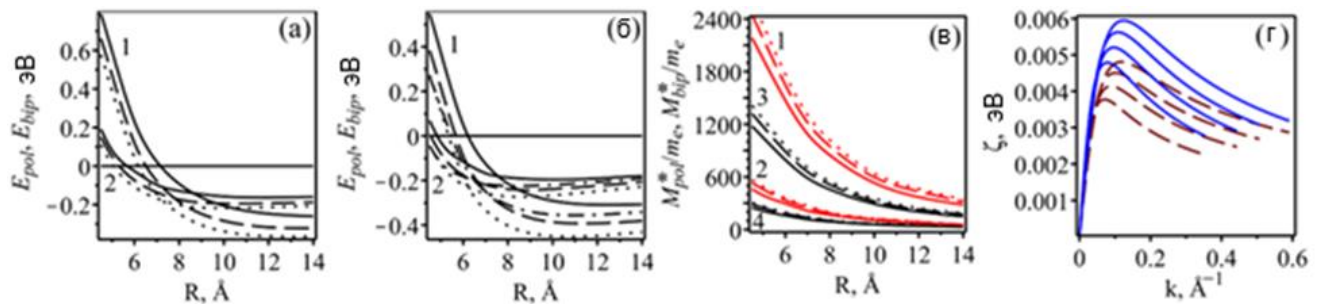


Рисунок 3.4 – Энергия связи биполярона (1) и полярона (2) как функции их радиуса в системах с 1 и 2 слоями проводимости в элементарной ячейке, соответственно, (а) и (б); эффективная масса биполярона (1,3) и полярона (2,4) как функции их радиуса в системах с двумя (1,2) и одним (3,4) слоями проводимости в элементарной ячейке. Линии: сплошная – $1/\varepsilon^* = 0,25$, $m_{\parallel}^* = m_e$; пунктирная – $1/\varepsilon^* = 0,28$, $m_{\parallel}^* = m_e$, точечная – $1/\varepsilon^* = 0,3$, $m_{\parallel}^* = m_e$; пунктирная с точками – $1/\varepsilon^* = 0,25$, $m_{\parallel}^* = 1,2m_e$; $\varepsilon_0 = 30$, $m_{\perp}^* = 40m_e$; расстояние между проводящими плоскостями $d = 4,1 \text{ \AA}$, высота биполярона $h = 6 \text{ \AA}$ и $13,6 \text{ \AA}$ для двух- и однослойной систем, соответственно (в). Спектр элементарных возбуждений биполяронной жидкости для систем с одним (пунктирные линии) и двумя (сплошные линии) слоями проводимости в элементарной ячейке, рассчитанная в соответствии с (3.17) и (3.18) для радиусов биполярона (начиная снизу) $R = 6, 7, 8$ и 10 \AA , расстояние между плоскостями в двухслойных системах $d = 4,1 \text{ \AA}$. Конечная точка для каждой дисперсии оценена в соответствии с уравнением (3.14) – (г).

Чтобы избежать изменения дисперсии носителей при изменении R , в (3.3) используется минимальное значение, которое соответствует минимальному (для данных параметров среды) радиусу биполярона R_{min} . Энергия, соответствующая этому k'_{min} , продемонстрирована *жёлтой линией 1* на рисунке 3.1 (б). Большие значения R соответствуют большим k'_{min} и, следовательно, меньшей энергии Ферми при нулевом допировании, что показано (см. рисунок 3.1, б) линиями чуть ниже линии 1, окрашенными от оранжевого к красному. Ниже эти k'_{min} , соответствующие большим R , будут обозначаться как k'_{F0} , а зелёные линии 3 показывают минимальную энергию «горячих» дырок $\varepsilon(k'_{F0} + k_0)$ для различных R .

Таким образом, энергия дырки по отношению к её минимальной энергии $\varepsilon(k'_{F0})$ описывается уравнением (3.3) со смещённой в ноль энергией:

$$\varepsilon(k') = c(k' - k'_{min})^2 - c(k'_{F0} - k'_{min})^2. \quad (3.6)$$

Используя уравнения (3.5) и (3.6), можно рассчитать приращение плотности энергии системы за счёт открытия псевдощели (см. рисунок 3.3, б):

$$\Delta E^{PG} = \frac{2}{(2\pi)^2} \left[(2\pi - 8\varphi_0) \int_{k'_{F0}}^{k'_{1/2}} \varepsilon(k') k' dk' - 8\varphi_0 \int_{k'_{1/2}}^{\pi/a} \varepsilon(k') k' dk' \right], \quad (3.7)$$

где умножение на 2 обусловлено спинами, а верхний предел π/a во втором интеграле является границей дырочной дисперсии. Чтобы учесть довольно плоскую дисперсию вблизи антинода, характерную для купратов [63, 90], заменим $\varepsilon(k')$ во втором члене уравнения (3.7), представляющем энергии носителей вблизи антинода, на константу $\varepsilon(k'_{1/2})$.

3.1.3 Вариация свободной энергии

Биполяронный гамильтониан Фрёлиха имеет вид:

$$H = \sum_{i=1}^2 \left(-\frac{\hbar^2}{2\widehat{m}^*} \Delta_{\mathbf{r}_i} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{V\varepsilon^*}} [b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} + b_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i}] \right) + \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} + \frac{e^2}{\varepsilon_{\infty}} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (3.8)$$

где $1/\widehat{m}^*$ - обратный тензор эффективной массы с сильно различающимися компонентами внутри плоскости проводимости $1/m_{xx}^* = 1/m_{yy}^* \equiv 1/m_{\parallel}^*$ и вне её $1/m_{\perp}^*$ (m_{\perp}^* считается $40m_e$), $1/\varepsilon^* = 1/\varepsilon_{\infty} - 1/\varepsilon_0$ - обратная эффективная диэлектрическая проницаемость, определяемая поляризуемостью решётки. Здесь мы характеризуем размер биполярона в плоскости с помощью R_{bip} , который является половиной диагонали 90° ромбической области, показанной синим или серым цветом (см. рисунок 3.1, а), заключающей 90 % заряда биполярона (для краткости R_{bip} называется радиусом биполярона):

$$\int_{V_{\text{bip}}} |\psi_{\text{bip}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 d^3r_1 d^3r_2 = 0,9. \quad (3.9)$$

В направлении, перпендикулярном проводящей плоскости (вдоль оси z), размер биполярона нельзя считать стремящимся к нулю, поскольку рентгеновская дифракция показывает ненулевые замороженные смещения всех ионов в элементарной ячейке, а не только тех, которые находятся в проводящей плоскости [56]. Поэтому в качестве размера биполярона вдоль оси z используется высота элементарной ячейки для случая одного проводящего слоя в элементарной ячейке и половина высоты элементарной ячейки для случая с двумя слоями в элементарной ячейке. Высота полярона определяется аналогичным образом.

При фрелиховском электрон-фононном спаривании одно-центровый биполярон с учётом корреляции движения носителей внутри биполярона энергетически более выгоден, чем двух-центровый, который, более того, не стабилен [91]. Поэтому здесь рассматривается одно-центровый биполярон. Он не является связанным состоянием двух поляронов в отличие от биполяронов малого радиуса [21, 66]. В качестве пробной волновой функции носителей в биполяроне

используется нормированное трёхмерное обобщение [35] двумерной четырёх-лепестковой волновой функции, предложенной Д. Эмином [92]:

$$\psi_{bip} = \phi_{x1}\phi_{y2} + \phi_{x2}\phi_{y1};$$

$$\phi_{xi} = e^{-\frac{x_i^2+y_i^2}{2a^2}} e^{-\beta z_i^2} \cosh\left(\frac{lx_i}{a^2}\right); \quad (3.10)$$

$$\phi_{yi} = e^{-\frac{x_i^2+y_i^2}{2a^2}} e^{-\beta z_i^2} \cosh\left(\frac{ly_i}{a^2}\right),$$

где a и l - вариационные параметры.

Для полярона используется простейшая пробная функция $\psi_{pol} = A \exp[-\alpha(x^2 + y^2) - \beta z^2]$. Значение β определялось из условия уменьшения в 20 раз квадратичной волновой функции каждого носителя в биполяроне и носителя в поляроне при $|z| = h/2$, где h - толщина (би)полярона (h здесь используется 13,2 Å и 6 Å или 4,1 Å, для одного и двух проводящих слоёв в элементарной ячейке, соответственно), позволяющая удовлетворить условию (3.1). Энергия полярона как функция его радиуса для заданной толщины полярона получается без минимизации из гамильтониана Фрелиха и условия $\int_{V_{pol}} |\psi_{pol}(\mathbf{r})|^2 d^3r = 0,9$. Условие адиабатичности, заключающееся в том, чтобы кинетическая энергия носителя намного превышала энергию фонона, для сжатого (би)полярона выполняется легче, чем для не сжатого. Это объясняется тем, что энергия движения носителя внутри (би)поляронного движения носителя становится выше при меньшем размере (би)полярона в соответствии с соотношением неопределённостей.

Распределение и спектр элементарных возбуждений жидкости биполяронов большого радиуса содержат поляронную и биполяронную эффективные массы. Биполяронная эффективная масса выражается аналогично эффективной массе полярона большого радиуса [93, 94] с заменой преобразования Фурье $\xi(\mathbf{k})$ квадратов модулей волновой функции носителя в поляроне на сумму

преобразований Фурье $\eta(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ квадратов модулей волновой функции носителя $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ в биполяроне (3.10):

$$M_{pol}^* = \frac{e^2}{3\pi^2 \varepsilon^* \Omega^2} \int \xi(\mathbf{k})^2 d^3k$$

$$M_{bip}^* = \frac{(2e)^2}{3\pi^2 \varepsilon^* \Omega^2} \int [\eta(\mathbf{k}, 0) + \eta(0, \mathbf{k})]^2 d^3k \quad (3.11)$$

$$\eta(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \int |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \exp(i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2$$

где 3 в знаменателе соответствует изотропному трёхмерному случаю (которая для двумерной системы заменяется на 2), Ω – средняя частота фононов, взаимодействующих с носителем заряда. Пространственная дисперсия поляризуемости решётки пренебрегается. Учёт пространственной дисперсии поляризуемости решётки, т. е. способности поляризации распространяться со скоростью, не превышающей максимальную групповую скорость фононов u , может несколько уменьшить эффективную массу (би)полярона [94].

Использование в расчётах E_{pol} , E_{bip} , M_{pol}^* и M_{bip}^* эффективной массы дырки вблизи минимума энергии дырки несколько неточно, в случае когда радиус (би)полярона отличается от минимального радиуса R_{min} для заданных параметров среды, так как это приводит к небольшому сдвигу импульса, соответствующего нулевой энергии, с k'_{min} на k'_{F0} . Однако неточность незначительна, так как этот сдвиг мал, как показано линиями ниже 1 линии (см. рисунок 3.1, б). Смещение минимальной энергии дырки также мало, поскольку происходит вблизи экстремума.

При высокой плотности носителей заряда размер автолокализованных состояний (полярона и биполярона), соответствующий наименьшей свободной энергии системы, и, следовательно, их энергии связи, зависит от плотности носителей, поскольку принцип запрета Паули предотвращает перекрытие (би)поляронов с одинаковым знаком заряда.

Энергию связи (би)полярона в зависимости от его размера можно получить, используя условный вариационный метод [68]. С помощью этого метода производится поиск минимума ожидаемого значения гамильтониана Фрёлиха (би)полярона в состоянии, описываемом пробной волновой функцией носителя(ей) в (би)поляроне и вектором когерентного состояния поляризационного (фононного) поля [34] при условии, что размер (би)полярона имеет фиксированное значение.

В качестве пробной волновой функции носителей в биполяроне используется нормализованное трёхмерное обобщение [68] двумерной четырёхлепестковой волновой функции, предложенной Эмином [92], как описано выше. Плоскостной размер внутри (би)полярона R характеризуется половиной диагонали ромба с углами в 90° (см. рисунок 3.1, а), который является пересечением проводящей плоскости и области, содержащей 90% заряда (би)полярона; для краткости R называют радиусом (би)полярона. Толщина (би)полярона h вдоль оси z определяется высотой элементарной ячейки (половиной высоты или расстоянием между двумя проводящими плоскостями) для случая одного (двух) проводящего слоя (слоёв) в элементарной ячейке, как описано выше.

Примеры полученных значений энергии связи и эффективной массы полярона и биполярона в зависимости от их радиуса представлены на рисунке 3.4. Выше было показано, как расчёт эффективной массы полярона согласно [93, 94] может быть обобщён на случай биполярона. Интересно, что эффективная масса (би)полярона большого радиуса возрастает с увеличением плотности носителей и с уменьшением радиуса аналогично массе полярона малого радиуса, полученной с помощью диаграммного метода Монте-Карло [71]. Следует отметить, что эффективные массы описывают независимое движение отдельных биполяронов, во время которого автолокализованные носители увлекают за собой свою поляризационную оболочку. Но при когерентном сверхтекучем движении биполярного конденсата, наоборот, поле поляризации распространяется как волна, увлекая за собой автолокализованные носители, так что эффективная масса биполяронов в конденсате намного меньше, чем следует из описанного выше расчёта, и может быть близка к удвоенной массе электрона.

Вследствие особенностей диэлектриков Мотта – Хаббарда, дырочные состояния с минимальной энергией оказываются расположены не в точке (π, π) и трёх эквивалентных точках ПЗБ, но на дугах разделяющих каждый квадрант ПЗБ на две равные области, показанные в нижней части рисунка 3.1 (б). Латтинджер и Кон [95] обобщили подход, основанный на эффективной массе, на системы с несколькими минимумами дисперсии носителей в ПЗБ. Применение результата Латтинджера – Кона [95] к случаю бесконечного числа k -точек, соответствующих минимальной энергии носителей, как это имеет место в случае дисперсии в выражениях (3.3) и (3.6), позволяет аналогичным образом рассчитать энергию связи (би)полярона как функцию его радиуса для дырочного и электронного (би)поляронов.

В пренебрежении биполяронным взаимодействием свободная энергия (би)поляронной жидкости аддитивна из-за локальности (би)поляронов. При включении в рассмотрение межбиполяронного взаимодействия свободная энергия системы остаётся аддитивной, так как это взаимодействие учитывается в приближении среднего поля. Потенциал, создаваемый биполяронами и поляронами, оценивается как суперпозиция потенциалов точечных зарядов $\pm 2e/\epsilon_0$ и $\pm e/\epsilon_0$, соответственно, расположенных в средних положениях центров (би)поляронов в трёх близко расположенных проводящих плоскостях. Если в системе присутствуют и поляроны, и биполяроны, то генерируемый ими потенциал оценивается как линейная комбинация двух указанных потенциалов с весами, пропорциональными относительным плотностям биполяронов и поляронов $n_{\text{bip}}/(n_{\text{bip}} + n_{\text{pol}})$, $n_{\text{pol}}/(n_{\text{bip}} + n_{\text{pol}})$.

Поскольку дырки рассматриваются поверх заполненной электронами нижней половины нижней хаббардовской зоны, свободная энергия системы изменяется в зависимости от того, открыта псевдощель или нет в спектре носителей, как описывается уравнением (3.7), и присутствуют ли в системе электронные биполяроны. Поэтому при минимизации свободной энергии системы при фиксированной температуре, помимо энергии дырочных (би)поляронов и делокализованных дырок, должна быть учтена разность энергий электронных

(би)поляронов и делокализованных электронов в той же области пространства импульсов вблизи дна зоны.

Радиус области в пространстве импульсов, которая может быть занята автолокализованными электронами и граница которой показана линией 5 (см. рисунок 3.1, б), равен максимальному значению k_0 (3.2): $k_{0\max} = \sqrt{\pi}/R_{\min}$, где R_{\min} – минимальный радиус (би)полярона при заданных параметрах среды. Энергию электронов с импульсами больше $k_{0\max}$ не нужно учитывать при минимизации, так как она остаётся постоянной при изменении радиуса (би)полярона.

Таким образом, мы используем распределение для электронов и дырок, предполагая, что электронные и дырочные (би)поляроны имеют равные радиусы. Площадь пересечения электронного (би)полярона, то есть области, где сосредоточено 90% заряда электронов в (би)поляроне, с проводящей плоскостью равна $2R^2$, то же самое справедливо и для дырочного (би)полярона, вместе их площади образуют "элементарную ячейку" локального порядка в (би)поляронной жидкости площадью $S_0 = 4R^2$. Это минимальная область, свободная энергия которой необходима для получения плотности свободной энергии для последующей минимизации. Плотность свободной энергии минимизируемой системы при фиксированной температуре,

$$F = (n_{\text{bip}}^{\text{h}} E_{\text{bip}}^{\text{h}} + n_{\text{bip}}^{\text{el}} E_{\text{bip}}^{\text{el}} + n_{\text{pol } i}^{\text{h}} E_{\text{pol } i}^{\text{h}} + n_{\text{pol } i}^{\text{el}} E_{\text{pol } i}^{\text{el}} + E_{\text{colddel}}^{\text{h}} + E_{\text{colddel}}^{\text{el}}) / S_0 + E_{\text{hot}}^{\text{h}} + E_{\text{hot}}^{\text{el}} + \Delta E_{\text{PG}} + E_{\text{int}}, \quad (3.12)$$

включает в себя плотность энергии холодных и горячих дырок, а также плотность энергии холодных и горячих электронов с импульсами до $k_{0\max}$, приращение ΔE_{PG} (3.7) в плотности энергии электронов в присутствии псевдощели и плотность энергии взаимодействия (би)поляронов между собой E_{int} .

Вклады в свободную энергию (3.12) для случаев подсистемы, заполненной одним или двумя поляронами ($n_{\text{pol}1}$ и $n_{\text{pol}2}$), различны из-за энергии E_C кулоновского отталкивания двух поляронов в одной области: $E_{\text{pol}1} = E_{\text{pol}}$ и $E_{\text{pol}2} = E_{\text{pol}} + E_C/2$, соответственно. Оценка E_C описана выше при рассмотрении функции распределения. Кинетической энергией (би)поляронов в (3.12) пренебрегаем из-за

их большой эффективной массы и малых максимальных скоростей. Плотность энергии горячих электронов с импульсами до $k_{0\max}$ и горячих дырок получена с использованием их дисперсии и распределения Ферми. Энергия делокализованных холодных носителей в области $4R^2$ вычисляется как произведение их числа в этой области на среднюю энергию носителей с импульсами от 0 до k_0 для электронов и от k'_{F0} до $k'_{F0} + k_0$ - для дырок.

Плотность свободной энергии (3.12) минимизируется по радиусу (би)полярона R . Минимизация проводится дважды: сначала с минимально возможным значением R_{\min} , оценённым из энергии (би)полярона в зависимости от его радиуса, а затем с R_{\min} , полученным в первой минимизации, если оно существенно отличается. Полученное минимальное значение (3.12) для заданного уровня допирования p и температуры T сравнивается с плотностью свободной энергии системы, состоящей из всех допированных дырок и электронов с импульсами до $k_{0\max}$ с той же дисперсией, но без (би)поляронов при тех же p и T .

Полученные плотность биполяронов n_{bip} и радиус R как функции уровня допирования и температуры используются для расчёта температуры сверхпроводящего перехода T_c , как описано ниже, и волнового вектора зарядового упорядочения K_{CO} . Критическая температура псевдощели T^* оценивается как температура, при которой для данного уровня допирования равны свободные энергии системы с (би)поляронами и без них. Если (би)поляроны образуются во всех областях S_0 координатного пространства одновременно по мере уменьшения T ниже T^* , то T^* и T_{CO} совпадают. Однако такой резкий фазовый переход второго рода в электронной подсистеме может не реализоваться, поскольку возможно сосуществование автолокализованных и делокализованных холодных носителей в разных областях координатного пространства. При более последовательном рассмотрении более простых сильно взаимодействующих электрон-фононных систем, в которых тепловой распад (би)поляронов описывался функцией распределения, изменение плотности (би)поляронов с температурой было постепенным [44, 69]. Полученная ширина области с постепенным уменьшением плотности (би)поляронов быстро увеличивалась с ростом средней температуры

перехода. Экспериментальные данные по T^* и T_{CO} в купратах [31, 51] также указывают на такой тип перехода, что может быть связано с неоднородным допированием. Поэтому T_{CO} оценивается как наименьшая из двух температур: температуру, соответствующую сохранению примерно 30% максимального числа дырочных (би)поляронов при заданных параметрах среды и $0,7T^*$, поскольку для наблюдения ЗУ в экспериментах необходимо некоторое минимальное количество капель (би)поляронной жидкости.

3.2 Температура сверхтекучего перехода в жидкости биполяронов большого радиуса

Для расчёта температуры бозе-конденсации биполяронной жидкости сначала вычисляется импульс P_n нормальной части бозе-жидкости, приходящийся на единицу площади рассматриваемой квазидвумерной системы, при малой скорости v жидкости [96]:

$$P_n = \int \hbar k n(\zeta - \hbar(kv)) \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \approx -\frac{v\hbar^2}{2} \int k^2 \frac{\partial n}{\partial \zeta} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \quad (3.13)$$

Данное приближение основывается на разложении распределения Бозе, что допустимо при малых v . Кроме того, предполагается изотропность среды в проводящей плоскости, что позволяет выразить импульс в форме $P_n = Mv$, где M представляет собой эффективную массу всей нормальной части бозе-жидкости в рассматриваемой системе. Предел интегрирования оценивается в уравнении (3.13), с использованием сохранения числа степеней свободы. Пусть область интегрирования в изотропном пространстве импульсов представляет собой круг с радиусом k_{max} . Число состояний в этой области равно $N = S\pi k_{max}^2 / (2\pi)^2$, где S - площадь кристалла. N должно быть равно числу степеней свободы биполяронов в области S : $N = 2S \cdot 2 / (4R^2)$. Приравнивая их, получаем

$$k_{max} = 2\sqrt{\pi}/R. \quad (3.14)$$

Отношение импульса (3.13) к скорости жидкости \mathbf{v} представляет собой массу нормальной составляющей жидкости (на единицу площади одного проводящего слоя). Разделив её на эффективную массу биполярона M_{bip}^* , получим плотность биполяронов в Бозе-паре в одном проводящем слое при заданной температуре:

$$n_{vap} = \frac{\hbar^2}{4\pi M_{bip}^* k_B T} \int_0^{k_{max}} \frac{e^{\zeta/k_B T}}{(e^{\zeta/k_B T} - 1)^2} k^3 dk. \quad (3.15)$$

Если плотность биполяронов n_{bip} в проводящем слое превышает их плотность в бозе-паре (3.15), то избыточные биполяроны конденсируются. Таким образом, сравнивая плотность биполяронов в бозе-паре (3.15) при данной температуре с их плотностью в системе, полученной путём минимизации свободной энергии системы при той же температуре, можно определить температуру перехода в сверхтекучее состояние. Плотность сверхтекучей жидкости, определяющая жёсткость фазы, которая измеряется экспериментально [97], вычисляется как разность между полной плотностью биполяронов и их плотностью в бозе-паре (3.15).

В расчёте n_{vap} с использованием уравнения (3.15) использовался ранее полученный Д. Эмином спектр элементарных возбуждений жидкости биполяронов большого радиуса, который был получен для биполяронов одного знака заряда [67] стандартным методом теории бозе-жидкости [96]. Метод выражает спектр низкоэнергетических возбуждений Бозе-жидкости через преобразование Фурье межчастичного взаимодействия, при условии, что оно слабое. Это справедливо для биполяронов большого радиуса, взаимодействие которых экранируется статической диэлектрической проницаемостью, которая в купратах высока [84, 98]. Рассмотренное при получении спектра взаимодействие [67] представляет собой дальнедействующее кулоновское взаимодействие биполяронов с одним знаком заряда и близкодействующее отталкивание носителей в разных биполяронах, вследствие принципа запрета Паули. Однако, поскольку в исследуемой системе

присутствуют биполярны обоих знаков заряда, то разница в плотности электронных и дырочных биполяронов существенно увеличивает свободную энергию системы, что подтверждается проведенными нами расчётами так что они практически совпадают. При учёте этого факта оказывается, что отталкивающие и притягивающие кулоновские взаимодействия компенсируют друг друга и остаётся только член, описывающий короткодействующее отталкивание биполяронов с одинаковым знаком заряда [67]:

$$I(s) = e^2 \sum_n \frac{e^{-s/r_{\min}(n)}}{\varepsilon_{\infty} r_{\min}(n)}, \quad (3.16)$$

где s – расстояние между биполяронами внутри плоскости проводимости, а n – число межплоскостных расстояний между ними. Для системы с одним проводящим слоем в элементарной ячейке сумма в (10) содержит только член с $n = 0$ [67], $r_{\min}(0) = 2R$. Спектр элементарных возбуждений жидкости биполяронов большого радиуса в таких системах имеет вид [67]:

$$\zeta_1(k) = \frac{\hbar w_s k R}{[1 + (2kR)^2]^{3/4}}, \quad \hbar w_s = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_{\text{bip}} \hbar^2}{\varepsilon_{\infty} M_{\text{bip}}^* R}}, \quad (3.17)$$

где n_{bip} – плотность биполяронов в плоскости проводимости.

В работе [67] короткодействующее отталкивание носителей рассматривалось только в одном проводящем слое. Для расчёта температуры сверхпроводящего перехода в системе с двумя слоями проводимости в элементарной ячейке мы учитываем короткодействующее отталкивание биполяронов в соседних слоях в той же форме, как и внутри слоя, но с $r_{\min} = \sqrt{d^2 + 2R^2}$, где d – это расстояние между проводящими плоскостями, а $R\sqrt{2}$ – это расстояние внутри плоскости до противоположно заряженного биполярона. В соседнем слое заряды биполяронов находятся в противофазе за счёт кулоновского взаимодействия, как это наблюдается в купратах [99]. Преобразование Фурье взаимодействия между слоями рассчитывается с помощью дифференцирования интеграла [100] по параметру. Полученный спектр имеет вид:

$$\zeta_2(k) = \hbar w_s \sqrt{\frac{(kR)^2}{[1 + (2kR)^2]^{3/2}} + \frac{k^2 d^3 R e^{-s} (1 + s)}{4r_{\min}^2 s^3}}, \quad (3.18)$$

$$s = \sqrt{k^2 d^2 + d^2 / r_{\min}^2}.$$

На рисунке 3.4, г представлены примеры спектров низкоэнергетических возбуждений (3.17), (3.18) биполярной жидкости, напоминающие фазонные возбуждения волн зарядовой плотности из работы [101].

3.3 Моделирование коэффициента Холла

Температурная зависимость коэффициента Холла в купратах демонстрирует спад с ростом температуры при фиксированной плотности носителей заряда [102]. Кроме этого, число Холла, которое в области слабого допирования пропорционально уровню допирования p , в области высокого допирования оказывается пропорциональным не p , а $p + 1$ [47]. Здесь для расчёта коэффициента Холла используются несколько моделей. Далее они рассматриваются последовательно.

3.3.1 Носители заряда из верхней половины нижней хаббардовской зоны

Чтобы учесть скачок в зависимости числа Холла от уровня допирования, в работе предполагается, что в проводимость могут вовлекаться носители заряда из верхней половины нижней хаббардовской зоны, и степень вовлеченности определяется плотностью делокализованных дырок. Для введения в модель этого предположения, из экспериментальных данных выделяется доля носителей заряда из верхней половины нижней хаббардовской зоны как функция концентрации делокализованных носителей заряда. Рассмотрим получение этой функции подробнее.

В рассматриваемой модели автолокализованные носители распадаются при достаточно высоких температурах. А значит в этой области температур в

проводимости участвуют только делокализованные носители. Для выделения доли дырок из верхней половины нижней хаббардовской зоны как функции от уровня допирования использовались экспериментальные значения коэффициента Холла [102], дополненные моделированными значениями при высоких температурах, которые обеспечивают выход кривых температурной зависимости коэффициента Холла на постоянные значения (рисунок 3.5).

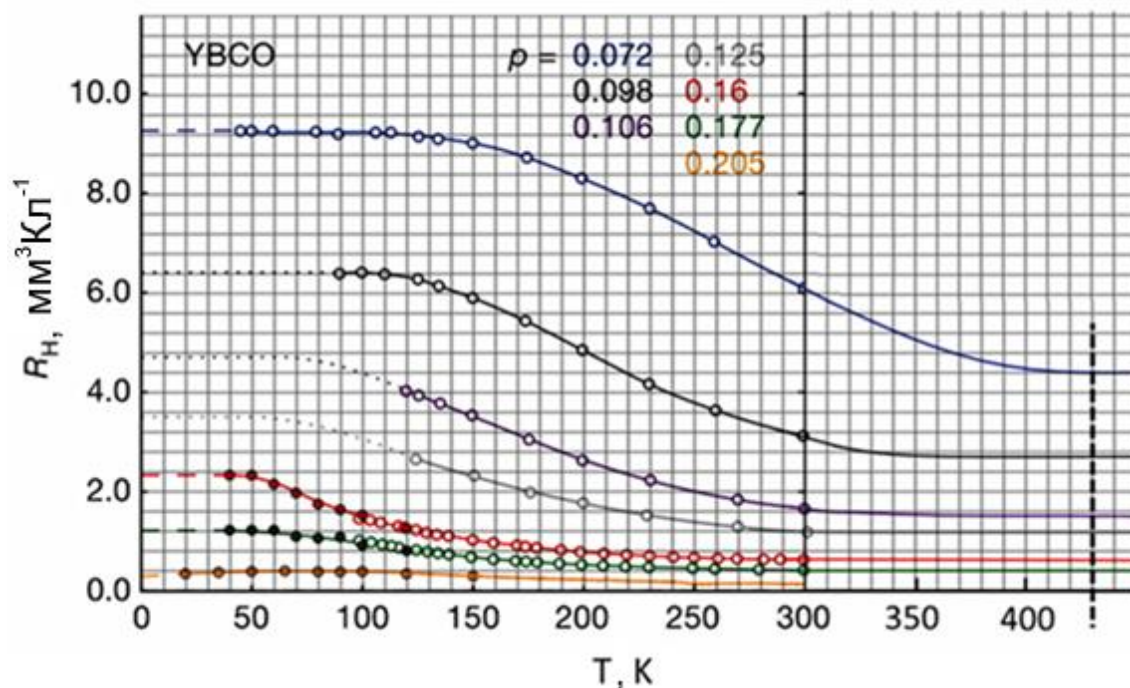


Рисунок 3.5 – Экспериментальные температурные зависимости коэффициента Холла в образце YBCO для разных уровней допирования [102]; правая часть графика – моделирование выхода кривых температурной зависимости на постоянные значения при высоких значениях температуры.

Используя высокотемпературные значения коэффициента Холла, изображённые на рисунке 3.5, можно рассчитать число Холла:

$$n_H = \frac{1}{R_H e}. \quad (3.19)$$

Так как необходимо найти долю дырок только из верхней половины нижней зоны Хаббарда, то из найденного числа Холла следует вычесть концентрацию носителей из нижней половины нижней хаббардовской зоны, то есть

концентрацию, соответствующую текущему уровню допирования. Полученное выражение соответствует концентрации дырок из верхней половины нижней хаббардовской зоны. Обозначив эту концентрацию n_{ex} , можно записать:

$$n_{\text{ex}} = n_{\text{H}} - n_{\text{lower}} = \frac{1}{R_{\text{H}} e} - \frac{N_l p}{V_0}, \quad (3.20)$$

где V_0 – объём элементарной ячейки, N_l – количество слоёв CuO, входящих в элементарную ячейку.

Концентрация носителей заряда из верхней половины нижней хаббардовской зоны запишется в виде:

$$n_{\text{upper}} = \frac{N_l}{V_0}. \quad (3.21)$$

Тогда долю носителей заряда из верхней половины нижней хаббардовской зоны можно записать как отношение:

$$D = \frac{n_{\text{ex}}}{n_{\text{upper}}} = \frac{\frac{1}{R_{\text{H}} e} - \frac{N_l p_{\text{deloc}}}{V_0}}{\frac{N_l}{V_0}}, \quad (3.22)$$

где p_{deloc} – часть допирования, соответствующая делокализованным носителям заряда. От уровня допирования, соответствующего делокализованным носителям, можно перейти к их концентрациям. После этого можно построить эффективную концентрацию носителей заряда с использованием доли дырок из верхней половины НХЗ как функцию от концентрации делокализованных носителей:

$$n_{\text{eff}} = n_{\text{lower}} + D(n_{\text{deloc}})n_{\text{upper}} \quad (3.23)$$

Таким образом первый предлагаемый метод расчёта температурной зависимости коэффициента Холла имеет вид:

$$R_{\text{H}} = \frac{1}{\frac{N_l e}{V_0} (p + D(n_{\text{deloc}}))} \quad (3.24)$$

3.3.2 Коэффициент Холла для систем с носителями заряда, имеющими различные подвижности

Выражение для коэффициента Холла, учитывающее, что в системе есть два типа носителей заряда – свободные дырки и дырочные биполяроны – получено аналогично стандартному выводу учебника [103] для случая собственного полупроводника, в котором двумя типами носителей заряда являются носители заряда разных знаков. Плотность тока в системе, где есть свободные дырки и дырочные биполяроны имеет вид:

$$j = n_{\text{bip}} e v_{\text{bip}} + n_h e v_h, \quad (3.25)$$

где n_{bip} и n_h – концентрация дырок в локализованном и делокализованном состояниях, соответственно. Учитывая, что скорость частиц связана с внешним полем через их подвижность μ , $v = \mu E$, где $\mu = \frac{e\tau}{m}$, можно записать следующее выражение для проводимости:

$$\sigma = e(n_{\text{bip}}\mu_{\text{bip}} + n_h\mu_h). \quad (3.26)$$

При расчёте коэффициент Холла будем считать, что внешнее электрическое поле приложено в направлении оси x , а магнитное поле – в направлении оси z . В таком случае можно записать силы, которые действуют на носители заряда по осям x и y :

$$\begin{aligned} m\dot{v}_x &= eE_x - ev_y B; \\ m\dot{v}_y &= eE_y - ev_x B. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Считая $\mu B \ll 1$, что справедливо в не очень сильных полях вследствие малого времени релаксации для делокализованных дырок из-за сильного ЭФВ и большой эффективной массы биполяронов, вторым слагаемым в первом уравнении можно пренебречь, тогда его можно переписать в виде:

$$\bar{v}_x = \mu_h E_x, \quad (3.28)$$

где $\mu_h = \frac{e\tau}{m}$ – подвижность дырок.

Подставляя полученное выражение для скорости во второе уравнение, можно получить скорость дырок в направлении y :

$$\bar{v}_{y_h} = \mu_h E_y - \mu_h^2 B E_x. \quad (3.29)$$

Проведя те же выкладки, можно получить среднюю скорость в направлении y для биполяронов:

$$\bar{v}_{y_{bip}} = \mu_{bip} E_y - \mu_{bip}^2 B E_x. \quad (3.30)$$

Плотность тока в направлении y имеет вид:

$$j_y = n_h e \bar{v}_{y_h} + n_{bip} e \bar{v}_{y_{bip}}. \quad (3.31)$$

После установления равновесия в направлении оси y ток не протекает. Подставляя найденные скорости в последнюю формулу и приравнивая плотность тока к нулю, получим отношение y и x проекций напряжённости электрического поля:

$$\frac{E_y}{E_x} = \frac{n_h \mu_h^2 + n_{bip} \mu_{bip}^2}{n_h \mu_h + n_{bip} \mu_{bip}} B. \quad (3.32)$$

Коэффициент Холла можно представить в виде:

$$R_H = \frac{E_y}{jB} = \frac{E_y}{\sigma E_x B}. \quad (3.33)$$

Подставив отношение проекций напряжённости и проводимость, получим:

$$R_H = \frac{n_h \mu_h^2 + n_{bip} \mu_{bip}^2}{(n_h \mu_h + n_{bip} \mu_{bip})^2}. \quad (3.34)$$

или

$$R_H = \frac{n_h A^2 + n_{\text{bip}}}{(n_h A + n_{\text{bip}})^2}, \quad (3.35)$$

где $A = \frac{\mu_h}{\mu_{\text{bip}}}$ – отношение подвижностей свободных и автолокализованных дырок.

Выражение выше можно модифицировать для учёта участия в проводимости доли дырок из верхней половины нижней хаббардовской зоны. Для этого вместо концентрации дырок нужно использовать эффективную концентрацию из уравнения (3.23):

$$R_H = \frac{n_{\text{eff}} A^2 + n_{\text{bip}}}{(n_{\text{eff}} A + n_{\text{bip}})^2}. \quad (3.36)$$

3.4 Численное моделирование свойств системы с ростом температуры

Результаты расчётов, описанных в предыдущем подразделе, представлены и обсуждаются в следующем порядке: фазовая диаграмма и стабильность её формы при изменении параметров системы, зависимость температуры сверхпроводящего перехода T_c от числа проводящих слоёв в элементарной ячейке, плотность биполяронов как функция уровня допирования, поведение плотности делокализованных дырок при допировании, значения волнового вектора ЗУ и их зависимость от уровня допирования, плотность сверхтекучей жидкости и температурная зависимость коэффициента Холла.

Расчёт показывает, что для широкого диапазона параметров среды на фазовой диаграмме существует область, в которой двухжидкостное состояние системы носителей, состоящее из (би)поляронной и ферми-жидкости, имеет свободную энергию ниже, чем у чистой ферми-жидкости. В таком случае на фазовой диаграмме в интервале уровней допирования, где существует сверхпроводимость, имеются * (рисунок 3.6) три физически различные области: область только с ферми-жидкостью выше линии T , область с присутствием нормальной (би)поляронной жидкости и ферми-жидкости ниже линии T^* и область с

нормальной и сверхтекучей компонентами биполярной жидкости вместе с ферми-жидкостью (ниже линии T_c).

Область с псевдощелью на фазовой диаграмме совпадает с областью существования (би)поляронной жидкости за одним исключением. Когда поверхность Ферми становится подобной электронной при некотором $p = p^*$, псевдощель больше не наблюдается [89], хотя в областях 2 и 2' (см. рисунок 3.3, б) носители заряда отсутствуют до тех пор, пока в системе присутствуют (би)поляроны. Значение p^* в данной модели зависит от R_{\min} , поскольку он влияет на импульс k'_{\min} , соответствующий минимальной энергии дырки. Расчёты для различных уровней допирования, таких как представленные на рисунке 3.1, б, показывают, что, например, при $R_{\min} = 7 \text{ \AA}$ значения уровня допирования, при котором псевдощель больше не наблюдается, $p^* = 0,19$, что характерно для купратов. Таким образом, в предлагаемой модели зарядовое упорядочение может существовать в отсутствие псевдощели при $p > p^*$ как это наблюдалось в купратах [53]. Рассчитанные значения p^* не показаны на рисунке 3.6, так как они чувствительны к изменению R_{\min} в отличие от фазовой диаграммы.

Рассчитанные положения областей на фазовой диаграмме (см. рисунок 3.6), где встречается псевдощель, зарядовое упорядочение и сверхпроводимость для систем с одним и двумя проводящими слоями в элементарной ячейке согласуются с их расположением на фазовой диаграмме допированных дырками купратов [31, 51], эскиз которого для системы YBCO с двумя проводящими слоями в элементарной ячейке здесь показан (рисунок 3.6, д). Температура сверхпроводящего перехода T_c в системе с двумя проводящими слоями в элементарной ячейке значительно выше (см. рисунок 3.6, г), чем в системах с одним проводящим слоем (см. рисунок 3.6, а - в) при близких значениях других параметров, как это имеет место в купратах. Причиной этого является, во-первых, более высокая энергия элементарных возбуждений биполярной жидкости в двухслойной системе, как видно из уравнений (3.17) и (3.18) и рисунка 3.4, г.

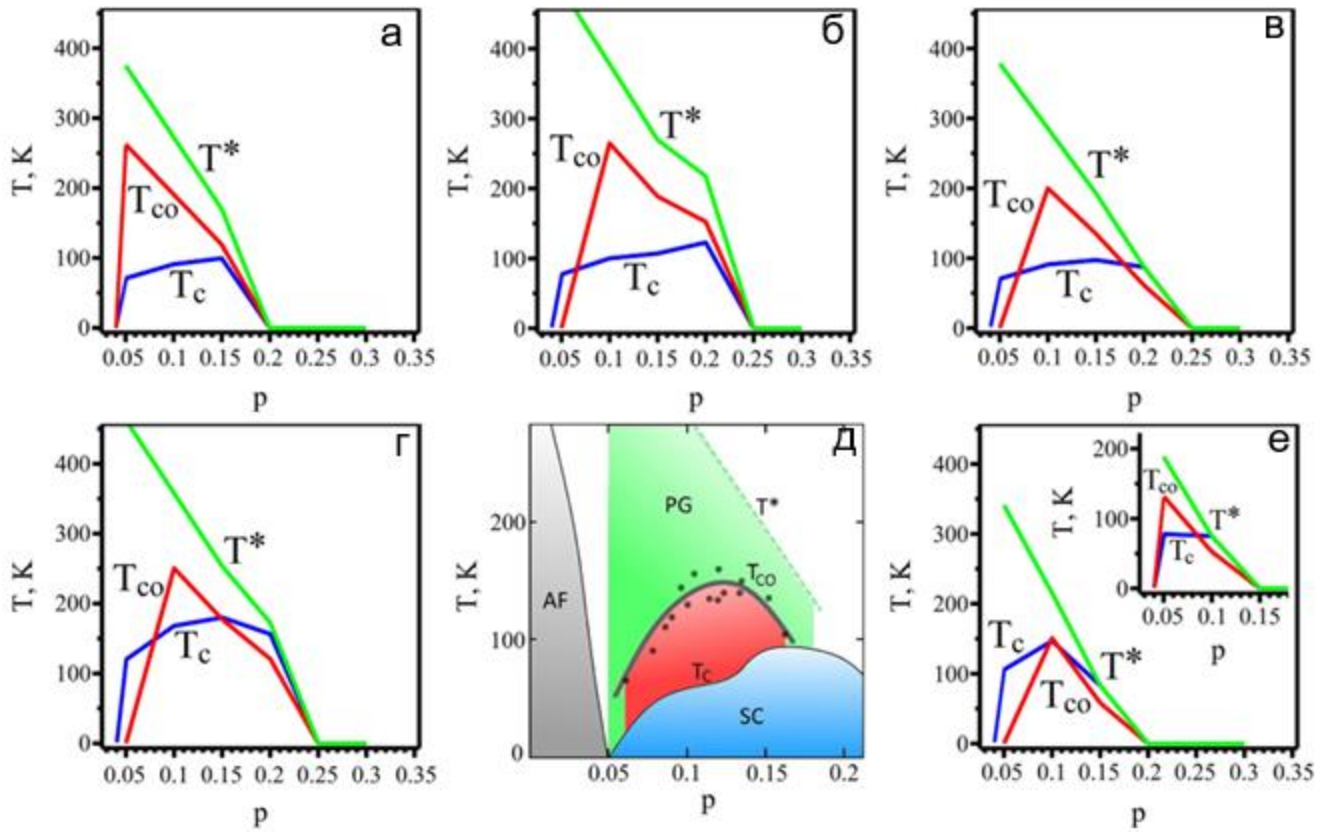


Рисунок 3.6 - Рассчитанные фазовые диаграммы (ниже зелёной линии T^* существует двухжидкостная фаза и наблюдается псевдощель при дырочной дисперсии, примерно ниже красной линии наблюдается ЗУ, ниже синей линии имеет место СП) для систем с одним (а) - (в) и двумя (г) и (е) проводящими слоями в элементарной ячейке. Для панелей (а) - (в): толщина (би)полярона $h = 13,2 \text{ \AA}$, $1/\epsilon^* = 0,25$ и $m_{\parallel}^{*el} = m_e$ - (а); $1/\epsilon^* = 0,28$, $m_{\parallel}^{*el} = m_e$ - (б) $1/\epsilon^* = 0,25$, $m_{\parallel}^{*el} = 1,2m_e$ - (в); $1/\epsilon^* = 0,25$, $m_{\parallel}^{*el} = m_e$ - (г), $h = 6 \text{ \AA}$; $1/\epsilon^* = 0,215$, $m_{\parallel}^{*el} = 1,2m_e$; $h = 6 \text{ \AA}$ - (е), (для вставки в (е) - $1/\epsilon^* = 0,16$, $m_{\parallel}^* = m_e$; $h = 4,1 \text{ \AA}$); $R_{\min} = 7; 6,52; 6,31; 8; 6,3; 8 \text{ \AA}$ для панелей от (а) до (е) и её вставки соответственно. На всех панелях $m_{\parallel}^{*h} = m_e$, $m_{\perp}^* = 40m_e$, расстояние между двумя проводящими плоскостями в элементарной ячейке в (в) и (е) $d = 4,1 \text{ \AA}$, $\epsilon_0 = 30$, за исключением вставки в (е), где $\epsilon_0 = 50$, максимальная групповая скорость фононов $u = 10\,000 \text{ мс}^{-1}$ и эскиз экспериментальной фазовой диаграммы для системы YBCO - (е).

Одной из причин более высоких температур также является, кроме того, более высокая плотность биполяронов в двухслойной системе: при сжатии вдоль оси z энергия связи биполяронов увеличивается, что приводит к уменьшению равновесного размера внутри плоскости. Сравнение а и б, а также рисунков 3.6, г и е показывает, что с увеличением поляризуемости решётки область существования двухжидкостной системы расширяется вдоль оси p и увеличивается T_c .

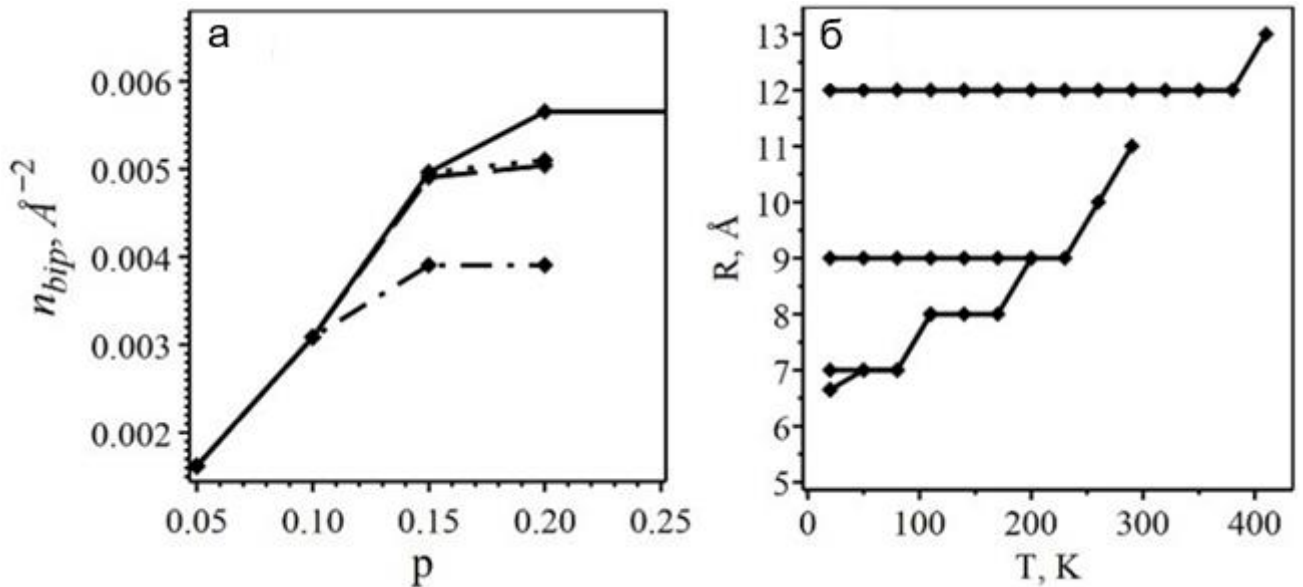


Рисунок 3.7 - Зависимость рассчитанной плотности биполяронов от уровня допирования при $T = 20, 50, 80$ и 110 К (сверху вниз) (а); рассчитанный равновесный радиус биполярона в зависимости от температуры при $p = 0,05; 0,1; 0,15$ и $0,2$ (сверху вниз) в системе с одной проводящей плоскостью в элементарной ячейке и $1/\epsilon^* = 0,25$, $m_{\parallel}^{*el} = m_{\parallel}^{*h} = 1,2m_e$, $m_{\perp}^* = 40m_e$, $R_{\min} = 6,52 \text{ \AA}$, $h = 13,2 \text{ \AA}$, $\epsilon_0 = 30$ (б).

Увеличение эффективной массы электрона внутри плоскости проводимости приводит только к расширению области вдоль оси p (см. рисунок 3.6, в), по сравнению с рисунком на панели а, однако T_c не изменяется. Показано (см. рисунок 3.6, е), как долго сохраняется двухжидкостная система при уменьшении поляризуемости решётки $1/\epsilon^*$ для различных других параметров системы. Существуют также два фактора, незначительное влияние которых вообще не показано на рисунке 3.6. Десятикратное изменение максимальной групповой скорости фононов от $u = 10\,000$ до $u = 1000 \text{ мс}^{-1}$ приводит к уменьшению примерно

на 15% T^* и T_{c0} при фиксированном p , но на T_c это не влияет. Уменьшение толщины (би)полярона h в системе с двумя проводящими плоскостями в элементарной ячейке (при фиксированном расстоянии $d = 4,1 \text{ \AA}$) с $h = 6 \text{ \AA}$ до $4,1 \text{ \AA}$ приводит к уменьшению всех критических температур на 10% при данном p .

Увеличение T_c за счёт увеличения $1/\epsilon^* = 1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_0$ может быть достигнуто путём увеличения ϵ_0 или уменьшения ϵ_∞ . Типичные значения ϵ_0 в купратах составляют от 30 до 50 [84, 98], зарегистрированное значение ϵ_∞ в купратах составляет от 3,5 до 4 [83], рассчитанные фазовые диаграммы (см. рисунок 3.6) охватывают интервал ϵ_∞ от 3,2 до 5,56. Таким образом, добиться существенного увеличения T_c за счёт увеличения поляризуемости решётки не просто, по крайней мере, в купратах. По-видимому, более эффективным способом увеличения T_c является воздействие на спектр элементарных возбуждений биполяронной жидкости изменением числа проводящих слоёв в элементарной ячейке, расстояния между плоскостями или попытками ввести в спектр щель. Как известно, спектр фазонных возбуждений волн зарядовой плотности в ряде случаев может приводить к возникновению щели [59]. Верхним пределом температуры сверхпроводящего перехода T_c для данного p в рассматриваемых системах является температура T^* , так что сверхпроводимость при комнатной температуре в сильно взаимодействующих электрон-фононных системах в принципе возможна.

Удивительная стабильность формы рассчитанной фазовой диаграммы при изменении параметров системы (см. рисунок 3.6) обусловлена неизменностью управляющих ею причин. Оптимальный уровень допирования соответствует достижению максимальной или почти максимальной плотности биполяронов при заданных параметрах системы (см. рисунок 3.7, а). Недавно сообщалось о подобном насыщении энергии 3D-плазмона в допированных электронами купратах при достижении оптимального уровня допирования [104]. Это может быть проявлением биполяронной природы наблюдаемых плазмонных возбуждений, напоминающих амплитудонную ветвь элементарных возбуждений волн зарядовой плотности [101]. Дальнейшее увеличение p выше оптимального уровня

существенно не изменяет T_c до достижения границы области существования биполяронной жидкости (зелёная линия $T^*(p)$ на рисунке 3.6), поскольку добавляемые дырки занимают делокализованные состояния. Появление делокализованных дырок при оптимальном и более высоком уровнях допирования проявляется в появлении дырочной поверхности Ферми при уровне допирования выше оптимального [47].

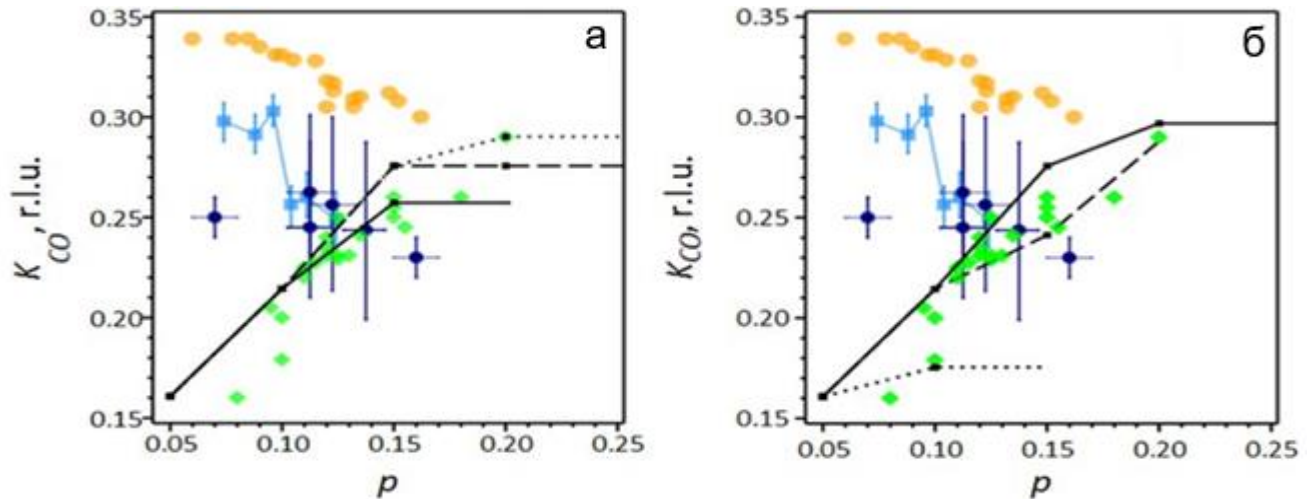


Рисунок 3.8 - Рассчитанный волновой вектор ЗУ K_{CO} при $T = 20$ К в зависимости от уровня допирования в системах с $m_{\parallel}^{*h} = 1,2m_e$, $\epsilon_0 = 30$ с одной проводящей плоскостью в элементарной ячейке, $h = 13,2 \text{ \AA}$, $1/\epsilon^* = 0,25$, $m_{\parallel}^{*el} = m_e$ (сплошная линия), $1/\epsilon^* = 0,28$, $m_{\parallel}^{*el} = m_e$ (пунктирная линия) и $1/\epsilon^* = 0,25$, $m_{\parallel}^{*el} = 1,2m_e$ (пунктирная линия) - (а) и двумя проводящими плоскостями на расстоянии $4,1 \text{ \AA}$ в элементарной ячейке и $h = 6 \text{ \AA}$, $1/\epsilon^* = 0,25$, $m_{\parallel}^{*el} = m_e$ (сплошная линия); $h = 6 \text{ \AA}$, $1/\epsilon^* = 0,225$, $m_{\parallel}^{*el} = 1,2m_e$ (пунктирная линия); $h = 4,1 \text{ \AA}$, $1/\epsilon^* = 0,16$, $m_{\parallel}^{*el} = m_e$, $\epsilon_0 = 50$ (пунктирная линия) - (б). Системы на панелях (а) и (б) те же, что и на рисунке 3.6 в первом и втором рядах, соответственно. Символами показаны некоторые экспериментальные результаты [31, 50, 104, 105] для YBCO (оранжевые кружки), LSCO (зелёные ромбы), Bi2212 (светло-голубые квадраты с полосами ошибок) и Bi2201 (синие кружки с указанием ошибок).

При уровнях допирования выше оптимального, по мере увеличения p , рано или поздно свободная энергия чистой ферми-жидкости становится ниже свободной энергии двухжидкостной системы, формируя таким образом сильно допированную часть фазовой диаграммы. Физическая причина, по которой высокий уровень допирования делает автолокализованные состояния энергетически невыгодными – это исключение состояний носителей в областях около антинодальных (2 и 2' на рисунке 3.3, б) в присутствии (би)поляронов. Энергетическая цена этих исключений довольно высока и становится выше с ростом уровня допирования из-за увеличения плотности “горячих” дырок, например, синяя линия 4 на рисунке 3.1, б показывает ПФ в присутствии биполяронов при $p = 0,25$.

При слабом допировании более высокие значения T^* и T_{CO} обусловлены большим размером (би)поляронов при более низком допировании (см. рисунок 3.7, б), соответствующим более высокой энергии связи (см. рисунок 3.4, а и б). Уменьшение размера биполяронов при увеличении уровня допирования до оптимального приводит к уменьшению T_c и T_{CO} , но увеличивает T_c за счёт большей плотности биполяронов. Такое поведение, вероятно, реализуется в системах на основе лантана, судя по наблюдаемому в них поведению волнового вектора зарядового упорядочения $K_{CO}(p)$ при изменении уровня допирования (см. рисунок 3.8), однако существует и другой вариант поведения $K_{CO}(p)$ при слабом допировании, реализуемый в купратах на основе иттрия и висмута. Такое поведение может реализоваться в неоднородной системе, состоящей из областей двухжидкостной системы носителей с радиусом (би)полярона около $6 \div 8 \text{ \AA}$ и областей чистой ферми-жидкости [68]. В этом случае увеличение T_c с увеличением уровня допирования происходит за счёт расширения областей, занятых двухжидкостной системой носителей, и соответствующего увеличения плотности биполяронов.

Равновесный размер биполярона определяется балансом свободной энергии. Увеличение радиуса биполярона приводит к увеличению энергии связи биполярона (см. рисунки 3.4, а и б) и уменьшению области первой зоны Бриллюэна, исключённую из-за потенциала зарядового упорядочения (см. рисунок 3.3, б), что

снижает свободную энергию, но также приводит к уменьшению плотности биполяронов, что увеличивает свободную энергию.

На рисунке 3.7, б представлен равновесный радиус биполярона $R(T)$ в зависимости от температуры при различных уровнях допирования. Вычисленный путём минимизации свободной энергии R позволяет рассчитать волновой вектор зарядового упорядочения как в [68] $K_{\text{COx}} = K_{\text{COy}} = 2\pi/(2R) = a_0/(2R)$ г. л. у., где a_0 – постоянная решётки в плоскости проводимости, а г. л. у. = $2\pi/a_0$. Как видно из рисунка 3.8, полученные значения K_{CO} находятся в том же диапазоне, что и в купратах. В отличие от формы фазовой диаграммы рассчитанная зависимость $K_{\text{CO}}(p)$ чувствительна к изменению дисперсии носителей и параметров среды. Это также характерно для купратов: купраты с разными $K_{\text{CO}}(p)$ (см. рисунок 3.8) демонстрируют одинаковую форму фазовой диаграммы.

Рассчитанные зависимости $K_{\text{CO}}(p)$ являются возрастающими в области допирования ниже оптимального, аналогично тому, что наблюдается в LSCO (зелёные ромбы на рисунке 3.8), однако другие купраты демонстрируют убывающие или почти постоянные $K_{\text{CO}}(p)$ при допировании ниже оптимального. Чтобы получить в расчёте разнообразие зависимостей $K_{\text{CO}}(p)$ при слабом допировании, вероятно, необходимо усовершенствование способа построения свободной энергии системы или изменение модельного закона дисперсии носителей заряда.

Обсудим, почему поляроны, которые энергетически выгоднее биполяронов при малых радиусах (см. рисунки 3.4, а и б), все же вытесняются биполяронами в рассматриваемом диапазоне допирования. Поскольку электронная плотность в допированных дырками системах высока, одноэлектронный полярон в подсистеме с площадью S_0 сильно увеличивает свободную энергию F из-за перехода второго холодного электрона в подсистеме в незанятое горячее состояние над поверхностью Ферми. Два полярона в одной и той же области S_0 увеличивают свободную энергию F за счёт энергии кулоновского отталкивания E_C . Можно было бы ожидать, что при слабом допировании дырками система, состоящая из электронных биполяронов и дырочных поляронов, будет энергетически более

выгодной, чем биполярны с обоими знаками заряда. Однако в первой системе увеличение свободной энергии F за счёт не скомпенсированного отталкивания электронных биполяронов, заряд которых в два раза больше заряда поляронов, перевешивает его уменьшение за счёт большей энергии связи поляронов.

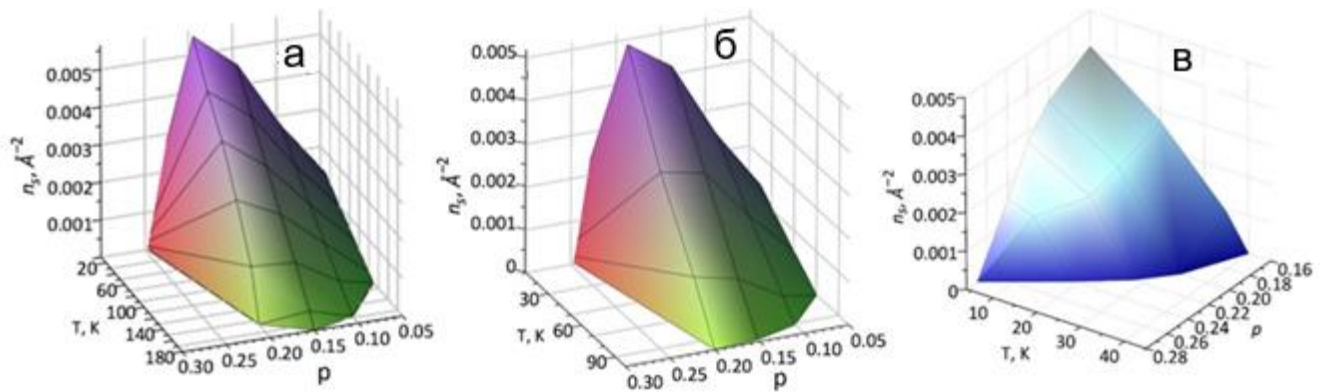


Рисунок 3.9 - Рассчитанная плотность сверхтекучей компоненты биполяронной жидкости $n_s(p, T)$ при $1/\epsilon^* = 0,25$, $\epsilon_0 = 30$, $m_{\parallel}^{*h} = 1,2m_e$, $m_{\perp}^* = 40m_e$ - и двумя проводящими плоскостями в элементарной ячейки, $h = 6 \text{ \AA}$, $m_{\parallel}^{*el} = m_e$ (а); , одной проводящей плоскостью в элементарной ячейке, $h = 13,2 \text{ \AA}$, $m_{\parallel}^{*el} = 1,2m_e$ (б) и плотность сверхтекучей компоненты, рассчитанная по экспериментально измеренной жёсткости фазы в системе LaSrCuO [97] (в).

Интересно, что в дополнение к известной электрон-дырочной асимметрии псевдощели в купратах [48, 49], которая также присутствует в рассчитанных спектрах ARPES двухжидкостной системы носителей [42], в таких системах при слабом допировании наблюдается ещё одна электрон-дырочная асимметрия. Ниже оптимального допирования при низкой температуре все допированные дырки находятся в автолокализованных состояниях, тогда как электронные состояния вблизи поверхности Ферми делокализованы. Эта асимметрия может проявиться в СТМ-экспериментах: зарядовое упорядочение будет наблюдаться только при туннелировании электронов в образец, как это было зафиксировано в купрате [50]. При допировании, превышающем оптимальное, появляются делокализованные дырки и дырочная поверхность Ферми, как это наблюдается в купратах [47]. Таким

образом, при допировании, превышающем оптимальное, дырочные состояния вблизи поверхности Ферми делокализованы, и туннелирование электронов в образец может перестать быть чувствительным к зарядовому упорядочению, как это и происходит в эксперименте [50]. Эксперименты RXS чувствительны к ЗУ не только вблизи поверхности Ферми, поэтому в этих экспериментах можно наблюдать ЗУ при допировании выше оптимального [52, 53].

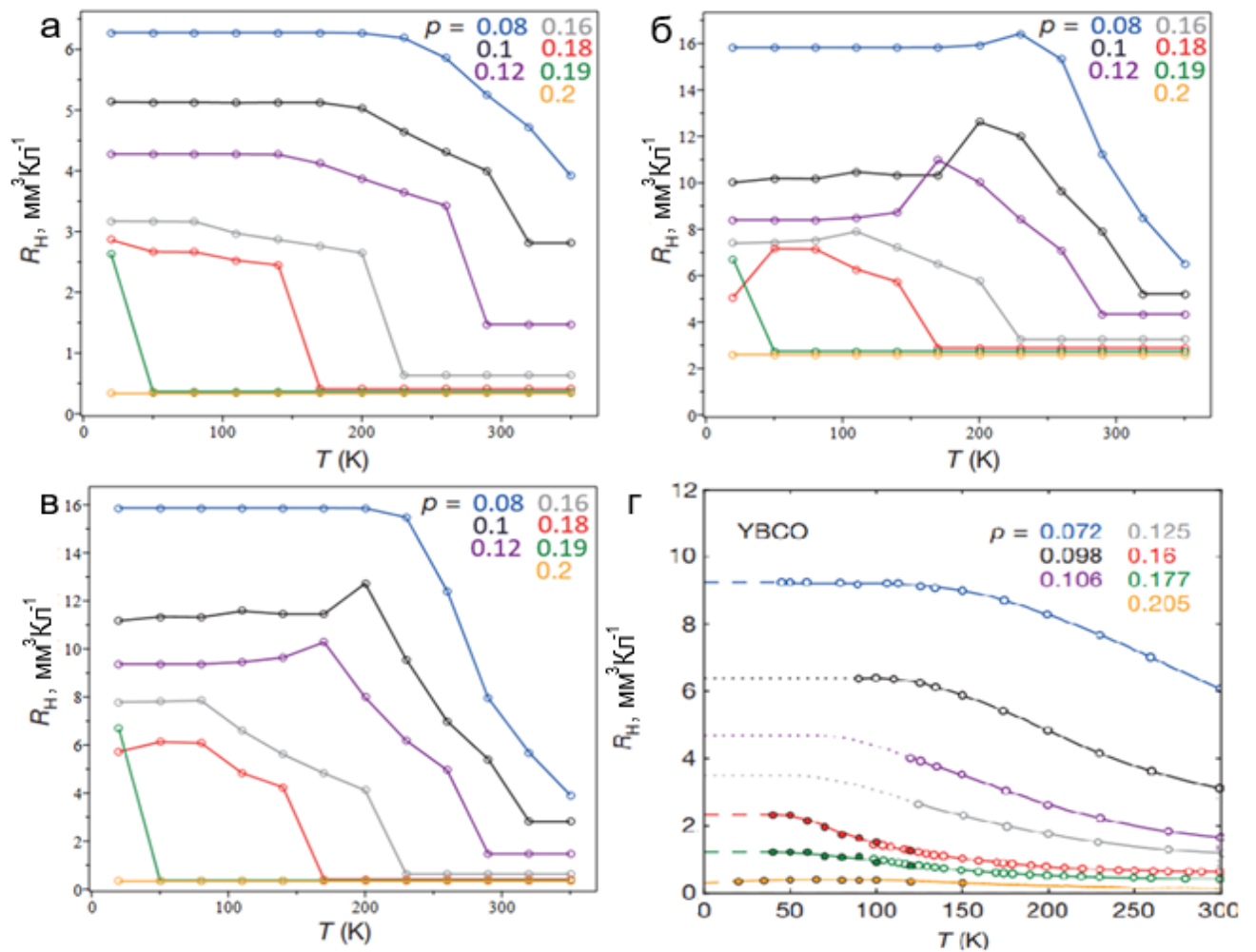


Рисунок 3.10 - Зависимость коэффициента Холла от уровня допирования для разных температур: с учётом вовлечения носителей из верхней половины НХЗ (а);

с учётом различия подвижностей автолокализованных и делокализованных носителей с отношением подвижностей $A = \frac{\mu_h}{\mu_{bip}} = 8$ (б); с учётом вовлечения

носителей из верхней половины НХЗ и различия подвижностей

автолокализованных и делокализованных носителей с тем же отношением

подвижностей $A = \frac{\mu_h}{\mu_{bip}} = 8$ (в); экспериментальные

данные по YBCO из работы [102] (г).

Обсудим сосуществование зарядового упорядочения и сверхпроводимости в рамках предложенного подхода. Уменьшение интенсивности пика ЗУ ниже T_c , наблюдаемое методом REXS, составляет всего 15 % [50], так что ЗУ в купратах сосуществует со сверхпроводимостью. Отсутствие ЗУ в областях, где присутствует сверхтекучая составляющая, наблюдаемое в эксперименте СТМ/СТС [99], может быть вызвано флуктуациями параметра порядка, которые представляют собой флуктуации фазы ВЗП. Очевидно, что они могут препятствовать наблюдению ЗУ, особенно в СТМ экспериментах.

Рассчитанная плотность n_s сверхтекучей компоненты в области сильного допирования уменьшается до нуля с увеличением уровня допирования (рисунки 3.9, а и б), что согласуется с экспериментами на купратах [97, 106] (см. рисунок 3.9, в). Эти эксперименты подчёркивают разницу между купратами и системами БКШ, где увеличение плотности носителей приводит к увеличению жёсткости фазы и T_c . Как было отмечено выше, масса носителей сверхтока не совпадает с эффективной массой отдельных биполяронов. Поскольку ток в рассматриваемой системе связан с распространением волны поляризации, увлекающей за собой автолокализованные носители, эффективная масса сверхпроводящих носителей значительно меньше массы отдельных биполяронов.

Далее рассмотрим результаты расчёта зависимости коэффициента Холла от температуры. На рисунке 3.10 продемонстрированы результаты расчёта для разных уровней допирования. На панели (а) показаны результаты для расчёта, учитывающего вовлечение носителей заряда из верхней половины нижней хаббардовской зоны, степень которого определяется плотностью делокализованных дырок согласно выражению (3.24). Панель (б) на рисунке 3.10 соответствует расчёту с учётом различия в подвижностях автолокализованных и делокализованных носителей при значении отношения подвижностей $A = \frac{\mu_h}{\mu_{bip}} = 8$, но без учета возможности участия в проводимости носителей из верхней части нижней зоны Хаббарда, что соответствует выражению (3.35). И наконец, на панели (в) приведены результаты расчёта температурной зависимости коэффициента Холла, учитывающей как различия в подвижностях автолокализованных и

делокализованных носителей, так и вовлечение дырок из верхней половины нижней хаббардовской зоны в проводимость, согласно выражению (3.36). Отношение подвижностей в данном расчёте принималось таким же, как и для панели (б) $A = \frac{\mu_h}{\mu_{\text{bir}}} = 8$.

Как видно из рисунка 3.10 учёт вовлечения дырок из верхней части нижней хаббардовской зоны позволяет получить более приближённые к экспериментальным температурные зависимости коэффициента Холла для высоких уровней допирования. В расчёте, не учитывающем вовлечение дырок из верхней половины нижней зоны Хаббарда, значения получаются несколько выше, чем экспериментальные.

Полученные в этом разделе зависимость температуры сверхпроводящего перехода от количества слоёв в системе, зависимость коэффициента Холла от температуры и уровня допирования, а также рассчитанные во втором разделе спектры рассеяния рентгеновского излучения и сравнение их с экспериментальными данными позволяют сформулировать *четвёртое* основное научное положение, выносимое на защиту:

4. Полученные в рамках двухжидкостной модели рост температуры сверхпроводящего перехода при увеличении числа проводящих слоёв в элементарной ячейке, температурная и концентрационная зависимость коэффициента Холла, а также положение и форма сечения пика в спектре резонансного рассеяния рентгеновских лучей на биполярной жидкости согласуются с наблюдаемыми в купратах.

Заключение

Основные результаты диссертации сводятся к следующему.

1. Развита двухжидкостная модель системы носителей заряда в сильно связанных электронном и фононном полях при высокой плотности носителей заряда;
2. Развита метод определения основного и возбуждённых состояний системы сильно связанных электронного и фононного полей при высокой плотности носителей заряда при использовании функции распределения носителей заряда по автолокализованным и делокализованным состояниям в системах, где возможно их сосуществование и показано, что основное и слабо возбужденные состояния сильно взаимодействующих электрон-фононных систем с купратоподобной дисперсией при плотности носителей заряда, соответствующей уровню допирования дырками $0,05 < p < 0,25$, представляют собой двухжидкостную систему носителей заряда, включающую Бозе-жидкость биполярнов большого радиуса двух знаков заряда и Ферми-жидкость делокализованных носителей заряда.
3. Получена зависимость энергии связи биполярона от его радиуса при использовании модифицированного вариационного метода, с использованием которого варьирование проводилось при фиксированном радиусе биполярона по остальным параметрам волновой функции носителей заряда в биполяроне.
4. Вариационным методом определён вектор основного состояния системы с периодическим расположением биполярнов в области ближнего порядка в биполяронной жидкости, включая вектор состояния фононного поля в представлении когерентных состояний и получена связь размера биполярона и волнового вектора K_{CO} зарядового упорядочения, а полученная зависимость его от уровня допирования находится в хорошем согласии с наблюдаемой в купратах.
5. В рамках двухжидкостной модели системы носителей заряда показано, что вектор зарядового упорядочения K_{CO} и вектор k_0 , разделяющий импульсное пространство на область, доступную делокализованным носителям независимо от

присутствия в системе автолокализованных носителей и область, возможность заполнения которой делокализованными носителями зависит от присутствия в системе автолокализованных носителей заряда, связаны через размер биполярона и предсказанная связь K_{CO} и k_0 находится в согласии с экспериментальными данными в купратах.

6. Рассчитан спектр резонансного упругого рассеяния рентгеновских лучей (REXS) от двухжидкостной системы носителей заряда, определена зависимость интенсивности максимума в спектре REXS при $k = K_{CO}$ от соотношения плотностей автолокализованных и делокализованных носителей заряда и рассчитана форма сечения максимума в спектре REXS при $k = K_{CO}$ и это демонстрирует асимметрию сечения пика на полумаксимуме, что находится в согласии с формой сечения, наблюдаемой в купратах, а также показано, что зарядовое упорядочение в купратах имеет форму "шахматной доски".

7. Выявлено влияние потенциала автолокализованных носителей заряда на спектр делокализованных носителей и показано, что он приводит к возникновению щели в спектре делокализованных носителей заряда по типу фотонного кристалла;

8. Вариационным методом найдена зависимость равновесного радиуса биполярона от уровня допирования и показано, что равновесный радиус биполярона при высокой плотности носителей заряда меньше радиуса изолированного биполярона;

9. Доказано, что температура бозе-конденсации биполяронной жидкости возрастает с увеличением числа проводящих слоёв в элементарной ячейке от 1 до 3, в согласии с экспериментальными данными о купратах;

10. Развита метод расчёта постоянной Холла в системах сосуществующих автолокализованных и делокализованных носителей заряда и рассчитана температурная зависимость постоянной Холла для различных уровней допирования, что находится в согласии с наблюдаемыми в сверхпроводящих купратах.

Список литературы

1. Bozovic, I. A new frontier for superconductivity / I. Bozovic, C. Ahn // *Nat. Phys.* – 2014. – Vol. 10 – P. 892.
2. Keimer, B. From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides / B. Keimer [et al] // *Nature* – 2015. – Vol. 518 – P. 179.
3. Lanzara, A. Evidence for ubiquitous strong electron–phonon coupling in high-temperature superconductors / A. Lanzara [et al] // *Nature* – 2001. – Vol. 412 – P. 510.
4. Le Tacon, M. Inelastic X-ray scattering in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$ reveals giant phonon anomalies and elastic central peak due to charge-density-wave formation / M. Le Tacon [et al] // *Nat. Phys.* – 2014. – Vol. 10 – P. 52.
5. Reznik, D. Electron-phonon coupling reflecting dynamic charge inhomogeneity in copper-oxide superconductors / D. Reznik [et al] // *Nature* – 2006. – Vol. 440 – P. 1170.
6. Zhu, J. X. Field-induced $d(x^2-y^2)+id_{xy}$ state in d-density-wave metals / J. X. Zhu [et al] // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97 – Art. No 177001.
7. Ronning, F. Anomalous high energy dispersion in photoemission spectra from insulating cuprates / F. Ronning [et al] // *Phys. Rev. B* – 2005. – Vol. 71 – Art. No 094518.
8. Shen, K. M. Missing quasiparticles and the chemical potential puzzle in the doping evolution of the cuprate superconductors / K. M. Shen [et al] // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93 – Art. No 267002.
9. Emin, D. Effect of electronic correlation on the shape of a large bipolaron: Four-lobed planar large bipolaron in an ionic medium / D. Emin // *Phys. Rev. B* – 1995. – Vol. 52 – Art. No 13874.
10. Mishchenko, A. S. Electron-Phonon Coupling and a Polaron in the $t-J$ Model: From the Weak to the Strong Coupling Regime / A. S. Mishchenko, N. Nagaosa // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93 – Art. No 036402.
11. Rösch, O. Polaronic behavior of undoped high- T_c cuprate superconductors from angle-resolved photoemission spectra / O. Rösch [et al] // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – Vol. 95 – Art. No 227002.
12. Xie, B. P. High-energy scale revival and giant kink in the dispersion of a cuprate superconductor / B. P. Xie [et al] // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 98 – Art. No 147001.
13. Valla, T. High-Energy Kink Observed in the Electron Dispersion of High-Temperature Cuprate Superconductors / T. Valla [et al] // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 98 – Art. No 167003.
14. Myasnikova, A. E. Correlation of optical conductivity and angle-resolved photoemission spectra of strong-coupling large polarons and its display in cuprates / A. E. Myasnikova [et al] // *Phys. Rev. B* – 2008. – Vol. 77 – Art. No 165136.
15. Lupi, S. Far-infrared absorption and the metal-to-insulator transition in hole-doped cuprates / S. Lupi [et al] // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. – Vol. 102 – Art. No 206409.
16. Bastiaans, K. M. Charge trapping and super-Poissonian noise centres in a cuprate superconductor / K. M. Bastiaans [et al] // *Nat. Phys.* – 2018. – Vol. 14 – P. 1183.

17. Miyata, Y. High-temperature superconductivity in potassium-coated multilayer FeSe thin films / Y. Miyata [et al] // *Nat. Mater.* – 2015. – Vol. 14 – P. 775.
18. Ge, G. F. Superconductivity above 100 K in single-layer FeSe films on doped SrTiO₃ / G. F. Ge [et al] // *Nat. Mater.* – 2015. – Vol. 14 – P. 285.
19. Wang, Q. Y. Interface-induced high-temperature superconductivity in single unit-cell FeSe films on SrTiO₃ / Q. Y. Wang [et al] // *Chin. Phys. Lett.* – 2012. – Vol. 29 – Art. No 037402.
20. Song, Q. Evidence of cooperative effect on the enhanced superconducting transition temperature at the interface / Q. Song [et al] // *Nat. Commun.* – 2019. – Vol. 10 – Art. No 758.
21. Hague, J. P. Superlight small bipolarons in the presence of a strong Coulomb repulsion / J. P. Hague // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 98 – Art. No 037002.
22. Makarov, I. A. Polaronic approach to strongly correlated electron systems with strong electron-phonon interaction / I. A. Makarov [et al] // *Phys. Rev. B* – 2015. – Vol. 92 – Art. No 155143.
23. Emin, D. Polarons. / D. Emin // Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2013.
24. Hanaguri, T. A ‘checkerboard’ electronic crystal state in lightly hole-doped Ca_{2-x}Na_xCuO₂Cl₂ / T. Hanaguri [et al] // *Nature* – 2004. – Vol. 430 – P. 1001.
25. Ghiringhelli, G. Long-range incommensurate charge fluctuations in (Y,Nd)Ba₂Cu₃O_{6+x} / G. Ghiringhelli [et al] // *Science* – 2012. – Vol. 337 – P. 821.
26. Da Silva Neto, E. H. Ubiquitous interplay between charge ordering and high-temperature superconductivity in cuprates / E. H. Da Silva Neto [et al] // *Science* – 2014. – Vol. 343 – P. 393.
27. Comin, R. Charge order driven by Fermi-arc instability in Bi₂Sr_{2-x}La_xCuO_{6+δ} / R. Comin [et al] // *Science* – 2014. – Vol. 343 – P. 390.
28. Comin, R. Broken translational and rotational symmetry via charge stripe order in underdoped YBa₂Cu₃O_{6+y} / R. Comin [et al] // *Science* – 2015. – Vol. 347 – P. 1335.
29. Da Silva Neto, E. H. Charge ordering in the electron-doped superconductor Nd_{2-x}Ce_xCuO₄ / E. H. Da Silva Neto [et al] // *Science* – 2015. – Vol. 347 – P. 282.
30. Comin, R. The symmetry of charge order in cuprates / R. Comin [et al] // *Nat. Mater.* – 2015. – Vol. 14 – P. 796.
31. Comin, R. Resonant x-ray scattering studies of charge order in cuprates / R. Comin [et al] // *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.* – 2016. – Vol. 7 – P. 369.
32. Blanco-Canosa, S. Resonant x-ray scattering study of charge-density wave correlations in YBa₂Cu₃O_{6+x} / S. Blanco-Canosa [et al] // *Phys. Rev. B* – 2014. – Vol. 90 – Art. No 054513.
33. Shen, Z.-X. Role of the electron-phonon interaction in the strongly correlated cuprate superconductors / Z.-X. Shen [et al] // *Phil. Mag. B* – 2002. – Vol. 82 – P. 1349.
34. Myasnikov, E. N. Coherence of the lattice polarization in large-polaron motion / E. N. Myasnikov [et al] // *Phys. Rev. B* – 2005. – Vol. 72 – Art. No 224303.
35. Shen, K. M. Angle-resolved photoemission studies of lattice polaron formation in the cuprate Ca₂CuO₂Cl₂ / K. M. Shen [et al] // *Phys. Rev. B* – 2007. – Vol. 75 – Art. No 075115.

36. Myasnikov, E. N. Multiphonon generation during photodissociation of slow Landau-Pekar polarons / E. N. Myasnikov [et al] // *Zh. Éksp. Teor. Fiz.* – 2006. – Vol. 129 – P. 548; // *JETP* – 2006. – Vol. 102 – P. 480.
37. Onose, Y. Doping dependence of pseudogap and related charge dynamics in $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ / Y. Onose [et al] // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – Vol. 87 – Art. No 217001.
38. Salje, E. K. H. Polarons and Bipolarons in High-Tc Superconductors and Related Materials / E. K. H. Salje [et al] // *Polarons and Bipolarons in High-Tc Superconductors and Related Materials.* – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2005.
39. Alexandrov, A. S., Devreese, J. T. // *Advances in Polaron Physics* / A. S. Alexandrov, J. T. Devreese // Berlin: Springer, 2009.
40. Alexandrov, A. S. Strong-coupling theory of superconductivity without phonon-mediated pairing / A. S. Alexandrov // *Phys. Scr.* – 2011. – Vol. 83 – Art. No 038301.
41. Devereaux, T. P. Anisotropic electron-phonon interaction in the cuprates / T. P. Devereaux [et al] // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93 – Art. No 117004.
42. Myasnikova, A. E. Relaxation of strongly coupled electron and phonon fields after photoemission and high-energy part of ARPES spectra of cuprates / A. E. Myasnikova [et al] // *J. Phys.: Condens. Matter* – 2018. – Vol. 30 – Art. No 125601.
43. Pekar, S. I. / *Untersuchungen über die Elektronentheorie der Kristalle.* / S. I. Pekar // Berlin: Akademie-Verlag, 1954.
44. Myasnikova, A. E. Distribution of charge carriers at strong electron–phonon interaction and “vertical dispersion” in ARPES spectra of cuprates / A. E. Myasnikova [et al] // *Phys. Lett. A* – 2015. – Vol. 379 – P. 458.
45. Gor’kov, L. P., Teitelbaum, G. B. / Interplay of Externally Doped and Thermally Activated Holes in and Their Impact on the Pseudogap Crossover / L. P. Gor’kov, G. B. Teitelbaum // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97 – Art. No 247003.
46. Saarela, M., Kusmartsev, F. V. / Phase transitions to dipolar clusters and charge density waves in high Tc superconductors / M. Saarela, F. V. Kusmartsev // *Physica C* – 2017. – Vol. 533 – P. 9.
47. Proust, C., Taillefer, L. / Linear and nonlinear transport studies of the pseudogap in cuprates / C. Proust, L. Taillefer // *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.* – 2019. – Vol. 10 – P. 409.
48. Hashimoto, M. Energy gaps in high-Tc T_c cuprates studied by angle-resolved photoemission spectroscopy / M. Hashimoto [et al] // *Nat. Phys.* – 2010. – Vol. 6 – P. 414.
49. He, R. H. Rapid change of superconductivity and electron–boson coupling through critical doping in Bi2212 / R. H. He [et al] // *Science* – 2011. – Vol. 331 – P. 1579.
50. Da Silva Neto, E. H. Charge-ordering tendency and electronic structure in cuprates / E. H. Da Silva Neto [et al] // *Science* – 2013. – Vol. 343 – P. 393.
51. Loret, B. Anisotropic electronic Raman scattering in the underdoped cuprate $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ / B. Loret [et al] // *Nat. Phys.* – 2019. – Vol. 15 – P. 771.
52. Miao, H. Magic-angle twisted bilayer graphene under pressure: enhanced superconductivity and spin–orbit coupling / H. Miao [et al] // *Quantum Mater.* – 2021. – Vol. 6 – Art. No 31.

53. Peng, Y. Y. Monolayer WTe₂: Quantum spin Hall effect at room temperature / Y. Y. Peng [et al] // *Nat. Mater.* – 2018. – Vol. 17 – P. 697.
54. Lee, P. A. Amperean pairing and the pseudogap phase of cuprate superconductors / P. A. Lee // *Phys. Rev. X* – 2014. – Vol. 4 – Art. No 031017.
55. Agterberg, D. F. The physics of pair-density waves: novel states of superconductivity in cuprates / D. F. Agterberg [et al] // *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.* – 2020. – Vol. 11 – P. 231.
56. Forgan, E. M. The microscopic structure of charge density waves in underdoped YBa₂Cu₃O_{6.54} revealed by X-ray diffraction / E. M. Forgan [et al] // *Nat. Commun.* – 2015. – Vol. 6 – Art. No 10064.
57. Fröhlich, H. / On the theory of superconductivity: the one-dimensional case / H. Fröhlich // *Proc. R. Soc. A* – 1954. – Vol. 223 – P. 296.
58. Lee, P. A. Fluctuation effects at a Peierls transition / P. A. Lee [et al] // *Solid State Commun.* – 1993. – Vol. 88 – P. 1001.
59. Gruner, G. / The dynamics of charge-density waves / G. Gruner [et al] // *Rev. Mod. Phys.* – 1988. – Vol. 60 – P. 1129.
60. Landau, L. D. / The movement (motion) of electrons in the crystal lattice / L. D. Landau // *Phys. Z. Sowjetunion* – 1933. – Vol. 3 – P. 504.
61. Pekar, S. I. Untersuchungen über die Elektronentheorie der Kristalle. / S. I. Pekar // Berlin: De Gruyter, 1954.
62. Emin, D. Optical properties of large and small polarons and bipolarons / D. Emin // *Phys. Rev. B* – 1993. – Vol. 48 – P. 13691.
63. Damascelli, A. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors / A. Damascelli [et al] // *Rev. Mod. Phys.* – 2003. – Vol. 75 – P. 473.
64. Appel, J. Polarons / J. Appel // *Solid State Phys.* – 1968. – Vol. 21 – P. 193.
65. Holstein, T. Studies of polaron motion: Part II. The “small” polaron / T. Holstein // *Ann. Phys.* – 1959. – Vol. 8 – P. 343.
66. Alexandrov, A. S. Bipolarons / A. S. Alexandrov, N. F. Mott // *Rep. Prog. Phys.* – 1994. – Vol. 57 – P. 1197.
67. Emin, D. In-plane conductivity of a layered large-bipolaron liquid / D. Emin // *Phil. Mag.* – 2015. – Vol. 95 – P. 918.
68. Myasnikova, A. E. Free energy of a two-liquid system of charge carriers in strongly coupled electron and phonon fields and common nature of three phases in hole-doped cuprates / A. E. Myasnikova [et al] // *J. Phys.: Condens. Matter* – 2019. – Vol. 31 – Art. No 235602.
69. Myasnikov, E. N. Existence criteria for Landau-Pekar polarons / E. N. Myasnikov, A. E. Myasnikova // *JETP* – 1999. – Vol. 89 – P. 746.
70. Muller, K. A. The ratio of small polarons to free carriers in derived from susceptibility measurements / K. A. Muller [et al] // *J. Phys.: Condens. Matter* – 1998. – Vol. 10 – P. 291.
71. Mishchenko, A. S. Diagrammatic Monte Carlo method for many-polaron problems / A. S. Mishchenko [et al] // *Phys. Rev. Lett.* – 2014. – Vol. 113 – Art. No 166402.

72. Kresin, V. Z., Wolf, S. A. / Colloquium: Electron-lattice interaction and its impact on high T_c superconductivity / V. Z. Kresin, S. A. Wolf // *Rev. Mod. Phys.* – 2009. – Vol. 81 – P. 481.
73. Dagotto, E. Correlated electrons in high-temperature superconductors / E. Dagotto // *Rev. Mod. Phys.* – 1994. – Vol. 66 – P. 763.
74. Macridin, A. Pseudogap and Antiferromagnetic Correlations in the Hubbard Model / A. Macridin [et al] // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97 – Art. No 056402.
75. Graf, J. High energy scales in the optical self-energy of the cuprate superconductors / J. Graf [et al] // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 98 – Art. No 067004.
76. Moritz, B. Effect of strong correlations on the high energy anomaly in hole- and electron-doped high- T_c superconductors / B. Moritz [et al] // *New J. Phys.* – 2009. – Vol. 11 – Art. No 093020.
77. Тябликов, С. В. К теории взаимодействия частицы с квантовым полем / С. В. Тябликов // *ЖЭТФ* – 1951. – Т. 21 – С. 377.
78. Suprun, S. G., Moijes, B. Y. / Role of Electron correlations in formation of Pecar bipolaron / S. G. Suprun, B. Y. Moijes // *Sov. Phys. Solid State* – 1982. – Vol. 24 – P. 903.
79. Myasnikova, A. E. Temperature dependence of electrical conductivity in systems with large polarons and bipolarons / A. E. Myasnikova // *Phys. Lett. A* – 2001. – Vol. 291 – P. 439.
80. Vishik, I. M. ARPES studies of cuprate Fermiology: superconductivity, pseudogap and quasiparticle dynamics / I. M. Vishik [et al] // *New J. Phys.* – 2010. – Vol. 12 – Art. No 105008.
81. Anzai, H. A new landscape of multiple dispersion kinks in a high- t_c cuprate superconductor / H. Anzai [et al] // *Sci. Rep.* – 2017. – Vol. 7 – Art. No 4830.
82. Reznik, D. Photoemission kinks and phonons in cuprates / D. Reznik [et al] // *Nature* – 2008. – Vol. 455 – P. E6.
83. Molegraaf, H. J. A. Superconductivity-Induced Transfer of In-Plane Spectral Weight in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ / H. J. A. Molegraaf [et al] // *Science* – 2002. – Vol. 295 – P. 2239.
84. Reagor, D. Large dielectric constants and massive carriers in La_2CuO_4 / D. Reagor [et al] // *Phys. Rev. Lett.* – 1989. – Vol. 62 – P. 2048.
85. Verbist, G. Strong-coupling analysis of large bipolarons in two and three dimensions / G. Verbist [et al] // *Phys. Rev. B* – 1992. – Vol. 45 – P. 5262.
86. Wise, W. D. Charge-density-wave origin of cuprate checkerboard visualized by scanning tunnelling microscopy / W. D. Wise [et al] // *Nat. Phys.* – 2008. – Vol. 4 – P. 696.
87. Comin, R. Symmetry of charge order in cuprates / R. Comin [et al] // *Nat. Mater.* – 2015. – Vol. 14 – P. 796.
88. Myasnikova, A. E. / Band structure in autolocalization and bipolaron models of high-temperature superconductivity / A. E. Myasnikova // *Phys. Rev. B* – 1995. – Vol. 52 – P. 10457.

89. Doronkina, S. V. Topological pseudogap in highly polarizable layered systems with 2D hole-like dispersion / S. V. Doronkina [et al] // *Physica E* – 2022. – Vol. 136 – Art. No 115052.
90. Abrikosov, A. A. Experimentally observed extended saddle point singularity in the energy spectrum of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.9}$ and $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ and some of the consequences / A. A. Abrikosov [et al] // *Physica C* – 1993. – Vol. 214 – P. 73–79.
91. Kashirina, N. I. Polaron effects and electron correlations in two-electron systems: Arbitrary value of electron-phonon interaction / N. I. Kashirina [et al] // *Phys. Rev. B* – 2005. – Vol. 71 – Art. No 134301.
92. Emin, D. Effect of electronic correlation on the shape of a large bipolaron: Four-lobed planar large bipolaron in an ionic medium / D. Emin // *Phys. Rev. B* – 1995. – Vol. 52 – P. 13874.
93. Landau, L. D. Effective mass of a polaron / L. D. Landau, S. I. Pekar // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* – 1948 – Vol. 18 – Art. No 419.
94. Myasnikova, A. E. Inertial mass of the large polaron / A. E. Myasnikova, E. N. Myasnikov // *Phys. Rev. B* – 1997. – Vol. 56 – P. 5316.
95. Luttinger, J. M. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields / J. M. Luttinger, W. Kohn // *Phys. Rev.* – 1955. – Vol. 97 – P. 869.
96. Abrikosov, A. A. *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* / A. A. Abrikosov [et al] // New York: Courier Corp., 1963.
97. Bozovic, I. Dependence of the critical temperature in overdoped copper oxides on superfluid density / I. Bozovic [et al] // *Nature* – 2016. – Vol. 536 – P. 309.
98. Testardi, L. R. Large static dielectric constant in the high-temperature phase of polycrystalline $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ / L. R. Testardi [et al] // *Phys. Rev. B* – 1988. – Vol. 37 – P. 2324.
99. Hsu, C. C. Atomically resolved interlayer charge ordering and its interplay with superconductivity in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.81}$ / C. C. Hsu [et al] // *Nat. Commun.* – 2021. – Vol. 12 – Art. No 3893.
100. Gradsheteyn, I. S. *Table of Integrals, Series and Products.* / I. S. Gradsheteyn, Ryzhik I.M. // Amsterdam: Academic Press, 1965.
101. Torchinsky, D. H. Fluctuating charge-density waves in a cuprate superconductor / D. H. Torchinsky [et al] // *Nat. Mater.* – 2013. – Vol. 12 – P. 387.
102. Badoux, S. Change of carrier density at the pseudogap critical point of a cuprate superconductor / S. Badoux [et al] // *Nature* – 2016. – Vol. 531 – P. 210–214.
103. Смит, Р. *Полупроводники* (пер. с англ.; под ред. Н. А. Пенина) / Р. Смит // Москва: Мир, 1982.
104. Comin, R. Charge Order Driven by Fermi-Arc Instability in $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_{6+\delta}$ / R. Comin [et al] // *Science* – 2013. – Vol. 343 – P. 390.
105. Peng, Y. Y. Phonon transport properties of two-dimensional group-IV materials from ab initio calculations / Y. Y. Peng [et al] // *Phys. Rev. B* – 2016. – Vol. 94 – Art. No 184511.
106. Uemura, Y. J Magnetic-field penetration depth in $\text{Ti}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ in the overdoped regime / Y. J. Uemura // *Nature* – 1993. – Vol. 364 – P. 605.

Приложение А. Список основных публикаций автора

Статьи в научных изданиях, входящих в Scopus, Web of Science, RSCI

A1. Strong long-range electron-phonon interaction as possible driving force for charge ordering in cuprates / A. E. Myasnikova, T. F. Nazdracheva, A. V. Lutsenko [et al.] // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2019. – Vol. 31, No. 23. – Art. No 235602. – DOI 10.1088/1361-648X/ab0d6c.

A2. 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. – DOI 10.1016/j.physe.2021.115052.

A3. Free energy of a two-liquid system of charge carriers in strongly coupled electron and phonon fields and common nature of three phases in hole-doped cuprates / A. E. Myasnikova, S. V. Doronkina, R. R. Arutyunyan, A. H. Dzhantemirov // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2024 – Vol. 36, No. 32. – Art. No 325601 (15 p.). – DOI 10.1088/1361-648x/ad459d.

Публикации в сборниках трудов конференций

A4. Сильное электрон-фононное взаимодействие при высокой плотности носителей заряда как возможный источник зарядового упорядочения в сверхпроводящих купратах / А. Э. Мясникова, Т. Ф. Наздрачева, А. В. Луценко [и др.] // XXXVIII Собрание по физике низких температур, 17-22 сентября 2018 г., Москва - Ростов-на-Дону – Шепси : [тезисы докладов]. – Ростов-на-Дону : Фонд науки и образования, 2018. – С. 185.

A5. Моделирование рассеяния рентгеновского излучения на зарядовом упорядочении и образования псевдощели в системе с высокой плотностью носителей заряда, сильно взаимодействующих с фононным полем / А. Э. Мясникова, А. В. Луценко, А. Х. Джантемиров [и др.] // XXXVIII Собрание по физике низких температур, 17-22 сентября 2018 г., Москва – Ростов-на-Дону – Шепси : [тезисы докладов]. – Ростов-на-Дону : Фонд науки и образования, 2018. – С. 233.

A6. Джантемиров, А. Х. Моделирование зарядового упорядочения в купратных сверхпроводниках и его влияния на спектр делокализованных носителей заряда / А. Х. Джантемиров // *Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов (анализ современного состояния и перспективы развития) (LFPM-2018)* : труды Седьмого Международного междисциплинарного молодёжного симпозиума, г. Ростов-на-Дону – г. Туапсе, 20-24 сентября 2018 года : в двух томах. Т. 1 / Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, Российский фонд фундаментальных исследований, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Южный федеральный

университет" [и др.]. – Ростов-на-Дону ; Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2018. – С. 335-338. – URL: https://lfpm.sfedu.ru/Files/2018/LFPM-2018_Proceedings_V1.pdf (дата обращения 05.05.2025)

A7. Dzhantemirov, A. K. Modeling of charging ordering in cuprate superconductors and its influence on the spectrum of delocalized charge carriers / A. K. Dzhantemirov, A. E. Myasnikova // The 7th International School for Young Researchers "Smart Nanomaterials". Workshop "Design of polyfunctional structures: theory and synthesis", 23-26 October 2018, Rostov-on-Don, Russia : book of abstracts / Ministry of science and higher education of the Russian Federation, Federal state autonomous educational institution of higher education "Southern Federal University". – Rostov-on-Don; Taganrog: Southern Federal University Press, 2018. – С. 27. – URL: https://docs.wixstatic.com/ugd/920363_1b7c8a32938a46c7bad7e8da5fe2c0ed.pdf (дата обращения 05.05.2025)

A8. Джантемиров, А. Х. Моделирование зарядового упорядочения в купратных сверхпроводниках и его влияния на спектр делокализованных носителей заряда / А. Х. Джантемиров, А. Э. Мясникова // LIII Школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния. ФКС-2019, 11–16 марта 2019 г., Санкт-Петербург : сборник тезисов и список участников / Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» ; [сборник подготовили А. И. Васильев и др.]. – Гатчина, 2019 – С. 194. – URL: https://ancient.hydro.nsc.ru/srexpl/biblio/2019/Sbornik_FKS_2019.pdf (дата обращения 05.05.2025)

A9. Джантемиров, А. Х. Зависимость температуры Бозе-конденсации биполярной жидкости от уровня допирования в системах с сильным Фрёлиховским электрон-фононным взаимодействием / Джантемиров А. Х., Мясникова А. Э. // Материалы Международного молодёжного научного форума "Ломоносов-2022" : [XXIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных по фундаментальным наукам] : Секция "Физика". Подсекция "Сверхпроводящие и электронные свойства твёрдых тел" / ответственные редакторы И. А. Алешковский, А. В. Андриянов, Е. А. Антипов, Е. И. Зимакова. – Москва: МАКС Пресс, 2022. – URL: https://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2022/data/section_35_25749.htm (дата обращения 05.05.2025). – Текст : электронный.

A10. Джантемиров, А. Х. Моделирование температурной зависимости коэффициента Холла в системах с сильным электрон-фононным взаимодействием и высокой плотностью носителей заряда / А. Х. Джантемиров, А. Э. Мясникова // Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование

эко-систем (анализ современного состояния и перспективы развития) : труды Двенадцатого Международного междисциплинарного молодёжного симпозиума, Ростов-на-Дону, 26-28 декабря 2023 года : в двух томах. Т. 1 / Министерство науки и высшего образования Российской Федерации Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Южный федеральный университет" [и др.]. – Ростов-на-Дону: Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2023. – С. 196-198. – URL: https://lfpm.sfedu.ru/Files/2023/LFPM-2023_Proceedings_V1.pdf (дата обращения 05.05.2025).

A11. Джантемиров, А. Х. Моделирование температурной зависимости коэффициента холла в системах с сильным электрон-фононным взаимодействием и высокой плотностью носителей заряда / А. Х. Джантемиров, А. Э. Мясникова // Ломоносов-2024 : XXXI Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных по фундаментальным наукам : Международный молодёжный научный форум : сборник тезисов докладов. Секция "Физика". Подсекция "Сверхпроводящие и электронные свойства твёрдых тел". – Москва: Физический факультет МГУ, 2024. – С. 533-534.

A12. Джантемиров, А. Х. Моделирование температурной зависимости коэффициента Холла в системах с сильным электрон-фононным взаимодействием и высокой плотностью носителей заряда / А. Х. Джантемиров // Перспективы развития фундаментальных наук : сборник научных трудов XXI Международной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных, 23-26 апреля 2024 г. : [в 7 томах]. Т. 1 : Физика / редакционная коллегия: И. А. Курзина, Г. А. Воронова, С. А. Поробова. – Томск: ФГАОУ ВО НИ ТПУ, 2024. – С. 139-141. – URL: <https://earchive.tpu.ru/handle/11683/80530> (дата обращения 05.05.2025).

A13. Джантемиров, А. Х. Моделирование температурной зависимости коэффициента Холла в системах с сильным электрон-фононным взаимодействием и высокой плотностью носителей заряда / А. Х. Джантемиров // Физика. Технологии. Инновации. ФТИ-2024 : XI Международная молодёжная научная конференция, посвящённая 75-летию основания Физико-технологического института, Екатеринбург, 20-25 мая 2024 г. : тезисы докладов / Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Физико-технологический институт. – Екатеринбург: УрФУ, 2024 – С. 99-100. – Режим доступа: https://fizteh.urfu.ru/fileadmin/user_upload/site_19855/Conference/2024/Tesis_FTI_2024.pdf (дата обращения 05.05.2025).

Приложение Б. Список сокращений и обозначений

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

ВТСП – высокотемпературная сверхпроводимость

ЭФВ – электрон-фононное взаимодействие

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

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

ЗУ – зарядовое упорядочение

СП – сверхпроводимость

ПЗБ – первая зона Бриллюэна