

**ЯДРО ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ ХУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ
ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc.02/30.12.2019.FM/Т.33.01 РАҚАМЛИ
ИЛМИЙ КЕНГАШ**

ЯДРО ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ

КУРБАНОВ УЛУГБЕК ТАЖИБАЕВИЧ

**ЛЕГИРЛАНГАН ЮҚОРИ ҲАРОРАТЛИ ЎТА ЎТКАЗУВЧАН
КУПРАТЛАРДА МОТТ ВА ЯНГИ МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК
ЎТИШЛАР**

01.04.07-Конденсирланган ҳолат физикаси

**Физика-математика фанлари доктори (DSc) диссертацияси
АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент – 2020

**Физика-математика фанлари доктори (DSc) диссертацияси
автореферати мундарижаси**

**Оглавление автореферата
диссертации доктора физико-математических наук (DSc)**

**Content of the dissertation abstract
of the doctor of science (DSc) on physical and mathematical sciences**

Курбанов Улугбек Тажибаевич

Легирланган юқори ҳароратли ўта ўтказувчан купратларда
Мотт ва янги металл-диэлектрик ўтишлар 3

Курбанов Улугбек Тажибаевич

Моттовские и новые металл-диэлектрик переходы в легированных
высокотемпературных сверхпроводящих купратах 33

Kurbanov Ulugbek

Mott and new metal-insulator transitions in doped cuprate high-
temperature superconductors 65

Эълон қилинган ишлар рўйхати

Список опубликованных работ
List of published works 74

**ЯДРО ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ ХУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ
ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc.02/30.12.2019.FM/Т.33.01 РАҚАМЛИ
ИЛМИЙ КЕНГАШ**

ЯДРО ФИЗИКАСИ ИНСТИТУТИ

КУРБАНОВ УЛУГБЕК ТАЖИБАЕВИЧ

**ЛЕГИРЛАНГАН ЮҚОРИ ҲАРОРАТЛИ ЎТА ЎТКАЗУВЧАН
КУПРАТЛАРДА МОТТ ВА ЯНГИ МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК
ЎТИШЛАР**

01.04.07-Конденсирланган ҳолат физикаси

**Физика-математика фанлари доктори (DSc) диссертацияси
АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент – 2020

Фан доктори (DSc) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазир Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида B2017.2.DSc/FM60 рақам би рўйхатга олинган.

Докторлик диссертацияси Ядро физикаси институтида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгашнинг веб-саҳифасида (www.inp.uz) ва «Ziyonet» Ахборот таълим порталида (www.ziyonet.uz) жойлаштирилган.

Илмий маслаҳатчи:

Джуманов Сафарали
физика-математика фанлари доктори, профессор

Расмий оппентлар:

Тўраев Назар Юлдашевич
физика-математика фанлари доктори, профессор,
Ўзбекистон Республикаси Фанлар академияси академиги

Имамов Эркин Зуннунович
физика-математика фанлари доктори, профессор

Нуритдинов Иззатилло
физика-математика фанлари доктори, профессор,

Етакчи ташкилот:

Ислом Каримов номидаги Тошкент Давлат техника университети

Диссертация химояси Ядро физикаси институти ҳузуридаги DSc.02/30.12.2019.FM/Т.33.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2020 йил “___” _____ соат ___ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 100214, Тошкент ш., Улуғбек кўрғони, ЯФИ; тел. (+99871) 289-31-41; факс (+99871) 289-36-65; e-mail: info@inp.uz).

Докторлик диссертацияси билан Ядро физикаси институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (_____ рақами билан рўйхатга олинган. (Манзил: 100214, Тошкент ш., Улуғбек шаҳарчаси, Ядро физикаси институти. Тел. (+99871) 289-31-19).

Диссертация автореферати 2020 йил “___” _____ куни тарқатилди.
(2020 йил “___” _____ даги ___ рақамли реестр баённомаси).

М.Ю. Ташметов

Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш раиси, ф.-м.ф.д., профессор

С.Б. Игамов

Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш илмий котиби, ф.-м.ф.д., катта илмий ходим

И. Нуритдинов

Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш ҳузуридаги илмий семинар раиси, ф.-м.ф.д., профессор

КИРИШ (докторлик (DSc) диссертацияси аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Бугунги кунда тешикли ток ташувчиларнинг локаллашган ва локал бўлмаган ҳолатларидан ҳамда металл-диэлектрик ўтишлардан боғлиқ бўлган тешикли легирланган юқори ҳароратли ўта ўтказувчан (ЮХЎЎ)-купратларнинг янги электрон хоссаларини ўрганиш замонавий конденсирланган ҳолат физикасининг жуда муҳим масалаларидан бири ҳисобланади. Олиб борилган экспериментал тадқиқотларнинг кўрсатишича, кам легирланган ва оптимал легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг электрон хоссалари оддий диэлектрик, металл ва ўтаўтказгичларнинг электрон хоссаларидан сезиларли даражада фарқ қилар экан. Бу материалларнинг ғайриоддий электрон хоссалари бўлиб уларнинг транспорт ва магнит хоссалари ва ўта ўтказувчанликка ўтишнинг критик ҳарорати T_c ҳисобланади, бу хоссаларни аниқ билмасдан уларнинг нормал ва ўта ўтказувчан хоссаларини тўлиқ тушунишга эришиш қийин ҳисобланади.

Ҳозирги кунда дунёда ЮХЎЎ-материалларни ўрганиш жараёнида уларнинг юқорида айтилган ғайриоддий нормал ва ўта ўтказувчан хоссалари металл-диэлектрик ўтишларга, диэлектрик ва металл/ўта ўтказувчан йўлаклар (фазалар) ҳосил бўлишига, бу фазаларнинг наноўлчамли бўлинишларига ва диэлектрик ва металл/ўта ўтказувчан фазаларнинг биргаликда мавжудлигига олиб келадиган тешикли ток ташувчиларнинг локаллашиш ҳодисалари билан боғлиқлиги аниқланди. Легирланган яримўтказгичлар ва ЮХЎЎ-материалларда ток ташувчиларнинг локаллашиш жараёнларини, Мотт ва бошқа турдаги металл-диэлектрик ўтишларни ўрганишда эришилган ютуқларга қарамасдан, легирланган ЮХЎЎ-материалларда бу ҳодисаларнинг узвий миқдорий назарияси ҳалигача мавжуд эмас. Шунинг учун легирланган ЮХЎЎ-купратларда тешикли ток ташувчиларнинг локаллашиш механизмларининг ва Мотт ва бошқа турдаги металл-диэлектрик ўтишлар механизмларининг батафсил тадқиқоти жуда долзарб ва ЮХЎЎ-купратларнинг ғайриоддий диэлектрик, металл ва ўта ўтказувчан хоссаларини тушунишда жуда муҳим ҳисобланади.

Мамлакатимизда яримўтказгичлар ва ўта ўтказгичлар материалшунослигини ривожлантиришга катта эътибор қаратилмоқда. Бу борада легирланган ЮХЎЎ-купратларда локаллашган тешикли ток ташувчилар табиатини ва металл-диэлектрик ўтишларнинг ва фазаларнинг наномасштабли бўлиниш механизмларини аниқлашга асосий эътибор қаратилмоқда. Мамлакатимиз ривожини учун катта аҳамият эга бўлган бу фундаментал тадқиқотлар йўналиши ва унинг кейинчалик амалий қўлланилиши 2017-2021 йилларда Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар стратегиясида¹ акс эттирилган.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2013 йил 1 мартдаги ПФ-4512-сон “Муқобил энергия манбаларини янада ривожлантириш чора-

¹2017 йил 07 февралдаги ПФ-4947 сонли «Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича ҳаракатлар стратегияси тўғрисида» Ўзбекистон Республикаси Президенти Фармони

тадбирлари тўғрисида”ги, 2017 йил 7 февралдаги ПФ- 4947-сон “Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Харакатлар стратегияси тўғрисида”ги Фармонлари, 2017 йил 17 февралдаги ПҚ-2789-сон “Фанлар Академияси фаолияти, илмий-тадқиқот ишларини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштиришни янада такомиллаштириш бўйича чора-тадбирлар тўғрисида”ги Қарорлари ҳамда ушбу соҳадаги бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишда ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги. Мазкур тадқиқот Республика фан ва технологиялари ривожланишининг II. «Энергетика, энергия ва ресурс тежамкорлиги» устувор йўналишига мувофиқ бажарилган.

Диссертация мавзуси бўйича хорижий илмий тадқиқотлар шарҳи. Диэлектриклар ва юқори ҳароратли ўтаўтказгичлар физикаси соҳасидаги илмий тадқиқот ишлари дунёнинг қатор етакчи илмий марказлари ва олий ўқув юртларида, жумладан, Лейден университети (Нидерландия), Стэнфорд университети (АҚШ), Аргонн Миллий лабораторияси (АҚШ), Кембридж университети (Буюк Британия), Токио университети (Япония), Цюрих университети (Швейцария), Нейтрон сочилиш лабораторияси (Швейцария), Хоккайдо университети (Япония), Принстон университети (АҚШ), Макмастер университети (Канада), Жозеф Фурье номидаги университет (Франция), Брукхейвен Миллий лабораторияси (АҚШ), Макс Планк номидаги қаттиқ жисмлар физикаси институти (Германия), Лос-Аламос Миллий лабораторияси (АҚШ), Хитой фан ва технология университети (Хитой), Массачусет технология институти (АҚШ), Ландау номидаги назарий физика институти (Россия), Лебедев физика институти (Россия), Қаттиқ жисмлар физикаси институти (Россия), Рим университети (Италия), Энтвепен университети (Бельгия), Лафборо университети (Англия), Неаполь университети (Италия), Назарий физика институти (Хитой), Токио илмий университети (Япония), Б.И. Веркин номидаги паст ҳароратлар физикаси институти (Украина), Физика институти (Эстония), Оқтобе давлат университети (Қозғистон), Физика-техникавий муаммолар ва материалшунослик институти (Қирғистон) да кенг қамровли илмий-тадқиқот ишлари олиб борилмоқда.

Тешикли легирланган купратларнинг электрон хоссаларини ўрганиш бўйича олиб борилган тадқиқот ишларида жаҳон миқёсида бир қатор илмий натижалар олинган, жумладан: ЮХЎЎ-материалларда электрон фазаларнинг сегрегацияси ва бўлиниши ҳақидаги ғоялар таклиф қилинган (Ландау назарий физика институти, Россия); кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда фазалар бўлинишининг тартиблашган спинлар ва заряд ташувчиларнинг ўзгарувчан йўлаклари кўринишидалиги ҳақидаги турли назарий моделлари таклиф қилинган (Лейден университети, Нидерландия; Брукхейвен миллий лабораторияси, АҚШ; Рим университети, Италия); кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда тартиблашган спинлар ва заряд ташувчиларнинг йўлаксимон фазалари аниқланган (Брукхейвен миллий лабораторияси, АҚШ); кам ва

оптимал легирлаш режимларида ток ташувчиларнинг локаллашган ҳолатда бўлиш ҳодисасига боғлиқ ЮХЎЎ-купратларнинг солиштирма қаршилигининг CuO_2 қатламлари (яъни, *ab*- текисликда) бўйлаб ва *c* -ўқи бўйлаб диэлектрик хусусияти аниқланган, ҳамда ушбу диэлектрик кўринишнинг диэлектрик-металл ўтишлар ва ток ташувчиларнинг локал бўлмаган ҳолати билан боғлиқ равишда босқичма-босқич ўзгаришга мойиллиги аниқланган (Лос-Аламос миллий лабораторияси, АҚШ; Токио илмий университети, Япония; Каттик жисмлар физикаси институти, Россия; Халқаро ўта ўтказувчанлик технологик маркази, Япония); кам легирланган ва оптимал легирланган ЮХЎЎ-купратларда металл-диэлектрик ўтишлар ҳақида маълумот берувчи магнит қабул қилувчанликнинг ҳароратга боғлиқлиги оддий металллар магнит қабул қилувчанлиги билан солиштирганда ғайриоддийлиги тўғрисида қизиқарли эксперимент натижалари олинган (Айова давлат университети, АҚШ; Хоккайдо университети, Япония; Кембридж университети, Англия); ЮХЎЎ-купратларда оптимал легирлашдан кам легирлаш режимига ўтишда ўта ўтказувчанликнинг сўниши ҳамда ўта ўтказувчанлик ва ток ташувчиларнинг локаллашиш эффекти биргаликда намоён бўлиш тўғрисида қимматли маълумотлар олинган (Брукхейвен миллий лабораторияси, АҚШ; Тохоку университети, Япония).

Жаҳонда ҳозирги вақтда тешикли легирланган ЮХЎЎ-купратлардаги турли электрон жараёнлар орасидаги боғлиқликни аниқлаш бўйича назарий ва экспериментал тадқиқотлар олиб борилмоқда. Хусусан, ЮХЎЎ-материалларнинг қуйидаги устувор йўналишларда тадқиқотлар бажарилмоқда: легирланган купратларнинг қуйи энергетик электрон тузилишини ва улардаги тешикли легирлаш йўли билан киритилган ток ташувчиларнинг ҳақиқий табиатини аниқлаш, металл-диэлектрик ўтишлар учун масъул тешикли ток ташувчиларнинг локаллашиш ва локал бўлмаган механизмларини, кучсиз ва кам легирланган купратларда диэлектрик, металл ва ўта ўтказувчан фазаларнинг бўлинишини ойдинлаштириш, бу материалларда турли псевдотирқишлар ҳосил бўлиш механизмларини аниқлаш, тешикли легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг нормал ва ўта ўтказувчан хоссаларига ток ташувчиларнинг локаллашиш эффектлари, металл-диэлектрик ўтишлар ва фазаларнинг наноўлчамли бўлиниши, турли псевдотирқишлар ва бошқа электрон жараёнларнинг таъсири аниқланмоқда.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Турли хил қаттик жисмларда ток ташувчиларнинг локаллашиши ва металл-диэлектрик ўтишлар ҳақидаги саволлар кўплаб таниқли олимлар, жумладан россиялик (Л.Д. Ландау, С.И. Пекар), германиялик (Г. Фрелих), англиялик (Р. Пайерлс, Н.Ф. Мотт, А. Вильсон, Дж. Хаббард, Д.М. Эглес.), япониялик (Ю. Тойазова), америкалик (Р. Фейнман, Т. Холстейн, Ф.В. Андерсон, Ж. Девреес, Д. Эмин) ва бошқалар олимлар томонидан ўн йилликлар давомида ўрганилган. Бу муаммолар 1933 йилда Ландау томонидан ишқорий-галоид кристалларда F-марказларнинг (ушлаб олинган электронли анион бўш жойи) хоссаларини тушунутиришда электроннинг автололлашиши ҳақидаги ғояни таклиф қилгандан

бошланган. 1931-1958 йилларда эса А. Вильсон, Н.Ф. Мотт, Ф. Вигнер, Р. Пайерлс ва Ф.В. Андерсонлар томонидан электронларнинг локал бўлмаган ҳолатдан локаллашган ҳолатга ўтишини тушунтиришда тўлган валент зонанинг юқорида тўлмаган зона билан кесишмасидаги (Вильсон ўтиши), кучли электрон корреляцияда (яъни, кристалл панжаранинг битта атом ёки ионида жойлашган икки электроннинг Кулон итаришишида) (Мотт ўтиши), электрон газнинг кристалланишида (Вигнер ўтиши), бир ўлчамли кристалл панжаранинг силжиши ва панжара доимийсининг икки хисса ортишида (Пайерлс ўтиши) ва кристалл панжаранинг тартибсизланишида (Андерсон ўтиши) металл-диэлектрик ўтишлар ҳақидаги ғояларни таклиф қилинган.

Кейинги йилларда бу дастлабки ғоялар қаттиқ жисмларнинг турли хилида, хусусан, оксидли материаллар ва легирланган яримўтказгичларда ток ташувчиларнинг локаллашиш ва локал бўлмаган ҳодисаларини ва металл-диэлектрик ўтишларни ўрганишда қўлланилди ва ривожлатирилди. Бунда Мотт ва Андерсон металл-диэлектрик ўтишлари ғоялари жаҳонда оксидли диэлектриклар ва легирланган яримўтказгичлар физикаси соҳасида олиб борилаётган тадқиқот ишларида сезиларли даражада ривожлантирилди (Дж. Хаббард, О. Маделунг, М.И. Клингер, Дж.Р. Куллен, Э.Р. Каллен, Дж. Канамор, Я. Заанен, Г.А. Савацкий, Дж.В. Аллен, Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос, Г. Котлиар, В. Добросавлжевик). Янги легирланган мис-оксидли (купратли) ЮХЎЎлар кашф этилганидан кейин ушбу мураккаб материалларда ток ташувчилар локаллашиши ва металл-диэлектрик ўтишлар муаммолари бўйича тадқиқотлар турли усуллар ва ёндошувларни қўллаган ҳолда япониялик (М. Имада, Я. Эндо, С. Оно), россиялик (А.Н. Лавров, В.Ф. Гантмахер), хитойлик (Ж.Б. Су, Ю Ли), европалик (П. Клемериал, Дж. Финк, Г.С. Боебингер, С. Кастэллени, П.А. Магетты) олимлар ва бошқалар томонидан олиб борилмоқда.

Тешикли легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг электрон хоссаларини назарий тадқиқ қилиш бўйича ишлар олиб борилганига қарамасдан, бу материалларда тешикли ток ташувчиларнинг локаллашиш ва локал бўлмаган ва мумкин бўлган металл-диэлектрик ўтишлар механизмлари етарлича ойдинлаштирилмаган. Мотт ва бошқа металл-диэлектрик ўтишларнинг адекват микдорий мезонлари ҳақидаги масалалар ҳал қилинмади. Хусусан, легирланган купратларда Мотт ва бошқа мумкин бўлган металл-диэлектрик ўтишлар мезонларининг қўлланилиш чегаралари аниқланмаган ва бу ҳодисаларнинг назарияси ҳали ишлаб чиқилмаган. ЮХЎЎ-материаллардаги ток ташувчиларнинг локаллашиши ва металл-диэлектрик ўтишларга бағишланган назарий ишларда муҳим аҳамиятга эга бўлган ғайриоддий электрон-фонон таъсирлашувлар ва полярон эффектларининг роли ўрганилмаган.

Диссертация тадқиқотининг диссертация бажарилган илмий-тадқиқот муассасаси илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги. Диссертация тадқиқоти Ядро физикаси институти илмий-тадқиқот ишлари режасининг ФА-Ф2-Ф075+Ф070 “Реактор материаллари ва юқори ҳароратли ўтаўтказгичларнинг махсус электр, иссиқлик ва механик

хоссаларини тадқиқ қилиш” (2007-2011); Ф2-ФА-Ф120 «Кичик ўлчамли юқори ҳароратли ўтаўтказгичлар, яримўтказгичли гетероструктуралар, металл ва уларнинг оксидларининг электрон хоссалари ва радиациявий такомиллаштирилиши» (2012-2016); ОТ-Ф2-15 «Юқори ҳароратли ўтаўтказгичлар ва уларга ўхшаш конденсирланган системаларнинг янги ўтаўтказувчанлик ва ўта оқувчанлик хоссаларини назарий тадқиқ қилиш» (2017-2021) илмий лойиҳалар доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади легирланган юқори ҳароратли ўта ўтказувчан купратларда ток ташувчиларнинг локаллашиш, Мотт ва янги металл-диэлектрик ўтишлар ва фазаларнинг наноўлчамли бўлиниш механизмларини аниқлашдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

кучсиз легирланган купратларда тешикли ташувчиларнинг киришма атрофида ва деформацияланувчи кристалл панжарада локаллашиш механизмларини тадқиқ қилиш;

купратларнинг локаллашган ички тирқиш ҳолатлари деб аталувчи заряд кўчириш энергетик тирқиши ичида (яъни, таъқиқланган зонада) ҳосил бўладиган водородсимон локаллашиш ҳолатлари ва полярон ҳолатлари ҳосил бўлиш имкониятларини аниқлаш;

тешикли легирланган ЮХЎЎ-купратларда рўй берадиган Мотт металл-диэлектрик ўтишларнинг ўзига хос механизмларини тадқиқ қилиш;

турли хил легирланган купратларда амалга ошадиган ғайриоддий заряд ташувчи-фонон ўзаро таъсири натижасида бўладиган металл-диэлектрик ўтишларнинг янги механизмларини ўрганиш;

легиранган ЮХЎЎ-купратларда киришма марказлари ва деформацияланувчи панжарада локаллашган заряд ташувчиларнинг биржинсли бўлмаган фазовий тақсимланишида заряд ташувчиларга тўйинган ва тўйинмаган қатламлар ҳосил бўлишига олиб келадиган тешикли заряд ташувчиларнинг сегрегация механизмларини аниқлаш;

кам легирланган купратларнинг юқори ҳароратли ўта ўтказувчанлик механизмларида ҳамда магнит қабул қилувчанликнинг ва электр қаршилиқнинг T_c дан юқори ҳароратларда ғайриоддий бўлгандаги металл-диэлектрик ўтишлар ва диэлектрик ва металл фазаларнинг наноўлчамли бўлиниш имкониятларини аниқлаш.

Тадқиқотнинг объекти сифатида кучсиз легирланган купратлар $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ (LBCO), $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO) ва $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO), кам легирланган ва оптимал легирланган ЮХЎЎ-купратлар LBCO, LSCO ва YBCO олинган.

Тадқиқотнинг предмети бўлиб кучсиз легирланган купратларда, кам легирланган ва оптимал легирланган ЮХЎЎ-купратларда тешикли ток ташувчиларнинг локаллашиш ва локал бўлмаган жараёнлари, Мотт ва янги металл-диэлектрик ўтишлар ҳамда диэлектрик, металл ва ўта ўтказувчан фазаларнинг наноўлчамли бўлиниш жараёнлари ҳисобланади.

Тадқиқотнинг усуллари. Вариацион усуллар, ток ташувчиларнинг хусусий ва хусусий бўлмаган автолокаллашишнинг континуал модели ва

адиабатик яқинлашиш, кучли боғланиш усули, компьютер графикаси (Mathematica).

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

легиранган купратли материалларда тешикли ток ташувчиларнинг асосий ҳолатининг энергиялари ва легиранмаган купратларнинг таъқиқланган зонасида ҳосил бўлувчи водородсимон киришмалар, катта поляронлар ва биполяронларнинг энергетик сатҳлари аниқланган;

ЮХЎЎ-купратларнинг ингичка киришма зонасида ток ташувчилар орасидаги кучли корреляцияси натижасида кучсиз легиранган купратларда рўй берадиган Мотт металл-диэлектрик ўтишларнинг адекват миқдорий назарияси ривожлантирилган;

биринчи маротаба легиранган ЮХЎЎ-купратларда кучли тешикли заряд ташувчи - фонон ўзаро таъсирлашиш натижасида рўй берадиган янги металл-диэлектрик ўтишларнинг механизмлари таклиф қилинган ва уларнинг мезонлари олинган;

тешикли-легиранган ЮХЎЎ-купратларда кучли тешикли заряд ташувчи - фонон ўзаро таъсирлашиш натижасида рўй берадиган янги металл-диэлектрик ўтишларнинг батафсил миқдорий назарияси ривожлантирилган ва уларнинг кучсиз легиранган купратларда, кам ва оптимал легиранган ЮХЎЎ-купратларда рўй бериш имкониятлари кўрсатилган;

кучсиз легиранган, кам легиранган ва оптимал легиранган ЮХЎЎ-купратларда диэлектрик, металл ва ўта ўтказувчан фазаларнинг наноўлчамли бўлинишининг микроскопик механизмлари аниқланган;

биринчи маротаба ЮХЎЎ-купратларда оптимал легирашдан кам легираш режимига ўтишда ўта ўтказувчанлик сўнишининг ҳақиқий сабаби сифатида легиранган купратли материалларда рақобатдош диэлектрик, металл ва ўта ўтказувчан фазаларнинг биргаликда мавжуд бўлишидан эканлиги кўрсатилган;

биринчи маротаба кучсиз легиранган купратларнинг, кам ва оптимал легиранган ЮХЎЎ-купратларнинг магнит қабул қилувчанлигининг ҳароратга боғлиқлигини адекват ёритувчи ва бу боғлиқликдаги турли ғайриоддий ҳолатларнинг ҳосил бўлиш сабабларини тушинтириб берадиган аналитик ифодалар олинган;

кучсиз легиранган купратлар, кам ва оптимал легиранган ЮХЎЎ-купратларнинг магнит қабул қилувчанлиги ва электр қаршилигининг ҳароратга боғлиқлигида металл-диэлектрик ўтишлар ва турли хил псевдотирқишларнинг вужудга келиш имкониятлари кўрсатилган.

Тадқиқот амалий натижалари қуйидагилардан иборат:

легиранган материалларда Мотт ва янги металл-диэлектрик ўтишларнинг назарияси ишлаб чиқилган;

легиранган оксидли яримўтказгичлар ва диэлектриклардаги янги металл-диэлектрик ўтишларнинг мезонлари учун формулалар олинган;

кучсиз легиранган, кам легиранган ва оптимал легиранган оксидли яримўтказгичлар ва диэлектрикларнинг магнит қабул қилувчанлиги учун янги формулалар олинган.

Тадқиқот натижаларининг ишончилиги яхши синалган математик усуллар ва назарий ёндашувларни ишлатиш билан, яъни вариацион усуллар ва кучли боғланиш усули, ток ташувчиларнинг киришма ва деформацияланувчи панжара атрофида автолокаллашишини ёритувчи қаттиқ жисм континуал модели, ингичка киришма зоналардаги кучли электрон корреляция эффектларини таърифлашга имкон берадиган Мотт-Хаббард модели ҳамда олинган натижаларнинг тажриба натижалари билан мос келиши билан таъминланган.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти. Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти шундан иборатки, улар тешикли ток ташувчиларнинг локаллашиш ва локал бўлмаган, металл-диэлектрик ўтишлар ва электрон фазаларнинг наноўлчамли бўлиниши ҳақидаги физикавий тасаввурларнинг кенгайтишига ёрдам беради.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти легирланган ЮХЎЎ-материалларда ривожлантирилган Мотт ва янги металл-диэлектрик ўтишлар назариялари яримўтказгичлар ва ўта ўтказувчанлик материалшунослигининг физикавий асосларини ишлаб чиқишда қўлланилиши мумкин ва яхшиланган электрон хоссаларга эга, хусусан ўта ўтказувчанликка ўтишнинг юқори критик ҳарорати T_c га эга оксидли ЮХЎЎ материаллар яратиш йўллари олдидан айтиб беришга имкон беради.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. Легирланган юқори ҳароратли ўта ўтказувчан купратларда Мотт ва янги металл-диэлектрик ўтишларни тадқиқ қилиш бўйича олинган илмий натижалар асосида:

легирланган купратли материалларда тешикли ток ташувчиларнинг асосий ҳолатининг энергиялари ва легирланмаган купратларнинг таъқиқланган зонасида ҳосил бўлувчи водородсимон киришмалар, катта поляронлар ва биполяронларнинг энергетик сатҳларини аниқлашдаги натижалар “Водород энергетикаси технологиясини ривожлантириш” мақсадли илмий-техник Дастури доирасида фойдаланилган (Л.Н. Гумилев номидаги Евроосиё миллий университетининг 2019 йил 14 февралдаги № 03-02-12/704-сонли маълумотномаси). Илмий натижаларнинг қўлланилиши водород энергетикаси технологияси учун ҳар хил шароитлардаги функционал нанокомпозитли ва термоэлектрик материалларнинг техник характеристикаларини яхшилаш имконини берган;

кучсиз легирланган купратлардаги ва ЮХЎЎ-купратларнинг кенг легирлаш ораликларидаги Мотт ва янги металл-диэлектрик ўтишларнинг ишлаб чиқилган батафсил миқдорий назариялари 0113РК00953 рақамли “Панжара симметрияси камайганда ўта ўтказувчан ва ишқорий материалларнинг физикавий хоссаларини бошқариш технологиясини ишлаб чиқиш” (2012-2017) ва 0115РК01111 рақамли “Ишқорий-галлоид кристаллар-сцинтилляторларда ионлаштириувчи радиация энергиясини трансформацияси механизмларини бошқариш технологияси” (2012-2017) лойиҳалар доирасида фойдаланилган (К. Жубанов номидаги Оқтобе давлат университетининг 2019 йил 15 февралдаги № 21-13/569-сонли маълумотномаси). Илмий натижаларнинг қўлланилиши кристалл

панжаранинг паст симметриясига эга ўта ўтказувчан материалларда рўй берадиган турли электрон жараёнларини тушунтириш имконини берган;

янги металл-диэлектрик ўтишлар бўйича таклиф қилинган механизмлар ва кучсиз легирланган купратлар, кам ва оптимал легирланган ЮХЎЎ-купратларда диэлектрик, металл ва ўта ўтказувчан фазаларнинг наноўлчамли бўлиниши бўйича таклиф қилинган микроскопик механизмлар, ҳамда легирланган купрат материалларда рақобатдош диэлектрик, металл ва ўта ўтказувчан фазаларнинг биргаликда мавжуд бўлиши 0115PK02715 рақамли “Кенг қўлланилиш спектрига эга янги углеродли наноматериалларни ишлаб чиқиш” лойиҳа доирасида нанокөмпозит материалларнинг ғайриоддий электрон хөссаларини ўрганишда қўлланилган (Ал-Фөрөбий номидаги Қөзөк миллий университетининг 2019 йил 12 февралдаги № 19-9-396-сонли маълумотномаси). Илмий натижаларнинг қўлланилиши көмпозит материалларда диэлектрик-металл ва металл-углерод ўтишларда содир бўладиган физикавий жараёнларни тушунтириш ҳамда наноматериалларни ишлаб чиқиш ва тадқиқ қилиш имконини берган;

кучсиз легирланган купратлар, кам легирланган ва оптимал легирланган ЮХЎЎ-купратлардаги магнит қабул қилувчанлик ва электр қаршилиқнинг ҳароратга боғлиқлигига металл-диэлектрик ўтишлар ва турли хил псевдотирқишларнинг таъсирини назарий тадқиқ қилиш натижалари “14 Т гача бўлган магнит майдонларда $FeSe_xTe_{1-x}$ ва $ErFe_xCo_{1-x}As_2$, $RE(Rh_xRu_{1-x})_4B_4$ магнит ўтаўтказгичларнинг магнитланганлигини ва электр қаршилигини тадқиқ қилиш” (2013-2017) лойиҳаси доирасида қўлланилган (Украина Миллий Фанлар академияси Б.И. Веркин номидаги Паст ҳароратлар Физика-техника институтининг 2019 йил 12 февралдаги № 64/92-сонли маълумотномаси). Илмий натижаларнинг қўлланилиши магнитли юқори ҳароратли ўтаўтказгичларда псевдотирқишнинг ҳолатини тушунтириш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Мазкур тадқиқот натижалари 9 та халқаро ва 3 та республика илмий-амалий анжуманида муҳокамадан ўтказилган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилинганлиги. Диссертация мавзуси бўйича жами 25 та илмий иш нашр қилинган, шулардан Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг докторлик диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрларда 13 мақола, шулардан 5 таси хорижий журналларда нашр этилган.

Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми. Диссертация таркиби кириш бешта бөб, хулоса ва фойдаланилган адабиётлар рўйхатидан иборат. Диссертациянинг умумий ҳажми 148 бетни ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида ўтказилган тадқиқотларнинг долзарблиги ва зарурати асосланган, илмий ишнинг мақсади ва вазифалари, объект ва предметлари тавсифланган, республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор

йўналишларига мослиги кўрсатилган, илмий янгилиги ва амалий натижалари баён қилинган, натижаларнинг илмий ва амалий аҳамияти очиб берилган ва уларни амалиётга жорий қилиш, нашр этилган ишлар ва диссертация тузилиши бўйича маълумотлар келтирилган.

“Қаттиқ жисмларда ток ташувчиларнинг локаллашиши ва металл-диэлектрик ўтишлар механизмлари” деб номланган биринчи бобда тадқиқот олиб борилаётган тематиканинг илмий адабиётлардаги умумий таҳлили берилган. Қаттиқ жисмларда ток ташувчиларнинг локаллашиши ва металл-диэлектрик ўтишлар механизмларига бағишланган назарий тадқиқотларнинг таҳлили келтирилган. Легирланмаган ва легирланган материалларда металл-диэлектрик ўтишларга олиб келадиган электронлар (тешиклар)нинг локаллашишини ёритувчи назарий моделлар ва ёндашувларга катта эътибор қаратилган. Хусусан, Вильсон, Мотт, Пайерлс, Андерсон ва бошқалар томонидан таклиф қилинган металл-диэлектрик ўтишларнинг механизмлари қаралган. Легирланган ЮХЎЎ-купратларда металл-диэлектрик ўтишларнинг ҳал қилинмаган асосий муаммолари аниқланган, уларни бартараф этиш йўллари муҳокама қилинган ва диссертациянинг мақсад ва вазифалари баён қилинган.

“Легирланмаган ва легирланган купратли бирикмаларнинг электрон тузилишининг фарқли хусусиятлари” деб аталган иккинчи бобда купратли бирикмаларни тешикли ток ташувчилар билан легирлашда улардаги кислород валент зонасида ҳосил бўладиган тешикли ток ташувчиларнинг асосий ҳолат энергиялари ҳисобланган ва легирланмаган купратларнинг диэлектрик тирқишида (яъни, таъқиқланган зонасида) водородсимон киришмалар, катта полярон ва биполяронларнинг мумкин бўлган энергетик сатҳлари, тешикли ток ташувчилар билан легирланган купратларнинг бир заррачали ғалаёнланиш спектрларида қуйи энергетик тирқиш сифатида намоён бўладиган катта биполяронларнинг ҳосил бўлиш энергияси ва катта (би)поляронлар боғланиш энергиялари аниқланган.

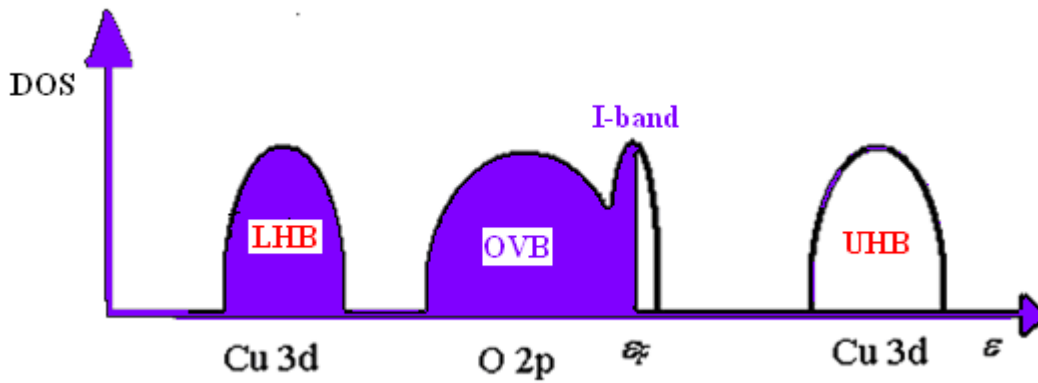
Зайнан-Савацкий-Алленнинг замонавий классификацияси бўйича легирланмаган купратларнинг зоналар тузилиши Кулон итаришиш энергияси U_d дан, d -зонанинг кенглиги W ва кислород ионларидан мис ионларига зарядлар ўтказишдаги энергетик тирқиш $E_g = \Delta_{CT} = \varepsilon_d - \varepsilon_p$ дан боғлиқ, бу ерда ε_d ва ε_p мос равишда мис ва кислород атомларидаги электронлар энергияси. Ушбу $U_d > W > \Delta_{CT}$ шартда легирланмаган купратларнинг электрон зоналар тузилиши заряд ўтказишдаги Мотт диэлектрикка мос келади. Бу материалларда Хаббард юқори зонаси ва кислород валент зонаси орасидаги энергетик тирқиш $E_g = 1.5-2$ эВни ташкил этади. Бироқ легирланмаган купратларни легирлаш жараёнида уларнинг таъқиқланган зонасида (яъни, E_g энергетик тирқиш ичида) табиати номаълумлигича қолаётган янги электрон ҳолатлар ҳосил бўлади. Шунинг учун тешикли ток ташувчилар билан легирланган купратларнинг янги электрон тузилишларини аниқлаш учун биз адиабатик яқинлашув ва ионли кристаллнинг континуал модели доирасида киришмали (хусусан, водородсимон киришмалар) ва локаллашган (би)поляронли ҳолатлар ҳосил бўлиш имкониятларини ўргандик. Бунда

легирланган купратларда тешикли ток ташувчиларнинг тўлиқ энергияси функционаллари $E_1\{\psi(\vec{r})\}E_1\{\psi(\vec{r})\}$ ва $E_2\{\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\}E_2\{\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\}$ уларнинг тўлқин функциялари $\psi(r)\psi(r)$ (битта тешик учун) ва $\Psi(r_1, r_2)\Psi(r_1, r_2)$ (иккита тешик учун), панжара деформацияси $\Delta(r)$ ва кутбланган панжаранинг электростатик потенциалдан $\phi(r)\phi(r)$ боғлиқ бўлиб, вариацион усул билан ҳисобланади ҳамда водородсимон киришмали ва локаллашган (би)поляронли ҳолатлар энергиялари аниқланади. Бизнинг ҳисоблашларимизнинг кўрсатишича, водородсимон киришмали ва локаллашган (би)поляронли ҳолатлар энергетик сатҳлари легирланмаган купратларнинг юқори энергияли электрон тузилишидан фундаментал тарзда ажралиб турадиган легирланган купратларнинг қуйи энергетик электрон тузилишини аниқлайди.

Киришмали марказларнинг ионлашиш энергиялари ва катта поляронларва биполяронларҳосил бўлиш энергиялари легирланган купратларнинг уйғониш спектрида уларнинг янги тирқишли хусусиятлари каби намоён бўлади. Бундай тирқишли хусусиятлар кучсиз легирланган ва кам легирланган купратларда тажрибаларда кузатилган бўлиб, 0.04-0.06 эВ ва 0.08-0.15 эВ энергияларда кузатилган қуйи энергетик тирқишлар мос равишда катта полярон E_p ва биполяронлар E_{bv} нинг боғланиш энергиялари билан боғлиқ.

“Легирланган купратларда Мотт металл-диэлектрик ўтишларнинг қўлланилиши” деб номланган учинчи бобда Мотт металл-диэлектрик ўтишлар концепциясининг легирланган купратларга қўлланилиши тўғрисидаги савол янада адекват ва реалистик ёндошувлар орқали ечилиши мумкинлиги кўрсатилган. Бунда биз легирланган купратларда Мотт металл-диэлектрик ўтишларининг ўзига хос хусусиятларини бу киришма зоналарида: (1) водородсимон киришма марказларининг, (2) кислород валент зонаси ва ўтказувчанлик зонаси (Хаббард юқори зонаси) орасида ингичка киришма зоналар ҳосил бўлиши, ва (3) ток ташувчиларнинг кучли корреляция эффектлари мавжуд бўлган шароитларда қарадик.

Купратларни легирлашнинг паст даражаларида Ферми сатҳи заряд ўтказиш энергетик тирқиши Δ_{CT} марказига яқин жойда бўлади. Легирлаш даражаси ортиши билан киришмали зона кислород валент зонасининг юқори қисмида ҳосил бўлади ва p -тип яримўтказгичларда Ферми сатҳи уларнинг валент зонаси юқорисига силжигани каби Ферми сатҳи киришмали зона томон силжийди (1-расм).



LHB: Хаббард қуйи зонаси. UHB: Хаббард юқори зонаси. OVb: кислород валент зонаси.
 I: киришмали (нуқсонли) зона. ϵ_F киришма зонасининг Ферми энергияси.

1-расм. Кам легирланган купратларда энергия ϵ функцияси кўринишидаги схематик зоналар тузилиши

Бир жинсли бўлмаган легирланган купратларда легирловчи киришмаларнинг турли хил фазовий тартибланиши уларнинг турли хил ўта катта панжаралари ва ингичка киришма зоналарининг ҳосил бўлишига олиб келади. Водородсимон киришма марказлари панжара доимийси a_I ва координацион сони z бўлган ўта катта панжаралар ҳосил қилади деб тахмин қилинади. Бунда ушбу киришма марказларнинг турли хил фазовий тартибланиши оддий куб ($z=6$), ҳажмий марказлашган куб ($z=8$) ва томонлари марказлашган куб ($z=12$) ўта катта панжаралар ва купратларнинг таъқиқланган зонасида ҳар хил киришма зоналарининг ҳосил бўлишига олиб келади. Бу киришма зоналарининг кенглиги кучли боғланиш яқинлашувида қуйидаги муносабатдан аниқланади

$$W_I = 2zJ \quad W_I = 2zJ, \quad (1)$$

бу ерда $J = \frac{\hbar^2}{2m^*a_I^2} J = \frac{\hbar^2}{2m^*a_I^2}$ яқин қўшни киришма марказлари орасидаги сакраш интеграллари, m^* киришмаларда локаллашган тешикли ток ташувчилар массаси.

Водородсимон киришма марказлари учун сакраш интеграллари қуйидагича аниқланади

$$J = \frac{e^2\lambda}{\epsilon_0} \exp(-\lambda R) \quad J = \frac{e^2\lambda}{\epsilon_0} \exp(-\lambda R), \quad (2)$$

бу ерда λ киришма ҳолати тескари радиуси, R водородсимон киришма марказлари орасидаги масофа.

Водородсимон киришма марказлари сони ортиши билан киришмали ҳолатларнинг устма-уст тушиши ортади, киришма зона кенлиги W_I ҳам ортади ва кенгайган киришмали зонада тешикли ток ташувчиларни ўтказиш

жараёни уларнинг зонадаги ҳаракати (ёки металлсимон) бўлади. Тешикли легирланган купратларда ток ташувчиларнинг кучли корреляцияси туфайли содир бўладиган Мотт металл-диэлектрик ўтишларнинг имконияти битта киришма марказида жойлашган иккита тешикли ток ташувчиларнинг Кулон итаришиш энергияси U катталигидан ҳамда киришма зонаси кенглиги W_I дан боғлиқ. Бу материалларда Мотт-Хаббард модели битта тешикли киришмалар кристалл панжараси учун қўлланилади, бунда уларнинг хар бири катта r масофаларда $\exp(-r/a_H)$ каби камайдиган $\Psi_I(r)\Psi_I(r)$ тўлқин функция орқали ёритилади, кучли боғланиш яқинлашуви битта киришма марказидан бошқасигача бўлган a_I масофа етарлича катта бўлганлиги сабабли қўлланилмайди. Водородсимон киришмали атомларнинг ингичка зонасига Мотт-Хаббард модели қўлланилаётганда, легирланган купратли материалларда Мотт металл-диэлектрик ўтиши чегараларини аниқлаш учун U нинг аниқ қийматини аниқлаш жуда муҳим ҳисобланади. Легирланган яримўтказгичларда Мотт металл-диэлектрик ўтишлари бўйича олдин олиб борилган назарий тадқиқотларда U нинг қиймати панжара водородсимон иони зарядини шу ионда жойлашган иккита заряд ташувчиларидан биттаси билан экранлаш эффектини ҳисобга олмаган ҳолда аниқланган. Водородсимон акцепторли киришма марказининг иккита тешикли заряд ташувчиларидан биттаси билан экранлаш эффекти киришма иони заряди Z нинг камайишига олиб келади. Бунда водородсимон киришма қандайдир эффектив заряд Z^* га эга бўлади ва иккита тешикли водородсимон киришма маркази гамилтониани куйидаги кўринишга эга бўлади:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \nabla_2^2 - \frac{Z^* e^2}{\epsilon_0} \left[\frac{1}{|\vec{r}_1|} + \frac{1}{|\vec{r}_2|} \right] + \frac{e^2}{\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \nabla_2^2 - \frac{Z^* e^2}{\epsilon_0} \left[\frac{1}{|\vec{r}_1|} + \frac{1}{|\vec{r}_2|} \right] + \frac{e^2}{\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (3)$$

бу ерда $m_1^* m_1^*$ ва $m_2^* m_2^*$ - тешикли ток ташувчиларнинг эффектив массалари, $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, $\vec{r}_1 \vec{r}_1$ ва $\vec{r}_2 \vec{r}_2$ координаталарга эга бу ток ташувчилар орасидаги масофа.

Водородсимон киришма маркази асосий ҳолат энергияси иккита тешикли ток ташувчили тўлқин функциясидан фойдаланиб ҳисобланади

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_I(\vec{r}_1) \psi_I(\vec{r}_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z^*}{a_H} \right)^3 \exp \left[-\frac{Z^*(r_1 + r_2)}{a_H} \right]$$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_I(\vec{r}_1) \psi_I(\vec{r}_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z^*}{a_H} \right)^3 \exp \left[-\frac{Z^*(r_1 + r_2)}{a_H} \right], \quad (4)$$

бу ерда Z^* вариацион параметр, $a_H = \hbar^2 \epsilon_0 / m^* e^2$ - водородсимон киришма марказининг Бор радиуси, $m^* = m_1 = m_2$ - легирланган купратда тешикли ток ташувчининг эффектив массаси.

Бу ҳолда каралаётган системанинг асосий ҳолат энергияси қуйидаги ифодадан топилади:

$$E(Z^*) = \iint \Psi^*(r_1, r_2) H \Psi(r_1, r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad E(Z^*) = \iint \Psi^*(r_1, r_2) H \Psi(r_1, r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (5)$$

Интеграл (5) ни тўлқин функцияси (4) дан фойдаланган ҳолда ҳисоблаб ва $E(Z^*)$ функционални Z^* бўйича минимизация қилиш орқали қуйидагини топамиз

$$Z^* = Z - \frac{5}{16} Z^* = Z - \frac{5}{16}. \quad (6)$$

Шундай қилиб, Мотт энергетик тирқишини ташкил этувчи битта киришма марказида жойлашган иккита тешикли ток ташувчилар орасидаги Кулон итаришиш энергиясининг аниқ қиймати қуйидагига тенг

$$U = \iint \psi_I^2(r_1) \frac{e^2}{\epsilon_0 r_{12}} \psi_I^2(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 = \frac{5}{4} \left(Z - \frac{5}{16} \right) E_I^H$$

$$U = \iint \psi_I^2(r_1) \frac{e^2}{\epsilon_0 r_{12}} \psi_I^2(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 = \frac{5}{4} \left(Z - \frac{5}{16} \right) E_I^H, \quad (7)$$

бу ерда $E_I^H = \frac{e^2}{2\epsilon_0 a_H} E_I^H = \frac{e^2}{2\epsilon_0 a_H}$ - бир тешикли водородсимон киришма маркази ионлашиш энергияси.

Биз легирланган купратларда Мотт металл-диэлектрик ўтишларининг адекват мезонларини ноаниқлик тамойилини $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$ $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$ қўллаш орқали олдик, бу ерда ΔE ва Δt мос равишда тўлиқ энергия ва вақт бўйича ноаниқлик. Бу ноаниқлик муносабатини баъзи бир шакл ўзгартиришдан кейин қуйидагича ёзиш мумкин

$$\Delta x \cdot \Delta \bar{V} \geq \frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*} \cdot \frac{1}{2\Delta k} \Delta x \cdot \Delta \bar{V} \geq \frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*} \cdot \frac{1}{2\Delta k}, \quad (8)$$

бу ерда $\Delta \bar{V} \Delta \bar{V}$ ва Δk ток ташувчининг потенциал энергияси ва тўлқин вектори бўйича ноаниқлик.

(8) муносабатдаги $\frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*}$ $\frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*}$ ифода ток ташувчининг кинетик энергияси бўйича ноаниқликни билдиради. Киришмали зонада ток ташувчининг кинетик энергияси бўйича ноаниқликни қуйидагича аниқлаш

мумкин $\frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*} \simeq \frac{W_I}{2}$ $\frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*} \simeq \frac{W_I}{2}$, тўлқин вектори бўйича

ноаниқлик эса қуйидагича $\Delta k \simeq 1/a_I$ $\Delta k \simeq 1/a_I$ аниқланади.

У ҳолда (8) ифодани қуйидагича қайта ёзамиз

$$\Delta\chi \cdot \Delta\bar{V} \simeq \frac{W_I a_I}{4} \Delta\chi \cdot \Delta\bar{V} \simeq \frac{W_I a_I}{4} \quad (9)$$

Бошқа томондан водородсимон киришма марказидаги ток ташувчининг потенциал энергиясидаги ноаниклик $\Delta\bar{V}$ Хаббард энергияси U тартибида, бу ток ташувчининг координатаси бўйича ноаниклик эса водородсимон киришма марказининг Бор радиуси a_H тартибида бўлади. Бу ҳолда тешикли ток ташувчининг локаллашиш шарти қуйидагича ёзилади $U \cdot a_H \gtrsim \frac{W_I a_I}{4}$ $U \cdot a_H \gtrsim \frac{W_I a_I}{4}$ ёки кейинчалик таҳлилда осон бўлиши учун

$$\frac{W_I}{U} \lesssim \frac{4a_H W_I}{a_I U} \lesssim \frac{4a_H}{a_I} \quad (10)$$

Бу шарт жуда муҳим фундаментал натижа бўлиб ҳисобланади ва легирланган материалларда Мотт металл-диэлектрик ўтиш миқдорий мезонларининг аниқ қийматларини топиш имконини беради. Хаббард энергияси U ва киришма зонаси кенглигини W_I билган ҳолда (10) ифодадан легирланган купратларда Мотт металл-диэлектрик ўтишларнинг мезонларини аниқлаш мумкин. Водородсимон киришма марказлари учун $Z=1$ да U нинг қиймати (7) ифодадан аниқланади $U = (55/64)E_I^H$ $U = (55/64)E_I^H$, киришма зона кенглигини W_I эса қуйидаги ифодадан топиш мумкин

$$W_I = 2z \frac{e^2}{\epsilon_0 a_H} \exp(-\lambda R) \quad W_I = 2z \frac{e^2}{\epsilon_0 a_H} \exp(-\lambda R) \quad (11)$$

бу ерда $\lambda = a_H^{-1}$ $\lambda = a_H^{-1}$.

У ҳолда Мотт металл-диэлектрик ўтишлар мезони қуйидагича ёзилади

$$\frac{W_I}{U} \simeq \frac{64z}{55} \exp\left(-\frac{R}{a_H}\right) = \frac{4a_H W_I}{a_I U} \simeq \frac{64z}{55} \exp\left(-\frac{R}{a_H}\right) = \frac{4a_H}{a_I} \quad (12)$$

Водородсимон киришма марказлари оддий куб ($z=6$), ҳажмий марказлашган куб ($z=8$), ва томонлари марказлашган куб ($z=12$) ўта катта панжаралари ҳосил қилса, уларнинг ўта катта панжара доимийлари мос равишда $a_I = R$ $a_I = R$, $a_I = \frac{2R}{\sqrt{3}}$ $a_I = \frac{2R}{\sqrt{3}}$ ва $a_I = \sqrt{2}R$ $a_I = \sqrt{2}R$ га тенг бўлади. Шундай қилиб, (12) ифода қуйидагича ёзилади

$$\left(\frac{64z}{55n^{\frac{1}{3}}a_H}\right) \exp\left[-\frac{1}{n^{\frac{1}{3}}a_H}\right] = 1 \quad \left(\frac{64z}{55n^{\frac{1}{3}}a_H}\right) \exp\left[-\frac{1}{n^{\frac{1}{3}}a_H}\right] = 1 \quad (z=6)$$

учун),

(z=8 учун),

(z=12 учун).

Бу тенгламаларни $n^{\frac{1}{3}}a_H n^{\frac{1}{3}}a_H$ га нисбатан ечгандан кейин Мотт металл-диэлектрик ўтишларининг мезонлари аниқланди: $n^{\frac{1}{3}}a_H \simeq 0.3265$
 $n^{\frac{1}{3}}a_H \simeq 0.3265$ (z=6), $n^{\frac{1}{3}}a_H \simeq 0.2968$ $n^{\frac{1}{3}}a_H \simeq 0.2968$ (z=8) ва $n^{\frac{1}{3}}a_H \simeq 0.2504$
 $n^{\frac{1}{3}}a_H \simeq 0.2504$ (z=12).

Агар $m^*=m_e$ ва $\epsilon_0=30$ деб олсак, LSCO учун $a_H \approx 15.87 \text{ \AA}$ га тенг бўлади, Мотт металл-диэлектрик ўтишлари бу материалларда тешикли ток ташувчиларнинг $x_c = n_c/n_a \simeq 0.00075 - 0.00166$ $x_c = n_c/n_a \simeq 0.00075 - 0.00166$ концентрациясида рўй беради, бу ерда $n_a=1/V_a$ кристалл панжара атомлари зичлиги, V_a купратларда CuO_2 га тўғри келган ҳажм (LSCO учун $V_a=190 \text{ \AA}^3$). x_c нинг бу қийматлари тажрибада топилган қийматлар $x_c=0.02$ дан жуда кичик. Бирок, катта радиусли киришма ва катта полярон LSCO да водородсимон киришмали марказ ҳосил қилиши мумкин. Катта поляроннинг LSCO даги водородсимон ҳолати $a_H = 0.529\epsilon_0 m_e / m_p \text{ \AA}$ $a_H = 0.529\epsilon_0 m_e / m_p \text{ \AA}$ ифодадан топиладиган Бор радиусига эга бўлади. У ҳолда $m_p=2.1m_e$ ва $\epsilon_0=28$ деб олсак, $a_H \approx 7.06 \text{ \AA}$. Бу вазиятда Мотт металл-диэлектрик ўтишлари $x_c=0.0188$ (z=6) ва $x_c=0.0141$ (z=8) қийматларда рўй беради. x_c нинг бу қийматлари тажрибада топилган LSCO антиферромагнитик тартиб бузиладиган $x_c=0.02$ қийматларга яқин ҳисобланади.

“Тешикли легирланган ЮХЎЎ-купратларда янги металл-диэлектрик ўтишлар ва фазаларнинг наноўлчамли бўлиниши” деб аталган тўртинчи бобда кучли тешикли ток ташувчи-кристалл панжара ўзаро таъсирлашувлари ва полярон эффектлари сабабли тешикли легирланган ЮХЎЎ-купратлардаги янги металл-диэлектрик ўтишлар ва фазаларнинг наноўлчамли бўлиниши ўрганилган. ЮХЎЎ-купратларнинг энг муҳим фарқли хусусияти шундан иборатки, улар типик кутбли материаллар бўлиб, уларда тешикли ток ташувчи-кристалл панжара ўзаро таъсирлари етарлича кучлидир. Купратли бирикмаларнинг юқори ионлашиш даражаси $\eta=\epsilon_\infty/\epsilon_0 \ll 1$

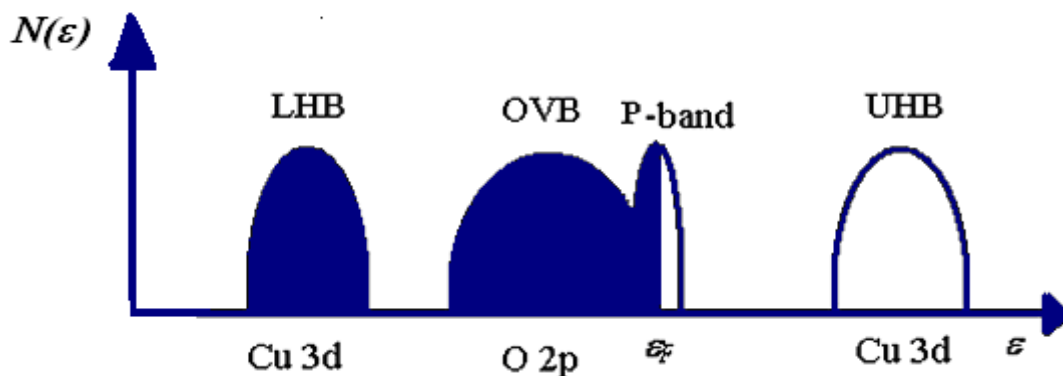
қутбий электрон-фонон ўзаро таъсирларни ва поляронлар ҳосил бўлиш тенденциясини кучайтиради. Купратли бирикмаларни тешикли ток ташувчилар билан легирлаш жараёнида эркин тешиклар бошланғич пайтда кислород валент зонасида ҳосил бўлади ва бу тешикли ток ташувчилар кристалл панжара тебранишлари билан кучли таъсирлашади ва улар полярон бўлиб қолади. Катта поляронлар водородсимон киришма марказлари каби панжара доимийси a_p ва координацион сони z бўлган турли хил ўта катта панжаралар ҳосил қилади деб ҳисоблаш мумкин. Бунда полярон ток ташувчиларнинг мумкин бўлган тартибланиш типлари поляронларнинг оддий куб, ҳажмий марказлашган куб ва томонлари марказлашган кубли координацион сонлари мос равишда $z=6, 8$ ва 12 га тенг бўлган ўта катта панжаралари ҳосил бўлишига ва купратларнинг заряд ўтказувчи энергетик тирқишида турли хил полярон зоналарнинг ҳосил бўлишига олиб келади (2-расм). Кучли боғланиш яқинлашувида катта поляронларнинг энергетик зоналарининг кенглиги киришма зонаси кенглиги каби қуйидаги ифодадан аниқланади

$$W_p = zZJ_p W_p = zZJ_p \quad (13)$$

бу ерда $J_p = \frac{\hbar^2}{2m_p a_p^2} J_p = \frac{\hbar^2}{2m_p a_p^2}$ поляронлар ўта катта панжараларининг энг яқин қисмлари орасидаги сакраш интегралли, m_p полярон ток ташувчиларнинг эффектив массаси.

Агар поляронлар панжара параметрлари $a_p = R$ $a_p = R$ ($z=6$), $a_p = \frac{2R}{\sqrt{3}}$ ($z=8$) ва $a_p = \sqrt{2}R$ $a_p = \sqrt{2}R$ ($z=12$) бўлган оддий куб, ҳажмий марказлашган куб ва томонлари марказлашган кубли ўта катта панжаралар ҳосил қилса, бу панжаралардаги полярон ток ташувчиларининг зичликлари

мос равишда $n = \frac{1}{a_p^3} n = \frac{1}{a_p^3}$, $n = \frac{2}{a_p^3} n = \frac{2}{a_p^3}$ ва $n = \frac{4}{a_p^3} n = \frac{4}{a_p^3}$ га тенг бўлади.



LHB- Хаббард қуйи зонаси. UHB- Хаббард юқори зонаси. OVB- кислород валент зонаси. P- полярон зонаси. ϵ_F - полярон зонасининг Ферми энергияси

2-расм. Кам легирланган купратларнинг схематик зоналар тузилиши (ҳолатлар зичлиги $N(\varepsilon)$ поляронлар энергияси ε функцияси)

Биз тешикли поляронли ток ташувчиларнинг локаллашиш шартларини ўргандик ва янги металл-диэлектрик ўтишларнинг мезонларини Гейзенберг ноаниқлик тамойилини қўллаш билан аниқладик, уни оддий шакллантиришлардан кейин қуйидагича ёзишимиз мумкин

$$\Delta x \cdot \Delta \bar{V} \geq \frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m_p} \cdot \frac{1}{2\Delta k} \Delta x \cdot \Delta \bar{V} \geq \frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m_p} \cdot \frac{1}{2\Delta k}, \quad (14)$$

бу ерда Δx , $\Delta \bar{V}$ ва Δk мос равишда тешикли поляроннинг координатада, потенциал энергияда ва тўлқин вектордаги ноаниқликлари.

Полярон ток ташувчининг полярон зонадаги кинетик энергияси ва тўлқин вектори бўйича ноаниқликларни қуйидагича ёзиш мумкин $\frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m_p} \sim \varepsilon_F$ ва $\Delta k \sim 1/a_p$, бу ерда полярон зонасидаги Ферми энергияси ушбу ифодадан топилади

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 [n])^{2/3}}{2m_p} \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 [n])^{2/3}}{2m_p}, \quad (15)$$

n - поляронлар концентрацияси.

У ҳолда (14) муносабатни қуйидагича ёзиш мумкин

$$\Delta x \cdot \Delta \bar{V} \simeq \frac{\varepsilon_F a_p}{2} \Delta x \cdot \Delta \bar{V} \simeq \frac{\varepsilon_F a_p}{2} \quad (16)$$

Поляроннинг потенциал энергиясидаги $\Delta \bar{V}$ ноаниқлик полярон ҳосил бўлиш энергияси E_p тартибида бўлишини ва автолокаллашган тешикли ток ташувчи жойлашган потенциал ўранинг чуқурлигига тенглигини ва унинг координатасидаги Δx ноаниқлик полярон радиуси R_p тартибида бўлишини ҳисобга олиб, (16) ноаниқлик муносабатини қуйидагича ёзамиз

$$\frac{E_p}{\varepsilon_F} \geq 0.5 \frac{a_p}{R_p} \frac{E_p}{\varepsilon_F} \geq 0.5 \frac{a_p}{R_p} \quad (17)$$

Бу тенгсизлик полярон ток ташувчиларнинг локаллашиш шarti бўлиб ва қаттиқ жисмларда янги металл-диэлектрик ўтишларнинг универсал мезони ҳисобланади. Бундай металл-диэлектрик ўтишларнинг мезони учун (15) ва (17) ифодаларни ҳисобга олиб қуйидагини ёзамиз

$$x = x_c = \frac{n_c}{n_a} = \frac{1}{3\pi^2 n_a} \left[\frac{4m_p E_p R_p}{\hbar^2 a_p} \right]^{\frac{3}{2}} \quad x = x_c = \frac{n_c}{n_a} = \frac{1}{3\pi^2 n_a} \left[\frac{4m_p E_p R_p}{\hbar^2 a_p} \right]^{\frac{3}{2}}, \quad (18)$$

кристалл панжарадаги атомлар зичлиги $n_a=1/V_a$ га тенглиги ва купратларда CuO_2 ҳажми V_a орқали берилган.

Поляронларнинг оддий куб ($z=6$), ҳажмий марказлашган куб ($z=8$) ва томонлари марказлашган куб ($z=12$) ўта катта панжаралари учун панжара

параметрлари мос равишда қуйидагича $a_p = 2R_p$, $a_p = 2R_p$, $a_p = \frac{4R_p}{\sqrt{3}}$ ва $a_p = \frac{4R_p}{\sqrt{3}}$ аниқланган.

Тешикли легирланган ЮХЎЎ-купратларда металл-диэлектрик ўтишлар рўй берадиган полярон ток ташувчиларнинг (18) муносабатдан аниқланадиган ўлчамсиз критик концентрациясининг минимал ва максимал қийматлари поляронларнинг томонлари марказлашган куб ва оддий куб ўта катта панжараларига мос келади. Шунинг учун (18) мезонни поляронларнинг оддий куб ва томонлари марказлашган куб ўта катта панжараларига қўллаб, тешикли легирланган купратларда металл-диэлектрик ўтишларнинг қуйидаги мезонларини топамиз

$$x_{c1} = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3 n_a} [2m_p E_p]^{\frac{3}{2}} \quad x_{c1} = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3 n_a} [2m_p E_p]^{\frac{3}{2}} \quad (19)$$

ва

$$(20)$$

Легирланган ЮХЎЎ-купратларда янги металл-диэлектрик ўтишлар имкониятини қараб чиқамиз ва бу ўтишлар рўй берадиган полярон ток ташувчиларнинг концентрациясининг критик қийматларини ҳисоблаймиз.

Тажриба маълумотларига кўра катта поляронлар массасини LSCO да $m_p=(2.1-2.7)m_e$ га тенг деб, YBCO да эса $m_p=(2.0-4.0)m_e$ га тенг деб олишимиз мумкин.

Бунда энергиянинг $\epsilon_\infty=3.5$ ва $\eta=0.02-0.08$ даги назарий қийматларидан $E_p=(0.09-0.106)$ эВ фойдаланамиз. LSCO да V_a нинг қиймати $V_a=190 \text{ \AA}^3$ га

тенглигидан, $n_a = 1/V_a \approx 0.53 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ га тенг бўлади.

YBCO да эса $V_a=100 \text{ \AA}^3$ тенг, $n_a = 1/V_a \approx 10^{22} \text{ см}^{-3}$ га тенг бўлади.

Юқорида келтирилган параметрларнинг m_p , E_p ва n_a назарий ва тажрибавий қийматларидан фойдаланиб, LSCO ва YBCO лардаги металл-диэлектрик ўтишлар учун легирлаш даражасининг қуйидаги критик қийматларини оламиз:

$$x_{c1} \approx 0.07 - 0.131 \quad x_{c1} \approx 0.07 - 0.131 \quad \text{ва} \quad x_{c2} \approx 0.042 - 0.078 \quad x_{c2} \approx 0.042 - 0.078 \quad \text{LSCO учун} \quad (21)$$

ва

$$x_{c1} \approx 0.035 - 0.125 \quad x_{c1} \approx 0.035 - 0.125 \quad \text{ва} \quad x_{c2} \approx 0.021 - 0.074 \quad x_{c2} \approx 0.021 - 0.074$$

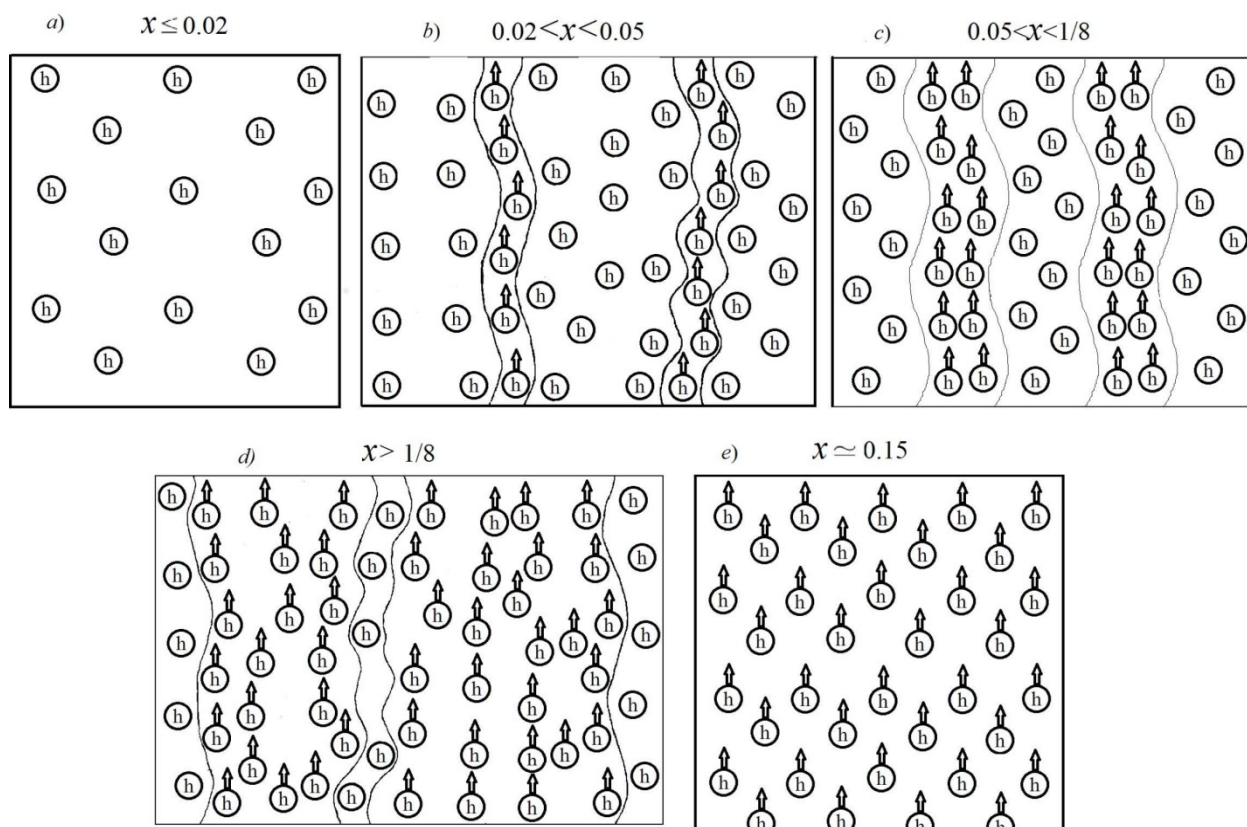
YBCO учун (22)

Кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда LSCO металл-диэлектрик ўтишлар ва диэлектрик ва металл фазаларнинг наноўлчамли бўлиниши тешикли ток ташувчиларга тўйинган металл ($x > x_{c1}$ ва $x > x_{c2}$) соҳаларда ва тешикли ток ташувчиларга тўйинмаган диэлектрик ($x < x_{c2}$ ва $x < x_{c1}$) соҳаларда кенг легирлаш оралиқларида $x \approx 0.04$ дан (кучсиз легирланган соҳа) $x \geq 0.13$ гача (“ажойиб легирлаш $x=1/8$ ” ни ўз ичига олган кам легирланган соҳа) рўй бериши мумкин, бундай металл-диэлектрик ўтишлар ва диэлектрик ва металл фазаларнинг наноўлчамли бўлиниши легирланган YBCO купратларида кучсиз легирланган ($x \approx 0.02-0.05$) ва кам легирланган ($x \approx 0.05-0.125$) режимларда, яъни $x \approx 0.02$ дан $x \approx 1/8$ гача легирлаш чегараларида содир бўлиши мумкин. Бу натижалар кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда металл-диэлектрик ўтишлар ва диэлектрик, металл ва ўта ўтказувчан йўлаклар/страйплар бўйича мавжуд тажриба натижалари билан мос келади.

Легирланган купратларда полярон ток ташувчиларнинг нотекис фазовий тақсимланишида рақобатдош диэлектрик ва металл фазаларнинг биргаликда мавжудлигининг янги микроскопик манзараси ўрнатилди. Натижаларнинг кўрсатишича, кучсиз легирланган купратларда биринчи металл фазалар $x > 0.02$ да ингичка йўлак/страйплар кўринишида тажриба натижалари билан тўлиқ мос равишда пайдо бўлади (3a,b-расм). Бундан кучсиз легирланган купратларда (яъни, $x \approx 0.02-0.05$ да) металл ва диэлектрик фазалар локал ўлчамларда мавжуд бўлади. Бу материалларда $x \geq 0.05$ ва $T=0$ да содир бўладиган металл-диэлектрик ўтишлар тажрибада ўтаўтказгич-диэлектрик кўринишида бўлади. Кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда $x > 0.05$ да рақобатдош диэлектрик, металл ва ўта ўтказувчан фазалар галма-гал келадиган динамик ва статик йўлаклар/страйплар кўринишида глобал ўлчамларда мавжуд бўлади (3c-расм).

“Кучсиз легирланган ва кам легирланган купратларнинг нормал ва ўта ўтказувчан хоссаларида металл-диэлектрик ўтишлар ва диэлектрик, металл ва ўта ўтказувчан фазаларнинг мавжудлик эффектларининг намоён бўлишлиги” деб номланган бешинчи бобда металл-диэлектрик ўтишлар муаммоси ЮХЎЎ-купратларнинг турли хил легирлаш даражаларида уларнинг магнит қабул қилувчанлиги ва солиштирма қаршилигининг ҳароратга боғлиқлигини ўрганиш орқали ҳал қилинган. Кам легирланган режимда бу материалларнинг ўта ўтказувчанлигининг сўниши муаммоси оптимал легирлашдан кам легирлаш режимига ўтганда купратларни тешикли легирлашдаги рақобатдош диэлектрик ва ўта ўтказувчан фазаларнинг мавжудлик эффектларининг муҳим ролини аниқлаш орқали ҳам ечими топилган. Кам легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг ғайриоддий нормал хоссаларини тушунтиришга уринишлар (хусусан, ўта ўтказувчан соҳадаги металл-диэлектрик ўтиш, ЮХЎЎ-купратларнинг с ўқи бўйлаб солиштирма электр қаршилигининг диэлектрик табиати ва металл

ҳолатда магнит қабул қилувчанликнинг ҳароратга боғлиқлиги), уларнинг ўта ўтказувчанлиги камайиши қатор баҳсли таклифларга олиб келди.



a) кучсиз легирланган купратларда $x \leq 0.02$ тешикли ток ташувчилар (тешикли поляронлар) диэлектрик фазада қўзғалмас, стрелкасиз кўрсатилган. (b) кучсиз легирланган купратларда ($0.02 < x < 0.05$) ҳаракатсиз ва ҳаракатдаги тешикли ток ташувчилар мос равишда кенг диэлектрик йўлакда стрелкасиз белгиланган ва ингичка металл йўлақларда стрелка билан белгиланган. (c) кам легирланган купратларда ($0.05 < x < 1/8$) ҳаракатсиз ва ҳаракатдаги тешикли ток ташувчилар мос равишда бир ҳил ўлчамга эга диэлектрик ва металл ўта ўтказувчан йўлақларда стрелкасиз ва стрелка билан белгиланган. (d) кам легирланган купратларда ($x > 1/8$) ҳаракатсиз ва ҳаракатдаги тешикли ток ташувчилар мос равишда ингичка диэлектрик йўлакда стрелкасиз ва кенг металл йўлакда стрелка билан кўрсатилган. (e) оптимал легирланган купратларда ($x \approx 0.15$) тешикли ток ташувчилар металл ўта ўтказувчан фазада стрелкалар билан кўрсатилган

3-расм. Металл-диэлектрик ўтишлар ва фазаларнинг наноўлчамдан макроўлчамли йўлақларга кўпўлчамли бўлиниши ва диэлектрик ва металл ўта ўтказувчан фазаларнинг мавжудлик эволюциясининг схематик кўриниши

Маълумки, кам легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг нормал ҳолатида магнит қабул қилувчанлик ва солиштирма қаршиликлари одатдаги зоналар назарияси билан тушунтириладиган бу каби электрон хоссаларидан тубдан фарқ қилади. Кучсиз легирланган купратлар ва кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда магнит қабул қилувчанликнинг ғайриоддий табиатини ўрганиш

учун катта поляронлар ва биполяронлар модели, киришмали ва поляронли зоналар моделларидан фойдаланилди. ЮХЎЎ-купратларнинг нормал ҳолатида полярон ток ташувчилар жуфтлашишининг БКШ-симон назариясидан ҳам фойдаланамиз.

Кучсиз легирланган купратларда ($x < 0.05$) нуқсонлар марказлари ва поляронлар (катта биполяронларнинг термик бўлиниши маҳсулоти бўлган) магнит қабул қилувчанликка ҳисса қўшади ва қуйидаги ифодадан аниқланади

$$\chi_t(T) = \chi_D(T) + \chi_p^*(T) = \frac{\mu^2}{k_B T} n_D - 2\mu_B^2 \int_0^\infty \frac{D_p(\varepsilon) (\partial f_p^*)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon$$

$$\chi_t(T) = \chi_D(T) + \chi_p^*(T) = \frac{\mu^2}{k_B T} n_D - 2\mu_B^2 \int_0^\infty \frac{D_p(\varepsilon) (\partial f_p^*)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \quad (23)$$

бу ерда $\chi_D(T)$ и $\chi_p^*(T)$ мос равишда нуқсонлар марказлари ва полярон ток ташувчиларнинг $\chi(T)$ даги ҳиссалари,

$\frac{\partial f_p^*}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{\exp\left[\frac{(\varepsilon + E_{bB})}{k_B T} + 1\right]}$ катта поляронлар учун Ферми тақсимооти бўлиб, боғланиш энергияси $E_{bB} = |E_B - 2E_p|$ га тенг бўлган биполяронларнинг

термик ажралишидан вужудга келади,

$D_p(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2} m_p^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon}}{\pi^2 \hbar^2}$ поляронлар ҳолат зичлиги, μ_B Бор магнетони, n_D нуқсонлар марказлари зичлиги.

Катта биполяронлар боғланиш энергияси ε_∞ нинг қийматлари 5 дан 3 гача камайганида ва η нинг 0.08-0.14 қийматлар оралиғида 0.030 эВ дан 0.0000242 эВ гача ўзгаради. (23) тенгламадаги биринчи ҳад Кюри қонуни бўлиб,

локаллашган заряд ташувчилар учун $\chi_D(T) \sim \frac{1}{T}$ $\chi_p^*(T) \sim \frac{1}{T}$.

Термик ажралган катта биполяронларнинг $\chi(T)$ га қўшадиган ҳиссаси қуйидагича аниқланади

$$\chi_p^*(T) = \frac{2\sqrt{2}\mu_B^2 m_p^{\frac{3}{2}} \sqrt{k_B T}}{\pi^2 \hbar^3} \times e^{E_{bB}/k_B T} \int_0^\infty \frac{\sqrt{y} e^y}{\left(e^{\left[\frac{(E)_{bB}}{k_B T} \right]} e^y + 1 \right)^2} dy$$

$$\chi_p^*(T) = \frac{2\sqrt{2}\mu_B^2 m_p^{\frac{3}{2}} \sqrt{k_B T}}{\pi^2 \hbar^3} \times e^{E_{bB}/k_B T} \int_0^\infty \frac{\sqrt{y} e^y}{\left(e^{\left[\frac{(E)_{bB}}{k_B T} \right]} e^y + 1 \right)^2} dy \quad (24)$$

бу ерда $y = \varepsilon/k_B T$.

(24) ни (23) га қўйиш орқали қуйидагига эга бўламиз

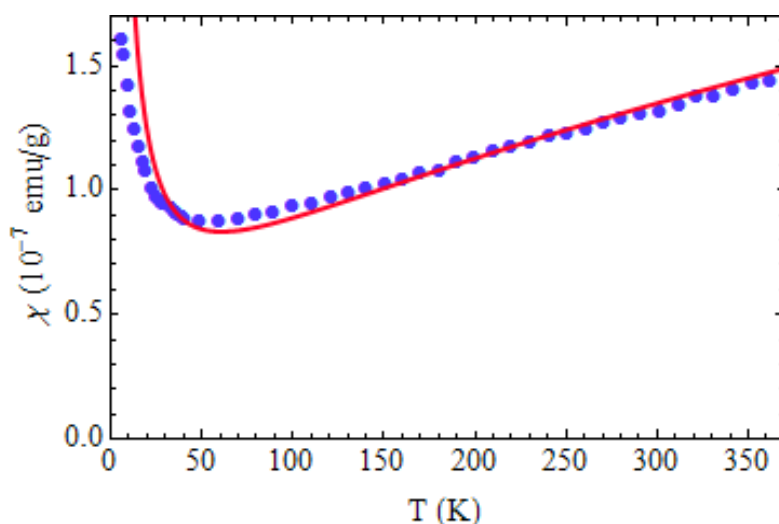
$$\chi_t(T) = \frac{\mu^2}{k_B T} \left[n_D + \frac{2\sqrt{2}\mu_B^2 (m_p k_B T)^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{E_{bB}}{k_B T}} \times \int_0^\infty \frac{\sqrt{y} e^y dy}{\left[e^{\left[\frac{(E)_{bB}}{k_B T} \right]} e^y + 1 \right]^2} \right]$$

$$\chi_t(T) = \frac{\mu^2}{k_B T} \left[n_D + \frac{2\sqrt{2}\mu_B^2 (m_p k_B T)^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{E_{bB}}{k_B T}} \times \int_0^\infty \frac{\sqrt{y} e^y dy}{\left[e^{\left[\frac{(E)_{bB}}{k_B T} \right]} e^y + 1 \right]^2} \right] \quad (25)$$

$\chi(T)$ нинг ҳисоблашдан олинган қийматини LSCO учун тажриба натижалари билан солиштиришда материалнинг магнит қабул қилувчанлигини

$\chi(T) = \chi_t(T) / \rho_M$ дан аниқлаймиз, бу ерда ρ_M материал зичлиги.

Назарий топилган $\chi(T)$ нинг қийматлари кучсиз легирланган LSCO купратдаги $\chi(T)$ нинг ҳароратга боғлиқлиги билан мос келиши кўрсатилди (4-расм).



4-расм. $x=0.05$ да параметрлари $m_p= 4.3m_e$, $n_D=0.145 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $\rho_M= 4.2 \text{ г/см}^3$, $E_{bB}=0.0018 \text{ эВ}$ бўлган кучсиз легирланган купрат $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ да χ нинг ҳароратга боғлиқлиги. Назарий натижалар (узлуксиз чизик) тажриба натижалари (нуқталар) билан таққосланган

Легирловчи киришмалар ва катта поляронларнинг зичликлари ортиши билан кам легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг металл ҳолатида киришмали ва поляронли ҳолатлар энергетик зоналар ҳосил қилади. Шунинг учун кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда ингичка киришма зонасидаги тешикли ток ташувчилар жуфтлашмаган ҳолда қолганда, поляронларнинг Ферми-газида (етарлича кенг полярон зонада) ўта ўтказувчанликка ўтиш ҳарорати T_c дан юқорида бўлган T^* характеристик ҳароратда катта поляронларнинг Купер жуфтлашиши мумкин бўлади. Шундай қилиб, кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда нуқсонлар марказлари, ингичка киришма зонасидаги жуфтлашмаган ток ташувчилар, термик ажралган катта биполяронлар ва поляронларнинг купер жуфтлари $\chi(T)$ га ҳисса қўшади

$$\chi(T) = \chi_D(T) + \chi_p^*(T) + \chi_I(T) + \chi_C(T) \quad \chi(T) = \chi_D(T) + \chi_p^*(T) + \chi_I(T) + \chi_C(T) \quad (26)$$

бу ерда

$$\chi_I(T) = -2\mu_B^2 \int_0^\infty \frac{D_I(\varepsilon) (\partial f_I(\varepsilon))}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \quad \chi_I(T) = -2\mu_B^2 \int_0^\infty \frac{D_I(\varepsilon) (\partial f_I(\varepsilon))}{\partial \varepsilon} d\varepsilon$$

киришма зонасидаги жуфтлашмаган ток ташувчилар ҳиссаси,

$$D_I(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2} m_I^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon}}{\pi^2 \hbar^3} \quad D_I(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2} m_I^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon}}{\pi^2 \hbar^3}$$

бу зонадаги ҳолатлар зичлиги,

$$f_I(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{(\varepsilon + E_{bB})}{k_B T}\right) + 1} \quad f_I(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{(\varepsilon + E_{bB})}{k_B T}\right) + 1}$$

киришма зонасидаги ток ташувчилар Ферми тақсимооти (бунда ток ташувчилар энергияси Ферми энергиясидан ε_{FI} ҳисобланган) ва m_I киришма

$$\chi_C(T) = -2\mu_B^2 \int_0^\infty \frac{D_C(\varepsilon) (\partial f_C(\varepsilon))}{\partial \varepsilon} d\varepsilon$$

зонасидаги ток ташувчилар массаси,

$$\chi_C(T) = -2\mu_B^2 \int_0^\infty \frac{D_C(\varepsilon) (\partial f_C(\varepsilon))}{\partial \varepsilon} d\varepsilon$$

термик ажралган Купер жуфтларининг полярон компонентлари, $D_C(\varepsilon) = \frac{D_p(\varepsilon)}{2} D_C(\varepsilon) = \frac{D_p(\varepsilon)}{2}$ БКШ-назариясида қараладиган битта спин йўналиши учун Ферми сатҳидаги поляронларнинг

$$f_C(\varepsilon) = \frac{1}{\left[\exp\left(\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^{*2}(T)}}{k_B T}\right) + 1 \right]}$$

ҳолатлар зичлиги,

$$f_C(\varepsilon) = \frac{1}{\left[\exp\left(\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^{*2}(T)}}{k_B T}\right) + 1 \right]}$$

Купер жуфтларининг уйғонган полярон компонентлари учун Ферми тақсимооти, $\Delta^*(T)$ поляронларнинг Купер жуфтларининг уйғонган спектридаги БКШ-симон энергетик тирқиш (ёки псевдотирқиш).

Оддий металллардаги ўта ўтказувчанликни ёритиш учун таклиф этилган оддий БКШ назарияси ЮХЎЎ-купратларнинг ўта ўтказувчанлик хоссаларини тушунтиришда яроқсиз бўлса ҳам, кам легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг нормал ҳолатидаги ғайриоддий хоссаларини ўрганишда поляронлар жуфтлашиши БКШ-симон назарияси қўлланилиши мумкин. Хусусан, БКШ-симон назария кам легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг нормал ҳолатидаги полярон ток ташувчиларнинг Купер жуфтлашишини ёритиб беради. БКШ-симон псевдотирқишнинг ҳароратга боғлиқлиги қуйидагича шаклда ёзилади

$$\Delta^*(T) \approx 1.76 k_B T^* \tanh \left[1.85 \sqrt{\frac{T^*}{T} - 1} \right] \quad (27)$$

Полярон Купер жуфтлари ҳосил бўлиш ҳароратидан қуйи ҳароратда $\chi_C(T)$ га ва поляронларнинг БКШ-симон жуфтлашишига асосий хиссани энергияси Ферми энергиясига ε_F яқин бўлган полярон ток ташувчилари беради. У ҳолда $\chi_C(T)$ нинг ифодасидаги $D_C(\varepsilon)$ ни $D_C(\varepsilon_F)$ билан алмаштириб, қуйидагига эга бўламиз

$$\chi_C(T) \approx 2\mu_B^2 D_C(\varepsilon_F) \left[1 + \exp\left(\frac{\Delta^*(T)}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (28)$$

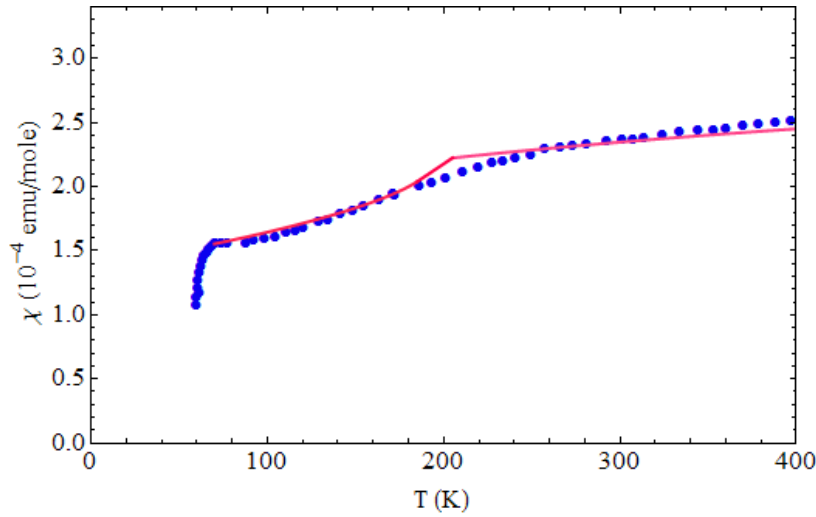
$\chi(T)$ нинг назарий ҳисобланган қийматини тажриба натижалари билан таққослаш учун $\chi(T)$ ни қуйидаги ифодадан топамиз:

$$\chi(T) = \frac{\chi_t(T)M}{\rho_M} = \mu_B^2 \left\{ \frac{n_D}{k_B T} + \frac{2\sqrt{2}m_I^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_{\varepsilon_{F1}}^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \frac{e^{(\varepsilon - \varepsilon_{F1(T)})/k_B T}}{[e^{(\varepsilon - \varepsilon_{F1(T)})/k_B T} + 1]^2} d\varepsilon \right. \\ \left. + \frac{2\sqrt{2}m_p^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \frac{e^{(\varepsilon + E_{bB})/k_B T}}{[e^{(\varepsilon + E_{bB})/k_B T} + 1]^2} d\varepsilon + \frac{2m_p^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{(1 + e^{\Delta^*(T)/k_B T})} \sqrt{\varepsilon_{F(T)}} \right\} \frac{M}{\rho_M} \\ + \frac{2\sqrt{2}m_p^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \frac{e^{(\varepsilon + E_{bB})/k_B T}}{[e^{(\varepsilon + E_{bB})/k_B T} + 1]^2} d\varepsilon + \frac{2m_p^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{(1 + e^{\Delta^*(T)/k_B T})} \sqrt{\varepsilon_{F(T)}} \left\} \frac{M}{\rho_M} \quad (29)$$

ҮВСО учун ҳисоблашларда зичлик $\rho_M = 6.4 \text{ г/см}^3$ ва моляр масса $M=670 \text{ г/моль}$ қийматлари олинган.

5-расмдан кўринадикки, кам легирланган ҮВСО да $\chi(T)$ нинг назарий ҳисобланган қийматлари тажрибада кузатилган $\chi(T)$ нинг ҳароратга боғлиқлиги билан мос келади.

Кам легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг нормал ҳолатида БКШ-симон тирқиш $\Delta^*(T)$ 5-расмдаги кам легирланган ЮХЎЎ-купрат ҮВСО учун кўрсатилгандек T^* дан пастда ҳосил бўлади. Юқори ҳароратларда $T \gg T^*$ бу ЮХЎЎ-материалларнинг магнит қабул қилувчанлиги $\chi(T)$ ҳароратга кучсиз боғлиқ. (29) га биноан, ҳарорат T^* гача камайганда $\chi(T)$ ҳам камайишни бошлайди ва T^* дан пастда ҳароратнинг камайиши ҳисобига $\chi(T)$ нинг камайиши кам легирланган ЮХЎЎ-купрат ҮВСО нинг уйғониш спектрида псевдотирқиш Δ^* ҳосил бўлишлиги сабабли тезлашади. Оддий металлларда полярон эффекти йўқлиги сабабли $\chi(T)$ ҳароратга боғлиқ эмас. Бунга қарама-қарши эса кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда T^* дан юқори ва пастки $\chi(T)$ нинг ҳароратга боғлиқлигида полярон эффектлари мавжуд бўлиб, ҳароратнинг T^* гача камайишида $\chi(T)$ секин камая бошлайди ва T^* дан пастда ҳароратнинг камайиши ҳисобига $\chi(T)$ нинг камайиши тезлашади (5-расм).



5-расм. $x=0.62$ да параметрлари $m_p=3m_e$, $m_l=4.7m_e$, $n_D=0.08 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $\epsilon_F=0.145 \text{ эВ}$, $\epsilon_{FI}=0.1 \text{ эВ}$, $\rho_M=5.6 \text{ г/см}^3$, $E_{bB}=0.007 \text{ эВ}$ бўлган кам легирланган купратлар $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ да χ ҳароратга боғлиқлиги. Назарий натижалар (узлуксиз чизиқ) тажриба натижалари (нуқталар) билан таққосланган

Оптимал легирланган ЮХЎЎ-купратларда ҳам кам легирланган ЮХЎЎ-купратлардаги каби нуқсонлар марказлари, етарлича кенг зонадаги тешикли ток ташувчилар ($\epsilon_{FI} \gg k_B T$), термик ажралган катта биполяронлар ва ажралган Купер жуфтларининг полярон компонентлари магнит қабул қилувчанга ҳисса қўшади ва тўлиқ ўлчамсиз магнит қабул қилувчанлик ифодаси куйидаги кўринишни олади

$$\frac{n_D}{k_B T} + \frac{2\sqrt{2}m_l^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \sqrt{\epsilon_{FI}(T)} + \frac{2\sqrt{2}m_p^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_0^\infty \sqrt{\epsilon} \frac{e^{(\epsilon+E_{bB})/k_B T}}{\left[e^{(\epsilon+E_{bB})/k_B T} + 1 \right]} \uparrow$$

$$\frac{n_D}{k_B T} + \frac{2\sqrt{2}m_l^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \sqrt{\epsilon_{FI}(T)} + \frac{2\sqrt{2}m_p^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_0^\infty \sqrt{\epsilon} \frac{e^{(\epsilon+E_{bB})/k_B T}}{\left[e^{(\epsilon+E_{bB})/k_B T} + 1 \right]} \uparrow$$

(30)

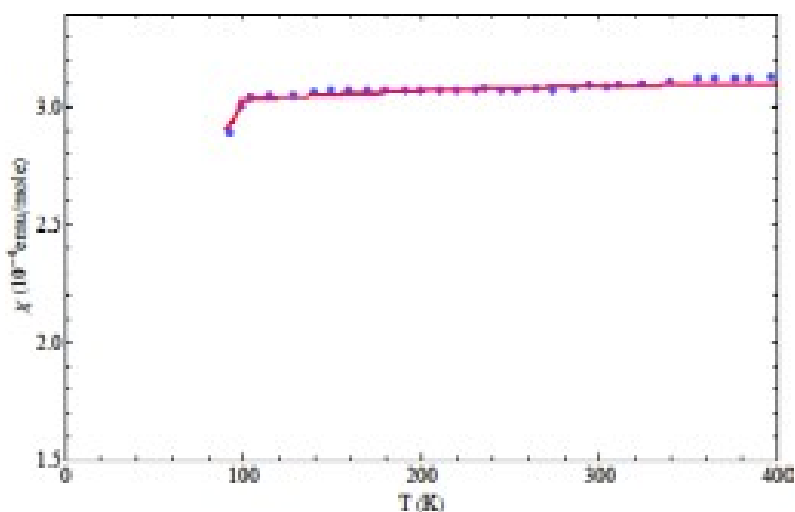
Энди магнит қабул қилувчанликнинг тажриба натижалари билан таққослаш ифодаси ёзамиз

$$\chi(T) = \frac{\chi_t(T)M}{\rho_M} \chi(T) = \frac{\chi_t(T)M}{\rho_M}$$

(31)

Бу ҳолда (31) формула билан ҳисобланган магнит қабул қилувчанлик ҳароратга боғлиқ эмас (6-расм), бу тажрибада оптимал легирланган ЮХЎЎ-купратлар YBCO да кузатилган. Юқорида келтирилган натижалардан кўринадики, биргаликдаги диэлектрик ва металл фазалар кучсиз легирланган

купратларнинг, кам ва оптимал легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг магнит қабул қилувчанлигининг ҳароратга боғлиқлигида намоён бўлади.



6- расм. $x=0.97$ да параметрлари $m_p=2.1m_e$, $m_l= 4.1m_e$, $n_D=0.05\cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $\varepsilon_F=0.18 \text{ эВ}$, $\varepsilon_{FI}=0.148 \text{ эВ}$, $\rho_M= 5.9 \text{ г/см}^3$, $E_{bB}=0.0001 \text{ эВ}$ бўлган оптимал легирланган купратлар $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ да χ нинг ҳароратга боғлиқлиги. Назарий натижалар (узлуксиз чизик) тажриба натижалари (нуқталар) билан таққосланган

Биз яна ЮХЎЎ-купратларнинг CuO_2 қатламлари орасидаги катта биполяронларнинг термик ажралишидаги 3D полярон ҳаракатини қараб чиқдик. Легирланган купратларда локаллашган катта биполяронлар CuO_2 қатламлари орасида тешикли ток ташувчиларга тўйинмаган соҳаларда ҳосил бўлади ва с-ўқ бўйлаб поляронлар ҳаракати қўзғалмас биполяронларнинг алоҳида поляронларга термик ажралишида содир бўлади, улар кейинчалик с-ўқ бўйлаб бир вазиятдан бошқасига сакраш йўли билан ҳаракатланади. Бунда катта биполяроннинг полярон компонентларининг бир потенциал ўрадан яқинидаги бошқа потенциал ўрага сакраши учун активациявий энергия E_a (потенциал тўсиқ баландлиги) ушбу катта биполяроннинг боғланиш энергиясига E_{bB} тенг бўлади. Бир ўлчамли полярон ҳаракатида уларнинг с-ўқи бўйлаб сакраб ҳаракатланишидаги поляронларнинг дрейф ҳаракатчанлиги қуйидаги тенгламадан аниқланади

$$\mu_h(T) = \frac{ea_h^2\omega_0}{2k_B T} \exp\left[-\frac{E_{bB}}{k_B T}\right] \mu_h(T) = \frac{ea_h^2\omega_0}{2k_B T} \exp\left[-\frac{E_{bB}}{k_B T}\right], \quad (32)$$

T_c дан юқори ҳароратлар учун с-ўқи бўйлаб поляронларнинг сакраш ўтказувчанлигини қуйидаги ифодадан топамиз

$$\sigma_c(T > T_c) = n_h e \mu_n(T) = \frac{n_h e^2 a_h^2 \omega_0}{2k_B T} \exp\left[-\frac{E_{bB}}{k_B T}\right]$$

$$\sigma_c(T > T_c) = n_h e \mu_n(T) = \frac{n_h e^2 a_h^2 \omega_0}{2k_B T} \exp\left[-\frac{E_{bB}}{k_B T}\right] \quad (33)$$

бу ерда n_h ЮХЎЎ-купратларнинг CuO_2 қатламлари орасидаги ҳаракати сакраш характериға эға поляронлар концентрацияси.

Шундай қилиб, ЮХЎЎ-купратларнинг с-ўқи солиштирма қаршилиги қуйидагича аниқланади

$$\rho_c(T > T_c) = \frac{1}{\sigma_c(T > T_c)} = \frac{2k_B T}{n_h e^2 a_h^2 \omega_0} \exp\left[\frac{E_{bB}}{k_B T}\right]$$

$$\rho_c(T > T_c) = \frac{1}{\sigma_c(T > T_c)} = \frac{2k_B T}{n_h e^2 a_h^2 \omega_0} \exp\left[\frac{E_{bB}}{k_B T}\right] \quad (34)$$

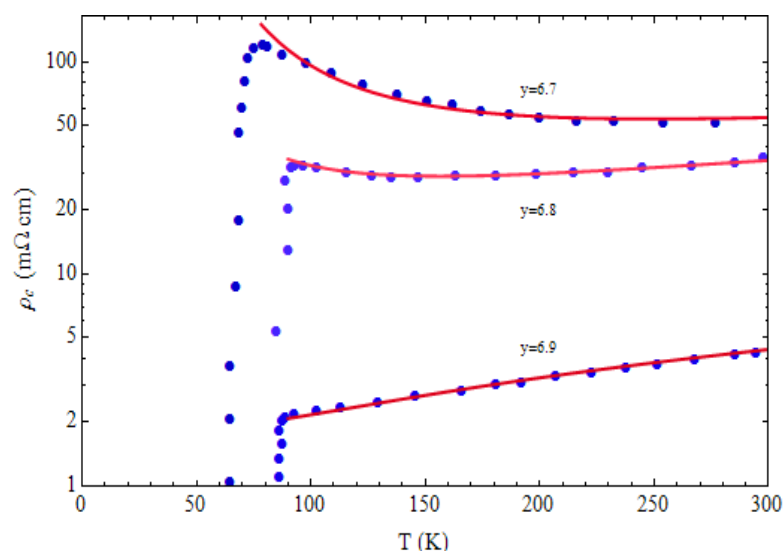
Легирланган ЮХЎЎ-материалларнинг қолдиқ қаршилигини ρ_0 ҳисобға олган ҳолда, (34) ифодани шакл ўзгартирамиз

$$\rho_c(T) = \rho_0 + \frac{2k_B T}{n_h e^2 a_h^2 \omega_0} \exp\left[\frac{E_{bB}}{k_B T}\right] \rho_c(T) = \rho_0 + \frac{2k_B T}{n_h e^2 a_h^2 \omega_0} \exp\left[\frac{E_{bB}}{k_B T}\right] \quad (35)$$

(35) дан кўринадики, легирланган ЮХЎЎ-материалларнинг солиштирма

қаршилигини $\exp\left[\frac{E_{bB}}{k_B T}\right] \exp\left[\frac{E_{bB}}{k_B T}\right]$ га мутаносиб бўлади ва с-ўқи солиштирма қаршиликнинг ҳароратға диэлектрик боғлиқлиги бу ўқ бўйлаб катта поляронларнинг кўчиши активацион характериға эға, уларнинг сакраш транспортини термо-фаоллаштирувчи концепция $\rho_c(T)$ бўйича тажриба натижаларини тушунтириши мумкин.

Бизнинг $\rho_c(T)$ бўйича назарий натижаларимиз тажрибада ЮХЎЎ-купратлар YBCO учун турли легирлаш даражаларида олинган $\rho_c(T)$ билан таққосланди (7-расм). Расмдан кўринадики кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда $\rho_c(T)$ нинг диэлектрик кўриниш аста-секин оптимал легирлаш режимида катта биполяронларнинг боғланиш энергияси камайиши билан металл кўринишға $\rho_c(T)$ ўзгаради.



$YBa_2Cu_3O_y$ учун $y=6.7, 6.8$ ва 6.9 ларда $\rho_c(T)$ ни (35) ифода ёрдамида ва турли параметрлар билан аниқлаш ($y=6.7, 6.8$ и 6.9 учун мос равишда қуйидаги параметрлардан фойдаланилди $\rho_0 = 0.05 \text{ м}\Omega\text{см}$, $a_h = 11.5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $\omega_0 = 5.8 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $n_i = 1.77 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $E_{bb} = 0.0215 \text{ эВ}$; $\rho_0 = 0.03 \text{ м}\Omega\text{см}$, $a_h = 11.5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $\omega_0 = 6.0 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $n_i = 2.0 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $E_{bb} = 0.0135 \text{ эВ}$ и $\rho_0 = 0.02 \text{ м}\Omega\text{см}$, $a_h = 11.5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $\omega_0 = 17.0 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $n_i = 7.35 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $E_{bb} = 0.005 \text{ эВ}$).

7-расм. $YBa_2Cu_3O_y$ учун турли легирлаш даражаларида $\rho_c(T)$ бўйича олинган тажриба натижалари (нуқталар) ва (35) тенглама билан мослиги (узлуксиз чизиқлар)

Юқорида келтирилган натижалар металл-диэлектрик ўтишлар нафақат кучсиз легирланган купратларда, балки кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда ҳам рўй бериши мумкинлигини кўрсатади. Бунинг натижасида ЮХЎЎ-купратларнинг диэлектрик, металл ва ўта ўтказувчан фазалари уларни легирлашнинг кенг соҳасида $x \approx 0.05$ дан то $x \approx 0.14$ гача мавжуд бўлади. Бунда мавжуд диэлектрик ва ўта ўтказувчан фазаларнинг рақобатдошлик эффектлари кам легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг ($x \approx 0.05-0.14$) юқори ҳароратли ўта ўтказувчанлигига сезиларли таъсир кўрсатади. Маълумки, кам легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг ўта ўтказувчанликка ўтишнинг критик ҳарорати оптимал легирлаш режимида $x \approx 0.15-0.16$ максимал қийматга эришади. Бизнинг фикримизча бу оптимал легирланган ЮХЎЎ-купратларда барча диэлектрик соҳалар $T > T_c$ да металл ҳолатга ўтиши билан ёки $T < T_c$ да ўта ўтказувчан ҳолатга ўтиши билан, яъни оптимал легирлаш режимида диэлектрик фазанинг йўқлиги билан боғлиқ. Бироқ, $x < 0.14$ да ЮХЎЎ-купратлар кристалл панжарасининг баъзи жойларида ингичка йўлак кўринишидаги диэлектрик фаза ҳосил бўлади (3d-расм) ва легирлаш даражасининг камайиши билан диэлектрик соҳалар ортиб боради ва ўта ўтказувчан соҳалар камая бошлайди. Шунинг учун, кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда $x \approx 0.13$ диэлектрик ва ўта ўтказувчан соҳаларнинг (фазаларнинг) биргаликда мавжудлиги ўта ўтказувчанликнинг сўнишига (T_c камая бошлайди) олиб келади. Бунда кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда $x \leq 1/8$ да ўта ўтказувчанликнинг сезиларли сўниши кам легирланган ЮХЎЎ-материалларнинг ўта ўтказувчанлик ҳажм улушининг камайиши ҳисобидан

диэлектрик ҳажм улушининг сезиларли ортиши ҳисобига бўлади. Ҳақиқатдан ҳам тажриба натижалари бизнинг назарий олдиндан айтганларимизни тасдиқлайди ва кам легирланган ЮХЎЎ-купратлардаги ўта ўтказувчанлик $x \leq 1/8$ да динамик (металл) йўлаклар/страйпларнинг бир қисми статик (яъни, диэлектрик) бўлиб қолишини кўрсатади. Оптимал легирланган ЮХЎЎ-купратларда T_c нинг максимал қиймати билан бутун ҳажм ўта ўтказувчан бўлиши билан диэлектрик фазалар йўқолади (Зе-расм).

ХУЛОСА

“Легирланган юқори ҳароратли ўта ўтказувчан купратларда Мотт ва янги металл-диэлектрик ўтишлар” мавзусидаги докторлик диссертацияси бўйича олиб борилган тадқиқотлар натижасида қуйидаги хулосалар келтирилади:

1. Легирланган купратли бирикмаларда тешикли ток ташувчиларнинг асосий ҳолати энергияси континуал модел ва адиабатик яқинлашишда ҳисобланди ва легирланмаган купратларнинг диэлектрик тирқишидаги (яъни, таъқиқланган зонасида) водородсимон киришмаларнинг, катта полярон ва биполяронларнинг энергетик сатҳлари аниқланди.
2. Купратли бирикмаларнинг таъқиқланган зонаси ичкарасида локаллашган киришмали, поляронли ва биполяронли ҳолатларнинг ҳосил бўлиши кўпгина тажрибаларда кузатиладиган тешикли легирланган купратларнинг янги қуйи энергетик электрон тузилишларига олиб келиши кўрсатилди.
3. Тешикли легирланган купратларда манфий деформацион потенциалга ва асосий панжара ионлари радиусига солиштирганда катта ион радиусли киришмалар водородсимон киришмали (акцепторли) марказлар ҳосил қилиши кўрсатилди. Бу киришмали марказларнинг тартибланиш жараёни Хаббард юқори зонаси ва кислород валент зонаси оралиғида ётувчи уларнинг турли ўтапанжаралари ва ингичка энергетик зоналар ҳосил бўлишига олиб келади.
4. ЮХЎЎ-купратларнинг ингичка киришма зонасидаги кучли электрон корреляция натижасидаги кучсиз легирланган купратларда легирлаш даражаси $x < x_c = 0.02 - 0.03$ да рўй берадиган, иккинчиси ЮХЎЎ-купратларнинг кучсиз легирлашдан оптимал легирлашгача бўлган кенг легирлаш оралиғида кучли электрон-фонон таъсирлашишлар (полярон эффекти) натижасида рўй берадиган Мотт ва янги металл-диэлектрик ўтишларнинг адекват миқдорий назарияси ривожлантирилган.
5. Водородсимон атом ёки киришма марказидаги иккита тешикли ток ташувчилар орасидаги Кулон итаришиш энергиясини аниқлаш орқали Мотт металл-диэлектрик ўтишларнинг янги миқдорий мезонлари олинди, бу мезонлар легирланмаган ва легирланган қаттиқ жисмларда кучли электрон корреляция туфайли содир бўладиган металл-диэлектрик ўтишлар имкониятини ўрганишда қўлланилди.

6. Легирланган купратларда водородсимон киришма марказлари ва ингичка киришма зоналарида кучли электрон корреляция мавжуд бўлган шароитда Мотт металл-диэлектрик ўтишларнинг қўлланилиш чегаралари аниқланди.
7. Купратларни легирлашдан кейин ҳосил бўладиган квазиэркин тешиклар панжарани ўраб турган ионлар билан кучли ўзаро таъсирлашиб, панжаранинг деформацион соҳаларини ва тортувчи потенциал ўралар ҳосил қилиб, бу потенциал ўралар орқали локаллашган поляронли ҳолатлар ҳосил бўлиш билан ушлаб турилади. Бунда катта поляронлар водородсимон киришмалар марказлари каби купратларнинг таъқиқланган зонасида ингичка полярон зоналар ҳосил бўлишига олиб келадиган турли хил ўтапанжаралар ҳосил қилади.
8. Легирланган кутбли материаллардаги металл-диэлектрик ўтишларнинг янги универсал мезони аниқланди, бу материаллардаги кучли тешикли ток ташувчи-кристалл панжара ўзаро таъсирлашишларидан ҳосил бўладиган металл-диэлектрик ўтишлар Мотт ва Андерсон металл-диэлектрик ўтишларидан фарқ қилади. Тешикли легирланган ЮХЎЎ-купратларда бу янги металл-диэлектрик ўтишлар ва диэлектрик, металл ва ўта ўтказувчан фазаларнинг наноўлчамли бўлиниши уларнинг турли хил легирлаш режимларида, яъни кучсиз легирлаш ($x=0.02-0.05$) режимидан оптимал легирлаш ($x \geq 0.15$) режимигача оралиқларда содир булади.
9. Легирланган купратларда магнит қабул қилувчанликнинг $\chi(T)$ ҳароратга боғлиқлиги учта турли: 1) кучсиз легирланган режимда $x \leq 0.05$ диэлектрик ҳолат; 2) кам легирланган режимда ($0.05 < x \leq 0.13$) ғайриоддий металл ҳолат; ва 3) оптимал легирланган режимда ($x \geq 0.15$) оддий металл ҳолатларда бўлишлиги аниқланди.
10. Кам легирланган ЮХЎЎ-купратларнинг T_c дан юқори ҳароратларда уларнинг s -ўқи бўйлаб солиштирма электр қаршилигининг ҳароратга боғлиқлигида $\rho_c(T)$ металл-диэлектрик ўтишлар кузатилиши ва CuO_2 қатламларда катта локаллашган биполяронларнинг алоҳида поляронларга термик ажралиши билан боғлиқлиги $\rho_c(T)$ нинг диэлектрик ҳолати кейинчалик катта поляронларнинг бу материалларнинг s -ўқи бўйлаб сакраб ҳаракатланишида CuO_2 қатламлар орасида ҳосил бўладиган катта поляронларнинг боғланиш энергияси нолга тенг бўлганда оптимал легирланган ЮХЎЎ-купратларда босқичма-босқич металл ҳолатга ўзгариши кўрсатилди.
11. Кам легирланган ЮХЎЎ-купратларда ўта ўтказувчанликнинг сўниши (яъни, T_c нинг камайиши) рақобатдош диэлектрик ва ўта ўтказувчан фазаларнинг биргалиқда мавжудлигидан ва ўта ўтказувчан соҳалар улушининг камайиши ҳисобига диэлектрик соҳалар улушининг ортишидан, бунда T_c нинг камайиши билан кам легирланган ЮХЎЎ-купрат намуналарида ўта ўтказувчанлик ҳажмининг улуши камайишидан эканлиги ўрнатилди.

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

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

КУРБАНОВ УЛУГБЕК ТАЖИБАЕВИЧ

**МОТТОВСКИЕ И НОВЫЕ МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК ПЕРЕХОДЫ
В ЛЕГИРОВАННЫХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ
СВЕРХПРОВОДЯЩИХ КУПРАТАХ**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ
диссертации доктора (DSc) физико-математических наук**

Ташкент–2020

Тема диссертации доктора (DSc) физико-математических наук зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № В2017.2.DSc/FM60.

Диссертация выполнена в Институте ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан.

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

Научный консультант:	Джуманов Сафарали доктор физико-математических наук, профессор
Официальные оппоненты:	Тураев Назар Юлдашевич доктор физико-математических наук, профессор академик Академии наук Республики Узбекистан
	Имамов Эркин Зуннунович доктор физико-математических наук, профессор
	Нуритдинов Иззатилло доктор физико-математических наук, профессор
Ведущая организация:	Ташкентский Государственный технический университет имени Ислама Каримова

Защита диссертации состоится “___” _____ 2020 г. в ___ часов на заседании Научного совета DSc.02/30.12.2019.FM/T.33.01 при Институте ядерной физики (Адрес: 100124, г. Ташкент, пос. Улугбек, Институт ядерной физики; тел.: (+99871) 289-31-41, факс (+99871) 289-36-65, e-mail: info@inp.uz).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Института ядерной физики (регистрирована за № _____). (Адрес: 100124, г. Ташкент, пос.Улугбек, ИЯФ; тел.: (+99871) 289-31-19).

Автореферат диссертации разослан “___” _____ 2020г.
(Реестр протокола рассылки № ___ от “___” _____ 2020 г.)

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

С.Б. Игамов
ученый секретарь Научного совета по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., старший научный сотрудник

И. Нуритдинов
председатель научного семинара при Научном совете по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

ВВЕДЕНИЕ (аннотация докторской диссертации (DSc))

Актуальность и востребованность темы диссертации. В настоящее время изучение новых электронных свойств дырочно-легированных высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП)-купратов, зависящих от характера локализации и делокализации дырочных носителей тока и металл-диэлектрик переходов, является одной из наиболее важных задач современной физики конденсированного состояния. Проведенные экспериментальные исследования показали, что электронные свойства недолегированных и даже оптимально легированных ВТСП-купратов существенно отличаются от электронных свойств обычных диэлектриков, металлов и сверхпроводников. Необычным для этих материалов является отличительное поведение их транспортных и магнитных свойств и критических температур сверхпроводящего перехода T_c , без ясного понимания которых трудно достичь полного понимания их нормальных и сверхпроводящих свойств.

В настоящее время выявлено, что необычные нормальные и сверхпроводящие свойства ВТСП-купратов связаны с явлениями локализации дырочных носителей тока, приводящими к металл-диэлектрик переходам, образованию диэлектрических и металлических/сверхпроводящих полос (фаз), наномасштабным разделением этих фаз и сосуществованию диэлектрических и металлических/сверхпроводящих фаз. Несмотря на известные достижения в изучении процессов локализации носителей тока, моттовских и других типов металл-диэлектрик переходов в легированных полупроводниках и ВТСП-материалах, до сих пор не существуют последовательные количественные теории этих явлений в легированных ВТСП-материалах. Поэтому детальные исследования механизмов локализации носителей тока, моттовских и других возможных типов металл-диэлектрик переходов в дырочно-легированных ВТСП-купратах крайне актуальны и весьма важны для понимания их необычных диэлектрических, металлических и сверхпроводящих свойств.

В Республике Узбекистан большое внимание уделяется развитию полупроводникового и сверхпроводникового материаловедения. При этом особое внимание уделяется определению природы локализованных дырочных носителей тока и возможных механизмов металл-диэлектрик переходов и наномасштабного разделения фаз в легированных ВТСП-купратах. Направления этих фундаментальных исследований, имеющих большое значение для развития науки нашей страны и её дальнейшего практического применения, отражены в Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан на 2017–2021 гг.²

² Указ Президента Республики Узбекистан № УП-4947 «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан» от 07 февраля 2017 г. // Официальное издание Министерства юстиции Республики Узбекистан. – Ташкент: Адолат, 2017.

Данное диссертационное исследование в определенной степени выполняет задачи, предусмотренные в Указах Президента Республики Узбекистан № УП-4512 от 1 марта 2013 года «О мерах по дальнейшему развитию альтернативных источников энергии», № УП-4947 от 7 февраля 2017 года «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан на 2017–2021-гг», в Постановлении Президента Республики Узбекистан № ПП-2789 от 17 февраля 2017 года «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности», а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики Узбекистан. Диссертационная работа выполнена в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий в Республике Узбекистан II. «Энергетика, энерго- и ресурсосбережение».

Обзор зарубежных научных исследований по теме диссертации. Научные исследования в области физики диэлектриков и высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) проводятся в научных центрах, институтах и университетах ведущих стран, в том числе в Лейденском университете (Нидерланды), Стенфордском университете (США), Аргоннской национальной лаборатории (США), Кембриджском университете (Англия), Токийском университете (Япония), Цюрихском университете (Швейцария), Лаборатории нейтронного рассеяния (Швейцария), Университете Хоккайдо (Япония), Принстонском университете (США), Макмастерском университете (Канада), Университете имени Жозефа Фурье (Франция), Брукхейвенской национальной лаборатории (США), Институте физики твердого тела имени Макса Планка (Германия), Лос-Аламосской национальной лаборатории (США), Китайском университете науки и технологии (Китай), Массачусетском технологическом институте (США), Институте теоретической физики имени Ландау (Россия), Физическом институте имени Лебедева (Россия), Институте физики твердого тела (Россия), Римском университете (Италия), Антверпенском университете (Бельгия), Университете Лафборо (Англия), Неапольском университете (Италия), Институте теоретической физики (Китай), Токийском научном университете (Япония), Физико-техническом институте низких температур им. Б.И. Веркина (Украина), Институте физики (Эстония), Актюбинском государственном университете (Казахстан), Институте физико-технических проблем и материаловедения (Киргизия).

В результате проводимых в мире исследований электронных свойств дырочно-легированных купратов получен ряд интересных научных результатов, в частности предложены идея о сегрегации и разделении электронных фаз в ВТСП-материалах (Институт теоретической физики имени Ландау, Россия); различные теоретические модели разделения фаз в виде чередующихся полос упорядоченных спинов и носителей зарядов в недолегированных ВТСП-купратах (Лейденский университет, Нидерланды;

Брукхейвенская национальная лаборатория, США; Римский университет, Италия); обнаружены полосатые фазы упорядоченных спинов и носителей зарядов в недолегированных ВТСП-купратах (Брукхейвенская национальная лаборатория, США); определены характерные диэлектрические поведения удельного сопротивления ВТСП-купратов вдоль CuO_2 слоев (т. е. *ab*-плоскости) и вдоль оси *c*, обусловленные явлением локализации носителей тока в недолегированных и оптимально легированных режимах, а также определены тенденции постепенного изменения их диэлектрического поведения, связанные с диэлектрик-металл переходами и делокализацией носителей тока (Лос-Аламосская национальная лаборатория, США; Токийский научный университет, Япония; Институт физики твердого тела, Россия; Международный технологический центр сверхпроводимости, Япония); получены аналогичные и довольно интересные экспериментальные данные, согласно которым температурные зависимости магнитной восприимчивости, свидетельствующие также о металл-диэлектрик переходах в недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратах, оказались неожиданными и необычными по сравнению с магнитной восприимчивостью обычных металлов (Государственный университет Айовы, США; Университет Хоккайдо, Япония; Кембриджский университет, Англия); получена ценная информация о подавлении сверхпроводимости и сосуществовании сверхпроводимости и эффектах локализации носителей тока при переходе от оптимально легированного к недолегированному режиму в ВТСП-купратах (Брукхейвенская национальная лаборатория, США; Университет Тохоку, Япония).

В настоящее время в мире ведутся экспериментальные и теоретические исследования по определению взаимосвязи между различными электронными процессами в дырочно-легированных ВТСП-купратах. В частности, решаются следующие ключевые проблемы ВТСП-материалов: определение низкоэнергетической электронной структуры легированных купратов и истинная природа носителей тока, введенных в них путем дырочного легирования, выяснение механизмов локализации и делокализации дырочных носителей тока, ответственных за металл-диэлектрик переходы, разделение диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в слаболегированных и недолегированных купратах, выяснение механизмов образования различных псевдощелей в этих материалах, определение возможных эффектов локализации носителей тока, металл-диэлектрик переходов и наномасштабного разделения фаз, различных псевдощелей и других электронных процессов на нормальные и сверхпроводящие свойства дырочно-легированных ВТСП-купратов.

Степень изученности проблемы. Вопросы о локализации носителей тока и металл-диэлектрик переходов в различных классах твердых тел исследовались многими известными учеными, в том числе российскими (Л.Д. Ландау, С.И. Пекар), германскими (Г. Фрелих), английскими (Р. Пайерлс, Н.Ф. Мотт, А. Вильсон, Дж. Хаббард, Д.М. Эглес), японскими (Ю. Тойазова), американскими (Р. Фейнман, Т. Холстейн, Ф.В. Андерсон, Ж.

Девреес, Д. Эмин) учеными в течение многих десятилетий. Эти проблемы восходят еще к 1933 году, когда Ландау, объясняя свойства F-центров (анионная вакансия с захваченным электроном) в щелочно-галоидных кристаллах, выдвинул идею об автолокализации электрона и к 1931–1958 годам, когда А. Вильсон, Н.Ф. Мотт, Ф. Вигнер, Р. Пайерлс и Ф.В. Андерсон пытались объяснить изменение делокализованного состояния электронов в локализованное, выдвинули идеи о металл-диэлектрик переходах при перекрывании полностью заполненной валентной зоны с вышележащей незаполненной зоной (переход Вильсона), сильной электронной корреляции (т. е. при кулоновском отталкивании двух электронов, находящихся в одном и том же атоме или ионе кристаллической решетке) (переход Мотта), кристаллизации электронного газа (переход Вигнера), искажении одномерной кристаллической решетки и удвоении периода решетки (переход Пайерлса) и неупорядоченности решетки (переход Андерсона).

Последующие годы эти ранние идеи были использованы и развиты при изучении явлений локализации и делокации носителей тока и металл-диэлектрик переходов в различных классах твердых тел, в частности в оксидных материалах и легированных полупроводниках. При этом идеи моттовского и андерсоновского металл-диэлектрик переходов получили значительное развитие в исследованиях, проводимых за рубежом в области физики оксидных диэлектриков и легированных полупроводников (Дж. Хаббард, О. Маделунг, М.И. Клиггер, Дж.Р. Куллен, Э.Р. Каллен, Дж. Канамор, Я. Заанен, Г.А. Савацкий, Дж.В. Аллен, Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос, Г. Котлиар, В. Добросавлжевик). После открытия новых легированных медно-оксидных (купратных) ВТСП проводятся исследования по проблемам локализации носителей тока и металл-диэлектрик переходов в этих сложных материалах с применением различных методов и подходов (М. Имада, П. Клемерал, Дж. Финк, А.Н. Лавров, В.Ф. Гантмахер, Г.С. Боебингер, Я. Эндо, С. Кастэллени, П.А. Магетты, Ж.Б. Су, Ю Ли, С. Оно).

Несмотря на наличие теоретических исследований электронных свойств дырочно-легированных ВТСП-купратов, недостаточно выяснены механизмы локализации и делокации дырочных носителей тока и возможных металл-диэлектрик переходов в этих материалах, так как вопросы об адекватных количественных критериях моттовского и других металл-диэлектрик переходов оставались неразрешенными. В частности, не были определены пределы применимости критериев моттовского и других возможных металл-диэлектрик переходов в легированных купратах и еще не построена теория этих явлений. В теоретических работах по изучению явлений локализации носителей тока и металл-диэлектрик переходов в ВТСП-материалах оставалась неизученной важная роль необычных электрон-фононных взаимодействий и поляронных эффектов.

Связь темы диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертация. Диссертационная работа выполнена в рамках научно-исследовательских проектов Института ядерной физики по темам

ФА-Ф2-Ф075+Ф070 «Исследования специфических электрических, тепловых и механических свойств реакторных материалов и высокотемпературных сверхпроводников» (2007–2011); Ф2-ФА-Ф120 «Электронные свойства и радиационная модификация низкоразмерных высокотемпературных сверхпроводников, полупроводниковых гетероструктур, металлов и их оксидов» (2012–2016); ОТ-Ф2-15 «Теоретические исследования новых сверхпроводящих и сверхтекучих свойств высокотемпературных сверхпроводников и родственных конденсированных систем» (2017–2021).

Целью исследования является определение механизмов локализации носителей тока, моттовского и новых металл-диэлектрик переходов, наномасштабных разделений фаз в легированных ВТСП-купратах.

Задачи исследования:

исследовать механизмы локализации дырочных носителей возле примесей и в деформируемой кристаллической решетке слаболегированных купратов;

определить возможности образования водородоподобных локализованных состояний и поляронных состояний, появляющихся внутри энергетической щели переноса заряда (т.е. в запрещенной зоне) купратов, которые называются локализованными внутрищелевыми состояниями;

исследовать специфические механизмы моттовского металл-диэлектрик переходов, реализуемых в дырочно-легированных ВТСП-купратах;

изучить новые механизмы металл-диэлектрик переходов, вызванные необычными носитель-фононными взаимодействиями и реализуемые в различно легированных купратах;

выяснить механизмы сегрегации дырочных носителей заряда в легированных ВТСП-купратах, приводящих к образованию насыщенных и обедненных носителями слоев при неоднородном пространственном распределении носителей тока, локализованных на примесных центрах и в деформируемой решетке;

определить возможности проявления металл-диэлектрик переходов и наномасштабных разделений диэлектрических и металлических фаз в необычных поведении магнитной восприимчивости и электрического сопротивления выше T_c и в механизмах высокотемпературной сверхпроводимости недолегированных купратов.

Объектом исследования являются слабо легированные купраты $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ (LBCO), $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO) и $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO), недолегированные и оптимально легированные ВТСП-купраты LBCO, LSCO и YBCO.

Предметом исследования являются процессы локализации и делокализации дырочных носителей тока, моттовских и новых металл-диэлектрик переходов, наномасштабного разделения диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в слабо легированных купратах, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратах.

Методы исследований. Вариационные методы, использование адиабатического приближения и континуальной модели собственной и

несобственной автолокализации носителей, метод сильной связи, компьютерная графика (Mathematica).

Научная новизна исследования заключается в следующем:

определены энергии основных состояний дырок в легированных купратных материалах и энергетические уровни водородоподобных примесей, больших поляронов и биполяронов, образующихся в запрещенной зоне нелегированных купратов;

развита адекватная количественная теория моттовских металл-диэлектрик переходов в слабо легированных купратах, вызванных сильной корреляцией носителей в узкой примесной зоне ВТСП-купратов;

впервые предложены механизмы новых металл-диэлектрик переходов, вызванных сильным дырочно-фононным взаимодействием в легированных ВТСП-купратах и получены критерии таких металл-диэлектрик переходов;

развита детальная количественная теория новых металл-диэлектрик переходов в дырочно-легированных ВТСП-купратах, вызванных сильным дырочно-фононным взаимодействием и показаны возможности их реализации в слаболегированных купратах, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратах;

выяснены микроскопические механизмы наномасштабного разделения диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в слабо легированных купратах, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратах;

впервые показана возможность сосуществования конкурирующих диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в легированных купратных материалах, являющаяся истинной причиной подавления сверхпроводимости в ВТСП-купратах при переходе от оптимально легированного в недолегированный режим;

впервые получены аналитические выражения, адекватно описывающие температурные зависимости магнитной восприимчивости слабо легированных купратов, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратов и объясняющие причины происхождения различных аномалий температурных зависимостей магнитной восприимчивости;

показана возможность проявления металл-диэлектрик переходов и различных псевдощелей в температурных зависимостях магнитной восприимчивости и электрического сопротивления слабо легированных купратов, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратов.

Практические результаты исследования заключаются в следующем:

разработаны теории моттовского и новых металл-диэлектрик переходов в легированных материалах;

получены формулы для критериев новых металл-диэлектрик переходов в легированных оксидных полупроводниках и диэлектриках;

получены новые формулы для определения магнитной восприимчивости слабо легированных, недолегированных и оптимально легированных оксидных полупроводников и диэлектриков.

Достоверность результатов исследования подтверждается применением апробированных математических методов и теоретических подходов, таких как вариационные методы и методы сильной связи, континуальная модель твердого тела для описания автолокализации носителей возле примесей и в деформируемой решетке, модель Мотта–Хаббарда, позволяющая описать эффекты сильной электронной корреляции в узких примесных зонах, а также совпадением полученных результатов с существующими экспериментальными данными.

Научная и практическая значимость результатов исследования. Научная значимость результатов исследования заключается в том, что они способствуют расширению физических представлений о локализации и делокализации дырочных носителей тока, металл-диэлектрик переходов и наномасштабных разделений электронных фаз.

Практическая значимость результатов исследования заключается в том, что развитые теории моттовских и новых металл-диэлектрик переходов в легированных ВТСП-материалах могут быть использованы в разработке физических основ полупроводникового и сверхпроводникового материаловедения и позволяют предсказать возможные пути создания оксидных ВТСП материалов с улучшенными электронными свойствами, в частности, с высокими критическими температурами сверхпроводящего перехода T_c .

Внедрение результатов исследования. На основе полученных научных результатов по исследованию моттовских и новых металл-диэлектрик переходов в легированных высокотемпературных сверхпроводящих купратах:

результаты по определению энергии основных состояний дырок в легированных купратных материалах и энергетических уровней водородоподобных примесей, больших поляронов и биполяронов были использованы в рамках целевой научно-технической Программы «Развитие технологий водородной энергетики» (Письмо Евразийского национального университета им. Л.Н Гумилева № 03-02-12/704 от 14.02.2019). Использование новых научных результатов позволило улучшить технические характеристики функциональных термоэлектрических и нанокompозитных материалов для технологии водородной энергетики при различных условиях;

разработанные адекватные количественные теории моттовских и новых металл-диэлектрик переходов в слабо легированных купратах и ВТСП-купратах в широком интервале легирования были использованы при выполнении научно-исследовательских работ в рамках государственного заказа по бюджетной программе по темам № 0113РК00953 «Разработка технологии управления физическими свойствами щелочногалоидных и сверхпроводящих материалов при понижении симметрии решетки» (2012-2017) и № 0115РК01111 «Технология управления механизмом трансформации энергии ионизирующей радиации в щелочногалоидных кристаллах-сцинтилляторах» (2012-2017) (Письмо Актюбинского регионального государственного университета им. К. Жубанова № 21-13/569

от 15.02.2019). Использование новых теоретических результатов позволило объяснить различные электронные процессы, протекающие в сверхпроводящих материалах, имеющих пониженную симметрию решетки;

предложенные механизмы новых металл-диэлектрик переходов и микроскопические механизмы наномасштабного разделения диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в слабо легированных купратах, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратах, а также выявленная возможность сосуществования конкурирующих диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в легированных купратных материалах были использованы в рамках научно-исследовательского проекта № 0115РК02715 «Разработка новых углеродных наноматериалов широкого спектра применения» при изучении необычных электронных свойств нанокompозитных материалов (Письмо Казахского национального университета имени аль-Фараби № 19-9-396 от 12.02.2019). Использование новых научных результатов позволило объяснить физические процессы, протекающие в композитных материалах при диэлектрик-металл и металл-углерод переходах, а также при разработке и исследовании наноматериалов;

результаты теоретических исследований по влиянию металл-диэлектрик переходов и различных псевдощелей на температурные зависимости магнитной восприимчивости и электрического сопротивления слабо легированных купратов, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратов были использованы в рамках научно-исследовательского проекта «Исследование намагниченности и электросопротивления в магнитных сверхпроводниках $FeSe_xTe_{1-x}$ и $ErFe_xCo_{1-x}As_2$, $RE(Rh_xRu_{1-x})_4B_4$ в магнитных полях до 14 Т» (2013–2017) (Письмо Физико-технического института низких температур им. Б.И. Веркина Национальной академии наук Украины № 64/92 от 12.02.2019). Использование новых научных результатов позволило объяснить особенности поведения псевдощели в магнитных высокотемпературных сверхпроводниках.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 9 международных и 3 республиканских научно-практических конференциях.

Публикация результатов исследований. По теме диссертации опубликовано 25 научных работ, 13 научных статей в научных изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторских диссертаций, из них 5 в зарубежных научных журналах.

Структура и объем диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка использованной литературы. Объем диссертации составляет 148 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснованы актуальность и востребованность темы диссертации, сформулированы цель и задачи, выявлены объект, предмет и методы исследования, определено соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий в Республике Узбекистан, изложена научная новизна исследования, обоснована достоверность полученных результатов, раскрыта их теоретическая и практическая значимость, приведены краткие сведения о внедрении результатов, апробации работы и структуре диссертации.

В первой главе диссертации **«Механизмы локализации носителей тока и металл-диэлектрик переходов в твердых телах»** выполнен обзор литературы по теме диссертации. Приведен анализ теоретических исследований, посвященных механизмам локализации носителей тока и металл-диэлектрик переходов в твердых телах. Большое внимание уделено теоретическим моделям и подходам описания локализации электронов (дырок), приводящих к металл-диэлектрик переходам в нелегированных и легированных материалах. В частности, рассмотрены механизмы металл-диэлектрик переходов, предложенных Вильсоном, Моттом, Пайерлсом, Андерсоном и другими. Определены основные нерешенные проблемы металл-диэлектрик переходов в легированных ВТСП-купратах, обсуждены возможные пути их решения, сформулированы цель и задачи данной диссертационной работы.

Во второй главе **«Отличительные особенности электронных структур нелегированных и легированных купратных соединений»** вычислены энергии основных состояний дырок, появляющихся в валентной зоне кислорода купратных соединений при дырочном легировании этих материалов, и определены возможные энергетические уровни водородоподобных примесей, больших поляронов и биполяронов в диэлектрической щели (т.е. запрещенной зоне) нелегированных купратов, определены энергии связей больших (би)поляронов и энергия образования больших биполяронов как низкоэнергетические щелей в спектрах одночастичного возбуждения в дырочно-легированных купратах.

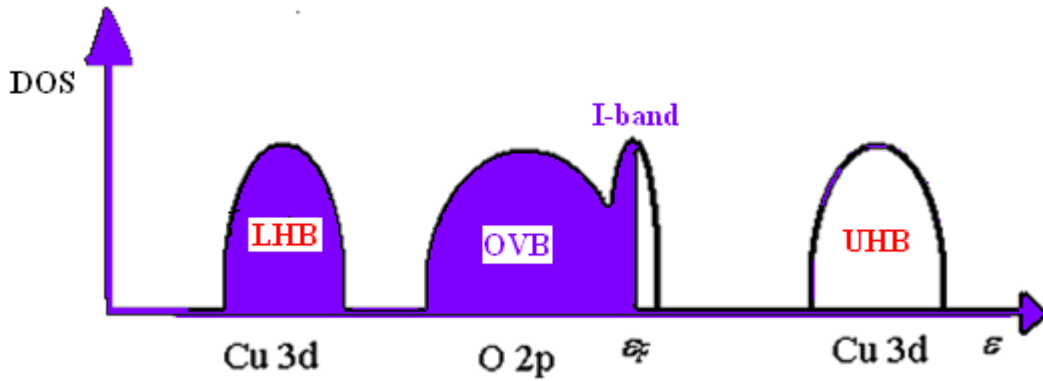
Согласно современной классификации Зайнана–Савацкого–Аллена, конечная зонная структура нелегированных купратов зависит от энергии кулоновского отталкивания U_d , ширины d -зоны W и энергетической щели $E_g = \Delta_{CT} = \epsilon_d - \epsilon_p$ для переноса заряда из ионов кислорода в ионы меди, где ϵ_d и ϵ_p соответственно энергии электрона на атомах меди и кислорода. При $U_d > W > \Delta_{CT}$ электронная зонная структура нелегированных купратов соответствует моттовскому диэлектрику типа переноса заряда. В этих материалах энергетические щели между верхней зоной Хаббарда и валентной зоной кислорода составляют $E_g = 1.5-2$ эВ. Однако в запрещенной зоне (т.е. внутри энергетической щели E_g) нелегированных купратов при их легировании появляются новые электронные состояния, природа которых пока остается неизвестной. Поэтому для определения новых электронных структур дырочно-легированных купратов нами изучены возможности образования таких локализованных примесных (в частности,

водородоподобных примесных) и (би)поляронных состояний в рамках континуальной модели ионного кристалла и в адиабатическом приближении. При этом функционалы полной энергии $E_1\{\psi(\vec{r})\}$ и $E_2\{\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\}$ дырочных носителей, зависящих от их волновых функций $\psi(\vec{r})$ (для одной дырки) и $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ (для двух дырок), деформации решетки $\Delta(r)$ и электростатического потенциала поляризованной решетки $\phi(r)$ в легированных купратах нами вариационно вычислены и определены энергии водородоподобных примесных и локализованных (би)поляронных состояний. Проведенные нами расчеты показывают, что энергетические уровни локализованных водородоподобных примесных состояний и (би)поляронных состояний определяют низкоэнергетические электронные структуры легированных купратов, которые фундаментально отличаются от высокоэнергетических электронных структур нелегированных купратов. Энергия ионизации примесных центров и энергия связи больших поляронов и биполяронов будут проявляться в спектрах возбуждения легированных купратов как их новые щелевые особенности.

Такие щелевые особенности экспериментально наблюдались в слаболегированных и недолегированных купратах, в которых низкоэнергетические щели экспериментально отмеченные при энергиях 0.04–0.06 эВ и 0.08–0.15 эВ, могут быть связаны соответственно с энергией связи (или диссоциации) E_p и E_{bv} больших поляронов и биполяронов.

В третьей главе «**Применимости моттовского металл-диэлектрик перехода к легированным купратам**» показано, что вопрос о применимости концепции моттовского металл-диэлектрик перехода к легированным купратным материалам может быть решен на основании более адекватных и реалистических подходов. При этом нами рассмотрены специфические особенности моттовских металл-диэлектрик переходов в легированных купратах в условиях существования: (1) водородоподобных примесных центров, (2) образования узких энергетических примесных зон между валентной зоной кислорода и зоной проводимости (т.е. верхней зоны Хаббарда) и (3) сильной корреляции носителей тока в этих примесных зонах.

При низких уровнях легирования купратов уровень Ферми находится вблизи центра энергетической щели переноса заряда $\Delta_{ст}$. С увеличением уровня легирования примесная зона образуется над потолком валентной зоны кислорода и уровень Ферми смещается к примесной зоне (рис.1) аналогично тому, как уровень Ферми в *p*-тип полупроводниках смещается к потолку их валентной зоны.



LHB: нижняя зона Хаббарда. UHB: верхняя зона Хаббарда. OVB: валентная зона кислорода. I: примесная (дефектная) зона. ϵ_F - энергия Ферми примесной зоны.

Рис.1. Схематическая зонная структура как функция энергии ϵ в недолегированных купратах

В неоднородно легированных купратах различные пространственные упорядочения легирующих примесей приводят к образованию их разных сверхрешеток и узких примесных зон.

Предполагалось, что водородоподобные примесные центры образуют различные сверхрешетки с константой решетки a_I и координационным числом z . При этом различные пространственные упорядочения этих примесных центров приводят к образованию простой кубической (с $z=6$), объёмно-центрированной кубической (с $z=8$) и гранецентрированной кубической (с $z=12$) сверхрешеток и образованию различных примесных зон в запрещенной зоне купратов. Ширины этих примесных зон можно определить в приближении сильной связи из соотношения

$$W_I = 2zJ \quad W_I = 2zJ, \quad (1)$$

где $J = \frac{\hbar^2}{2m^*a_I^2}$ – интеграл перескока между ближайшими (соседями) примесными центрами, m^* – масса дырочных носителей, локализованных на примесях.

Для случая водородоподобных примесных центров интеграл перескока в уравнении (1) может быть определен как

$$J = \frac{e^2\lambda}{\epsilon_0} \exp(-\lambda R) \quad J = \frac{e^2\lambda}{\epsilon_0} \exp(-\lambda R), \quad (2)$$

где λ – обратный радиус примесного состояния, R – расстояние между водородоподобными примесными центрами.

Когда число водородоподобных примесных центров увеличивается, увеличивается и перекрытие примесных состояний, причем увеличивается

ширина примесной зоны W_I и процесс переноса дырочных носителей в достаточно уширенной примесной зоне становится их зонным (или металлоподобным) движением. В дырочно-легированных купратах возможность моттовского металл-диэлектрик перехода, вызванная сильной корреляцией носителей, зависит от энергии кулоновского отталкивания U двух дырок, находящихся на одном и том же примесном центре и от ширины примесной зоны W_I . В этих материалах модель Мотта-Хаббарда может быть использована для кристаллической решетки примесных центров, каждый из которых описывается волновой функцией $\Psi_I(\vec{r})\Psi_I(\vec{r})$, убывающей как $\exp(-r/a_H)$ для больших r , причем расстояние a_I от одного примесного центра до другого достаточно большое, чтобы приближение сильной связи было применимо. Когда модель Мотта-Хаббарда применяется к узкой зоне водородоподобных примесных атомов, определение наиболее точного значения U очень важно для уяснения предела применимости моттовского металл-диэлектрик перехода к легированным купратным материалам. В ранее проведенных теоретических исследованиях моттовского металл-диэлектрик перехода в легированных полупроводниках значения U были определены без учета важного эффекта экранирования заряда водородоподобного иона решетки одним из двух электронов, находящихся на этом же ионе. Нами показано, что эффект экранирования заряда водородоподобного акцепторного примесного центра одним из двух дырочных носителей, находящихся на этом же примесном центре, приводит к уменьшению заряда Z примесного иона. В результате водородоподобная примесь будет иметь некий эффективный заряд Z^* и гамильтониан двухдырочного водородоподобного примесного центра имеет следующий вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \nabla_2^2 - \frac{Z^* e^2}{\epsilon_0} \left[\frac{1}{|\vec{r}_1|} + \frac{1}{|\vec{r}_2|} \right] + \frac{e^2}{\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \nabla_2^2 - \frac{Z^* e^2}{\epsilon_0} \left[\frac{1}{|\vec{r}_1|} + \frac{1}{|\vec{r}_2|} \right] + \frac{e^2}{\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (3)$$

где $m_1^* m_1^*$ и $m_2^* m_2^*$ – эффективные массы дырочных носителей, $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ – расстояние между этими носителями, которые имеют координаты $\vec{r}_1 \vec{r}_1$ и $\vec{r}_2 \vec{r}_2$.

Далее энергия основного состояния водородоподобного примесного центра вычисляется с использованием двухдырочной волновой функции в простой форме (без учета корреляции) в сферических координатах

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_I(\vec{r}_1) \psi_I(\vec{r}_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z^*}{a_H} \right)^3 \exp \left[-\frac{Z^*(r_1 + r_2)}{a_H} \right]$$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_I(\vec{r}_1) \psi_I(\vec{r}_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z^*}{a_H} \right)^3 \exp \left[-\frac{Z^*(r_1 + r_2)}{a_H} \right], \quad (4)$$

где Z^* -вариационный параметр, $a_H = \hbar^2 \epsilon_0 / m^* e^2$ -боровский радиус водородоподобного примесного центра, $m^* = m_1 = m_2$ -эффективная масса дырочного носителя в легированном купрате.

Тогда энергия основного состояния рассматриваемой системы определяется из выражения

$$E(Z^*) = \iint \Psi^*(r_1, r_2) H \Psi(r_1, r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad E(Z^*) = \iint \Psi^*(r_1, r_2) H \Psi(r_1, r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (5)$$

После вычисления интегралов в (5) с использованием волновой функции (4) и последующей минимизации функционала $E(Z^*)$ по отношению Z^* находим

$$Z^* = Z - \frac{5}{16} Z^* = Z - \frac{5}{16}. \quad (6)$$

Таким образом, более точная энергия кулоновского отталкивания между двумя дырками, находящимися в одном и том же примесном центре, которая представляет собой моттовскую энергетическую щель, будет равна

$$U = \iint \psi_I^2(r_1) \frac{e^2}{\epsilon_0 |r_{12}|} \psi_I^2(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 = \frac{5}{4} \left(Z - \frac{5}{16} \right) E_I^H$$

$$U = \iint \psi_I^2(r_1) \frac{e^2}{\epsilon_0 |r_{12}|} \psi_I^2(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 = \frac{5}{4} \left(Z - \frac{5}{16} \right) E_I^H, \quad (7)$$

где $E_I^H = \frac{e^2}{2\epsilon_0 a_H} E_I^H = \frac{e^2}{2\epsilon_0 a_H}$ -энергия ионизации однодырочного водородоподобного примесного центра.

Далее нами получены адекватные критерии моттовских металл-диэлектрик переходов в легированных купратах с использованием принципа неопределенности $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$, $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$, где ΔE и Δt - соответственно неопределенности в полной энергии и времени. С помощью некоторого простого преобразования это соотношение неопределенности можно записать в виде

$$\Delta \chi \cdot \Delta \bar{V} \geq \frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*} \cdot \frac{1}{2\Delta k} \Delta \chi \cdot \Delta \bar{V} \geq \frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*} \cdot \frac{1}{2\Delta k}, \quad (8)$$

где $\Delta \bar{V}$ и Δk - неопределенности в потенциальной энергии и волновом векторе носителя.

Выражение $\frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*}$ в ур.(8) представляет неопределенность в кинетических энергиях носителей в их энергетической зоне. В примесной зоне неопределенность в кинетической энергии носителя

можно определить как $\frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*} \simeq W_I/2$, а

неопределенность в волновом векторе будет определена как $\Delta k \simeq 1/a_I$
 $\Delta k \simeq 1/a_I$.

Тогда выражение (8) может быть переписано в виде

$$\Delta x \cdot \Delta \bar{V} \simeq \frac{W_I a_I}{4} \Delta x \cdot \Delta \bar{V} \simeq \frac{W_I a_I}{4} . \quad (9)$$

С другой стороны неопределенность в потенциальной энергии носителя $\Delta \bar{V} \Delta \bar{V}$, находящегося на водородоподобном примесном центре, будет порядка энергии Хаббарда U , тогда как неопределенность в координате этого носителя будет порядка боровского радиуса водородоподобного примесного центра a_H . В этом случае условие локализации дырочного носителя можно записать в виде $U \cdot a_H \gtrsim \frac{W_I a_I}{4} U \cdot a_H \gtrsim \frac{W_I a_I}{4}$ или в более удобном для дальнейшего анализа виде

$$\frac{W_I}{U} \lesssim \frac{4a_H}{a_I} \frac{W_I}{U} \lesssim \frac{4a_H}{a_I} . \quad (10)$$

Это условие - очень важный фундаментальный результат, позволяющий найти более точные количественные критерии моттовского металл-диэлектрик перехода в легированных материалах. Зная энергию Хаббарда U и ширину примесной зоны W_I можно найти критерий моттовского металл-диэлектрик перехода в легированных купратах из условия (10). Для случая водородоподобных примесных центров значение U при $Z=1$ определяется из (7) и равно $U = (55/64)E_I^H U = (55/64)E_I^H$, в то время как величину ширины примесной зоны W_I можно определить из следующего выражения:

$$W_I = 2z \frac{e^2}{\epsilon_0 a_H} \exp(-\lambda R) W_I = 2z \frac{e^2}{\epsilon_0 a_H} \exp(-\lambda R) , \quad (11)$$

где $\lambda = a_H^{-1} \lambda = a_H^{-1}$.

Тогда критерий моттовского металл-диэлектрик перехода можно записать в виде

$$\frac{W_I}{U} \simeq \frac{64z}{55} \exp\left(-\frac{R}{a_H}\right) = \frac{4a_H}{a_I} \frac{W_I}{U} \simeq \frac{64z}{55} \exp\left(-\frac{R}{a_H}\right) = \frac{4a_H}{a_I} . \quad (12)$$

Когда водородоподобные примесные центры образуют простую кубическую ($z=6$), объемно-центрированную кубическую ($z=8$) и гранецентрированную кубическую ($z=12$) сверхрешетки, постоянные их решетки соответственно будут равны $a_I = R$ $a_I = R$, $a_I = 2R/\sqrt{3}$ $a_I = 2R/\sqrt{3}$ и $a_I = \sqrt{2}R$ $a_I = \sqrt{2}R$. Таким образом, уравнение (12) можно записать как

$$\left(\frac{64z}{55n^{\frac{1}{3}}a_H}\right) \exp\left[-\frac{1}{n^{\frac{1}{3}}a_H}\right] = 1 \left(\frac{64z}{55n^{\frac{1}{3}}a_H}\right) \exp\left[-\frac{1}{n^{\frac{1}{3}}a_H}\right] = 1 \quad (\text{для } z=6),$$

$$\left(\frac{64 \sqrt{2z}}{55 n^{\frac{1}{3}} a_H} \right) \exp \left[-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt[3]{4} n^{\frac{1}{3}} a_H} \right] = 1$$

$$\left(\frac{64 \sqrt{2z}}{55 n^{\frac{1}{3}} a_H} \right) \exp \left[-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt[3]{4} n^{\frac{1}{3}} a_H} \right] = 1$$

для (z=8),

$$\left(\frac{64 \sqrt{4z}}{55 n^{\frac{1}{3}} a_H} \right) \exp \left[-\frac{1}{2^{\frac{1}{6}} n^{\frac{1}{3}} a_H} \right] = 1$$

$$\left(\frac{64 \sqrt{4z}}{55 n^{\frac{1}{3}} a_H} \right) \exp \left[-\frac{1}{2^{\frac{1}{6}} n^{\frac{1}{3}} a_H} \right] = 1$$

для (z=12).

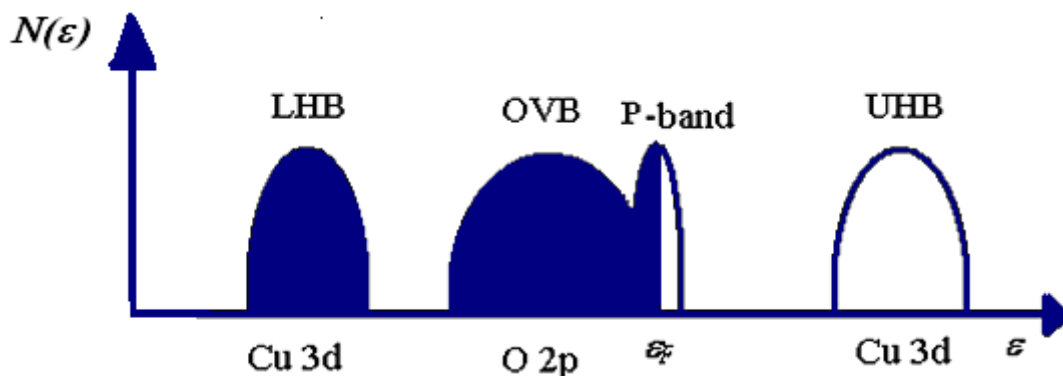
После решения этих уравнений относительно $n^{\frac{1}{3}} a_H$ получаем следующие критерии моттовских металл-диэлектрик переходов:
 $n^{\frac{1}{3}} a_H \simeq 0.3265$ для z=6, $n^{\frac{1}{3}} a_H \simeq 0.2968$ для z=8, $n^{\frac{1}{3}} a_H \simeq 0.2504$ для z=12.

Если выбираем $m^* = m_e$ и $\epsilon_0 = 30$, то находим $a_H \approx 15.87 \text{ \AA}$ для LSCO, так что моттовские металл-диэлектрик переходы в этих материалах будут происходить при следующих концентрациях дырочных носителей $x_c = n_c / n_a \simeq 0.00075 - 0.00166$, где $n_a = 1/V_a$ — плотность атомов кристаллической решетки, V_a — объем, приходящийся на формульные единицы CuO_2 в купратах (для LSCO $V_a = 190 \text{ \AA}^3$). Эти значения x_c намного меньше, чем значения $x_c = 0.02$, при которых разрушение АФ порядка наблюдается в LSCO. Однако примесь большого радиуса с $E_{ad} < 0$ и большой полярон также могут образовать водородоподобный примесный центр в LSCO. Поэтому, водородоподобное состояние такого большого поларона в LSCO имеет боровский радиус, определяемый из выражения $a_H = 0.529 \epsilon_0 m_e / m_p \text{ \AA}$. Если теперь выбираем $m_p = 2.1 m_e$ и $\epsilon_0 = 28$, то находим $a_H \approx 7.06 \text{ \AA}$. В этом случае моттовские металл-диэлектрик переходы будут происходить при $x_c = 0.0188$ (для z=6) и $x_c = 0.0141$ (для z=8). Эти значения x_c близки к экспериментально определенным значениям $x_c = 0.02$, при которых АФ порядок разрушается в LSCO.

В четвертой главе «Новые металл-диэлектрик переходы и наномасштабное разделение фаз в дырочно-легированных ВТСП-купратах» нами изучены новые металл-диэлектрик переходы и наномасштабное разделение фаз в дырочно-легированных ВТСП-купратах, вызванные сильными дырочно-решеточными взаимодействиями и поляронными эффектами. Наиболее важной отличительной особенностью ВТСП-купратов является то, что они являются типичными полярными материалами, где дырочно-решеточные взаимодействия будут довольно сильными. Большая степень ионности купратных соединений $\eta = \epsilon_\infty / \epsilon_0 \ll 1$ усиливает полярное электрон-фононное взаимодействие и тенденции образования поляронов. В процессе дырочного легирования купратных соединений свободные дырки сначала появляются в валентной зоне кислорода, эти дырочные носители сильно взаимодействуют с колебаниями решетки и становятся поляронами. Можно предположить, что большие поляроны подобно водородоподобным примесным центрам образуют различные сверхрешетки с параметром решетки a_p и координационным числом z , причем возможные типы упорядочения поляронных носителей приводят к образованию простой кубической, объемно-центрированной кубической и гранецентрированной кубической сверхрешеток поляронов с координационными числами соответственно $z=6, 8$ и 12 и к образованию различных поляронных зон в энергетической щели переноса заряда (т.е. запрещенной зоне) купратов (см. рис.2). В приближении сильной связи ширину энергетических зон больших поляронов подобно ширине примесной зоны можно определить из выражения

$$W_p = 2zJ_p W_p = 2zJ_p, \quad (13)$$

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



LHB – нижняя зона Хаббарда. UHB – верхняя зона Хаббарда. OVB – валентная зона кислорода. P – поляронная зона. ϵ_F – энергия Ферми поляронной зоны.

Рис.2. Схематическая зонная структура (плотность состояний $N(\epsilon)$ как функция энергии ϵ поляронов) неделегированных купратов

Если поляроны образуют простую кубическую, объемно-центрированную кубическую и гранецентрированную кубическую сверхрешетки с параметрами решетки $a_p = R$ $a_p = R$ (для $z=6$), $a_p = \frac{2R}{\sqrt{3}}$ $a_p = \frac{2R}{\sqrt{3}}$ (для $z=8$) и $a_p = \sqrt{2}R$ $a_p = \sqrt{2}R$ (для $z=12$), тогда плотности поляронных носителей, которые образуют такие сверхрешетки, соответственно равны $n = \frac{1}{a_p^3} n = \frac{1}{a_p^3}$, $n = \frac{2}{a_p^3} n = \frac{2}{a_p^3}$ и $n = \frac{4}{a_p^3} n = \frac{4}{a_p^3}$.

Далее нами изучены условия локализации дырочных поляронных носителей и определены новые критерии металл-диэлектрик переходов используя соотношения неопределенности Гейзенберга, которое после некоторого простого преобразования можно переписать как

$$\Delta x \cdot \Delta \bar{V} \geq \frac{\hbar^2([\Delta k])^2}{2m_p} \cdot \frac{1}{2\Delta k} \Delta x \cdot \Delta \bar{V} \geq \frac{\hbar^2([\Delta k])^2}{2m_p} \cdot \frac{1}{2\Delta k}, \quad (14)$$

где Δx , $\Delta \bar{V}$ и Δk - соответственно неопределенности в координате, потенциальной энергии и волновом векторе дырочного полярона.

В поляронной зоне неопределенность в кинетической энергии и волновом векторе поляронного носителя можно записать в виде $\frac{\hbar^2([\Delta k])^2}{2m_p} \sim \varepsilon_F$ $\frac{\hbar^2([\Delta k])^2}{2m_p} \sim \varepsilon_F$ и $\Delta k \sim 1/a_p$, где энергия Ферми в поляронной зоне определяется из выражения

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 \left(3\pi^2 [n]\right)^{\frac{2}{3}}}{2m_p} \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 \left(3\pi^2 [n]\right)^{\frac{2}{3}}}{2m_p}, \quad (15)$$

n – концентрация поляронов.

Тогда соотношение (14) можно написать в виде

$$\Delta x \cdot \Delta \bar{V} \simeq \frac{\varepsilon_F a_p}{2} \Delta x \cdot \Delta \bar{V} \simeq \frac{\varepsilon_F a_p}{2}. \quad (16)$$

Теперь, учитывая, что неопределенность в потенциальной энергии $\Delta \bar{V}$ полярона составляет порядок энергии образования полярона E_p и равна глубине потенциальной ямы, в которой находится автолокализованная дырка, и неопределенность в её координате Δx составляет порядок радиуса полярона R_p , соотношение неопределенности (16) можно записать в виде

$$\frac{E_p}{\varepsilon_F} \geq 0.5 \frac{a_p E_p}{R_p \varepsilon_F} \geq 0.5 \frac{a_p}{R_p} \quad (17)$$

Это неравенство является условием локализации поляронных носителей и универсальным критерием новых металл-диэлектрик переходов в твердых телах. Критерий таких металл-диэлектрик переходов можно написать в следующем виде с учетом уравнений (15) и (17)

$$x = x_c = \frac{n_c}{n_a} = \frac{1}{3\pi^2 n_a} \left[\frac{4m_p E_p R_p}{\hbar^2 a_p} \right]^{\frac{3}{2}} \quad x = x_c = \frac{n_c}{n_a} = \frac{1}{3\pi^2 n_a} \left[\frac{4m_p E_p R_p}{\hbar^2 a_p} \right]^{\frac{3}{2}}, \quad (18)$$

где учтено, что плотность атомов кристаллической решетки равна $n_a=1/V_a$, а объем CuO_2 в купратах обозначен через V_a .

Для простой кубической ($z=6$), объемно-центрированной кубической ($z=8$) и гранецентрированной кубической ($z=12$) сверхрешеток поляронов параметр решетки неперекрывающихся поляронов можно определить соответственно из соотношений $a_p = 2R_p a_p = 2R_p$, $a_p = \sqrt[4]{4R_p} a_p = \sqrt[4]{4R_p}$ и $a_p = 2\sqrt{2}R_p a_p = 2\sqrt{2}R_p$. Минимальное и максимальное значения безразмерной критической концентрации x_c поляронных носителей, определяемых из соотношения (18), при которых происходят металл-диэлектрик переходы в дырочно легированных ВТСП-купратах, соответствуют гранецентрированной кубической и простой кубической сверхрешетки поляронов. Поэтому, применяя критерий (18) для случаев простой кубической и гранецентрированной кубической сверхрешетки поляронов, получаем следующие критерии металл-диэлектрик переходов в дырочнолегированных купратах:

$$x_{c1} = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3 n_a} [2m_p E_p]^{\frac{3}{2}} \quad x_{c1} = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3 n_a} [2m_p E_p]^{\frac{3}{2}} \quad (19)$$

и

(20)

Теперь рассмотрим возможности новых металл-диэлектрик переходов в легированных ВТСП-купратах и вычислим критические значения концентрации поляронных носителей, при которых происходят такие металл-диэлектрик переходы. Согласно экспериментальным данным, массы больших поляронов можно взять $m_p=(2.1-2.7)m_e$ в LSCO и $m_p=(2.0-4.0)m_e$ в YBCO. При этом мы используем теоретические значения $E_p=(0.09-0.106)$ эВ при $\epsilon_\infty=3.5$ и $\eta=0.02-0.08$. Значения V_a в LSCO равно $V_a=190\text{\AA}^3$, $n_a = 1/V_a \simeq 0.53 \cdot 10^{22}\text{см}^{-3}$ и $n_a = 1/V_a \simeq 0.53 \cdot 10^{22}\text{см}^{-3}$. В YBCO $V_a=100\text{\AA}^3$, $n_a = 1/V_a \simeq 10^{22}\text{см}^{-3}$ и $n_a = 1/V_a \simeq 10^{22}\text{см}^{-3}$.

Используя приведенные выше теоретические и экспериментальные значения параметров m_p , E_p и n_a , получаем следующие критические значения уровней легирования для металл-диэлектрик переходов в LSCO и YBCO:

$$x_{c1} \approx 0.07 - 0.13 \quad x_{c1} \approx 0.07 - 0.13 \quad \text{и} \quad x_{c2} \approx 0.042 - 0.078 \quad x_{c2} \approx 0.042 - 0.078$$

для LSCO (21)

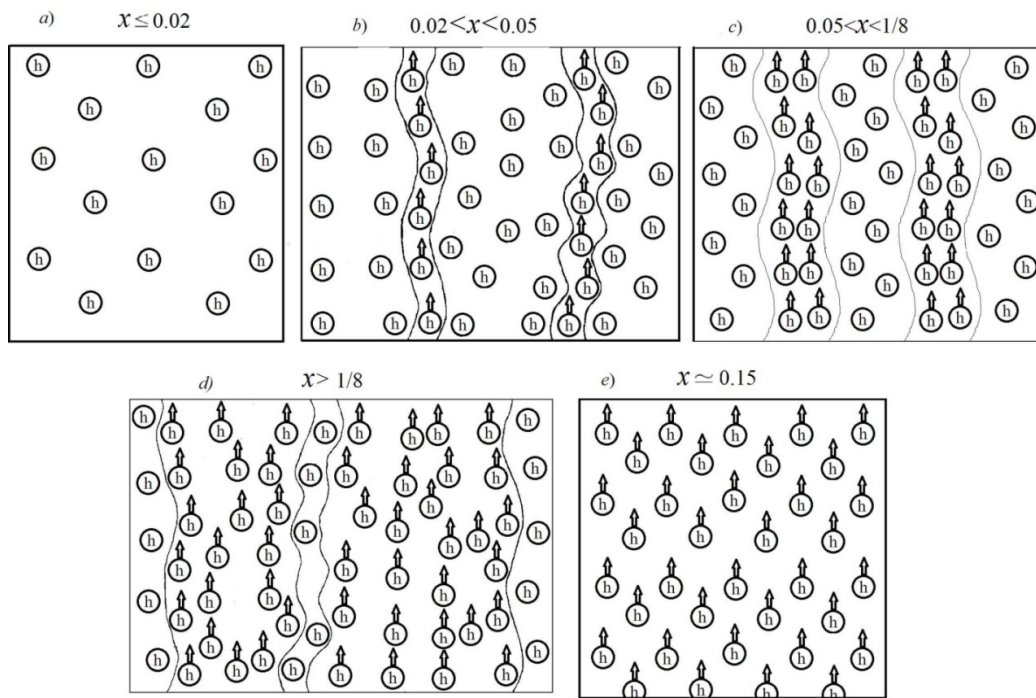
и

$$x_{c1} \approx 0.035 - 0.125 \quad x_{c1} \approx 0.035 - 0.125 \quad \text{и} \quad x_{c2} \approx 0.021 - 0.074$$

$x_{c2} \approx 0.021 - 0.074$ для YBCO. (22)

Таким образом, нами обнаружено, что в недолегированных ВТСП-купратах LSCO металл-диэлектрик переходы и наномасштабное разделение диэлектрических и металлических фаз в насыщенных дырочными носителями металлических (при $x > x_{c1}$ и $x > x_{c2}$) областях и в обедненных дырочными носителями диэлектрических ($x < x_{c2}$ и $x < x_{c1}$) областях могут происходить в широких интервалах легирования от $x \approx 0.04$ (слаболегированная область) до $x \geq 0.13$ (умеренно недолегированная область, включая также “магическое легирование $x=1/8$ ”), тогда как такие металл-диэлектрик переходы и наномасштабное разделение диэлектрических и металлических фаз в легированных купратах YBCO будут происходить в слаболегированных ($x \approx 0.02 - 0.05$) и недолегированных режимах ($x \approx 0.05 - 0.125$), т.е. в пределах легирования от $x \approx 0.02$ до $x \approx 1/8$. Эти результаты находятся в разумном согласии с существующими экспериментальными данными по металл-диэлектрик переходам и образованию диэлектрических, металлических и сверхпроводящих полос/страйпов в недолегированных ВТСП-купратах.

Нами установлена более ясная новая микроскопическая картина сосуществования конкурирующих диэлектрических и металлических фаз в легированных купратах при неравномерном пространственном распределении поляронных носителей. В этой более реалистической картине металлическая фаза и страйпы отсутствуют в слаболегированном купратном материале (т.е. при $x < 0.02$), в котором дырочные носители неподвижны (рис.3, а) в узкой поляронной зоне, и это новое диэлектрическое поведение слаболегированного купратного материала необъяснимо на основе физики мотт-хэббардовского диэлектрика.



a – дырочные носители (дырочные поляроны) в диэлектрической фазе слаболегированных купратов при $x \leq 0.02$ неподвижны, как указано без стрелок; *b*– неподвижные и подвижные дырочные носители в слаболегированных купратах ($0.02 < x < 0.05$) обозначены соответственно на широких диэлектрических полосах без стрелок и в узких металлических полосках со стрелками; *c* – неподвижные и подвижные дырочные носители в недолегированных купратах ($0.05 < x < 1/8$) обозначены соответственно без и со стрелками на диэлектрических и металлических/сверхпроводящих полосах, которые имеют сопоставимые размеры; *d*– неподвижные и подвижные дырочные носители в слегка недолегированных купратах ($x > 1/8$) обозначены соответственно в узких диэлектрических полосах без стрелки и широкие металлические полосы со стрелками; *e*– дырочные носители в металлической/сверхпроводящей фазе оптимально легированных купратов ($x \approx 0.15$) указаны стрелками.

Рис.3. Схематическое изображение металл-диэлектрик переходов и многомасштабного разделения фаз от наномасштабных до макромасштабных полос и эволюция сосуществующих диэлектрических и металлических/сверхпроводящих фаз (полос)

Наши результаты свидетельствуют о том, что первые металлические фазы появляются в слаболегированных купратах при $x > 0.02$ в виде узких полос/страйпов (рис.3, *b*) в полном соответствии с экспериментальными результатами. Отсюда следует, что металлические и диэлектрические фазы в слаболегированных купратах (т.е. при $x \approx 0.02-0.05$) будут существовать в локальных масштабах. Отметим, что металл-диэлектрик переход, происходящий в этих материалах при $x \geq 0.05$ и $T=0$, в эксперименте проявляется как сверхпроводник-диэлектрик. При $x > 0.05$ конкурирующие диэлектрические, металлические и сверхпроводящие фазы сосуществуют в виде чередующихся динамических и статических полос/страйпов в недолегированных ВТСП-купратах в глобальных масштабах (рис.3, *c*).

В пятой главе «Возможные проявления металл-диэлектрик переходов и эффекты сосуществования диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в нормальных и сверхпроводящих свойствах слаболегированных и неделегированных купратов» решена проблема металл-диэлектрик перехода путем изучения температурных зависимостей магнитной восприимчивости и удельного сопротивления ВТСП-купратов при различных уровнях их легирования, а также проблемы подавления сверхпроводимости этих материалов в неделегированном режиме путем выяснения ключевой роли конкурирующих эффектов сосуществующих диэлектрических и сверхпроводящих фаз при переходе от оптимально легированного к неделегированному режиму дырочного легирования купратов. Попытки объяснить необычные нормальные свойства неделегированных ВТСП-купратов (в частности, металл-диэлектрик переход, имеющий место в сверхпроводящей области, диэлектрическое поведение удельного электрического сопротивления вдоль c оси ВТСП-купратов и зависящую от температуры магнитную восприимчивость в металлическом состоянии), подавления их сверхпроводимости привели к ряду спорных предложений. Известно, что магнитная восприимчивость и удельное электрическое сопротивление в нормальном состоянии неделегированных ВТСП-купратов существенно отличаются от таких электронных свойств, объясняемых обычной зонной теорией. Для изучения необычного поведения магнитной восприимчивости χ слаболегированных купратов и неделегированных ВТСП-купратов, нами использованы модели больших поляронов и биполяронов, модели примесных и полярных зон. Мы используем также БКШ-подобную теорию спаривания поляронных носителей в нормальном состоянии ВТСП-купратов.

В слаболегированных купратах ($x < 0.05$) дефектные центры и поляроны (которые являются продуктами термического распада больших биполяронов) дают вклад в магнитную восприимчивость этих материалов определяемый из выражения

$$\chi_t(T) = \chi_D(T) + \chi_p^*(T) = \frac{\mu^2}{k_B T} n_D - 2\mu_B^2 \int_0^\infty \frac{D_p(\varepsilon) (\partial f_p^*)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon$$

$$\chi_t(T) = \chi_D(T) + \chi_p^*(T) = \frac{\mu^2}{k_B T} n_D - 2\mu_B^2 \int_0^\infty \frac{D_p(\varepsilon) (\partial f_p^*)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \quad (23)$$

где $\chi_D(T)$ и $\chi_p^*(T)$ - соответственно вклады дефектных центров и поляронных носителей в $\chi(T)$,

$\partial f_p^* = 1 / \exp \left[(\varepsilon + E_{bB}) / k_B T + 1 \right]$ - Ферми распределения для больших поляронов, создаваемых при термической диссоциации биполяронов, энергия

связи которых равна E_{bB} , $D_p(\varepsilon) = \sqrt{2}m_p^{\frac{3}{2}}\sqrt{\varepsilon}/\pi^2\hbar^2 - D_p(\varepsilon) = \sqrt{2}m_p^{\frac{3}{2}}\sqrt{\varepsilon}/\pi^2\hbar^2$ - плотность состояний поляронов, μ_B -магнетон Бора, n_D - плотность дефектных центров.

Нами учтено, что величины энергии связи больших биполяронов изменяются от 0.030 эВ до 0.0000242 эВ при уменьшении ε_∞ от 5 до 3 и при изменении η от 0.08-0.14. Первый член в уравнении (23) есть не что иное, как закон Кюри $\chi_D(T) \sim \frac{1}{T} \chi_D(T) \sim \frac{1}{T}$ для локализованных носителей заряда. В то время как вклад термически диссоциированных больших биполяронов к $\chi(T)$ определяется из выражения

$$\chi_p^*(T) = \frac{2\sqrt{2}\mu_B^2 m_p^{\frac{3}{2}} \sqrt{k_B T}}{\pi^2 \hbar^3} \times e^{E_{bB}/k_B T} \int_0^\infty \frac{\sqrt{y} e^y}{\left(e^{\left[\frac{(E)_{bB}}{k_B T} \right]} e^y + 1 \right)^2} dy$$

$$\chi_p^*(T) = \frac{2\sqrt{2}\mu_B^2 m_p^{\frac{3}{2}} \sqrt{k_B T}}{\pi^2 \hbar^3} \times e^{E_{bB}/k_B T} \int_0^\infty \frac{\sqrt{y} e^y}{\left(e^{\left[\frac{(E)_{bB}}{k_B T} \right]} e^y + 1 \right)^2} dy \quad (24)$$

где $y = \varepsilon/k_B T$.

Подставляя уравнение (24) в (23), получаем

$$\chi_t(T) = \frac{\mu^2}{k_B T} \left[n_D + \frac{2\sqrt{2}\mu_B^2 (m_p k_B T)^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{E_{bB}}{k_B T}} \times \int_0^\infty \frac{\sqrt{y} e^y dy}{\left[e^{\left[\frac{(E)_{bB}}{k_B T} \right]} e^y + 1 \right]^2} \right]$$

$$\chi_t(T) = \frac{\mu^2}{k_B T} \left[n_D + \frac{2\sqrt{2}\mu_B^2 (m_p k_B T)^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{E_{bB}}{k_B T}} \times \int_0^\infty \frac{\sqrt{y} e^y dy}{\left[e^{\left[\frac{(E)_{bB}}{k_B T} \right]} e^y + 1 \right]^2} \right] \quad (25)$$

Для того чтобы сравнить вычисленные значения $\chi(T)$ с экспериментальными данными для LSCO, определим магнитную восприимчивость материала как $\chi(T) = \chi_t(T)/\rho_M$ $\chi(T) = \chi_t(T)/\rho_M$, где ρ_M -плотность материала.

Вычисленные нами значения $\chi(T)$ хорошо согласуются с экспериментально наблюдаемой температурной зависимостью $\chi(T)$ в слабо легированных купратах LSCO (рис. 4).

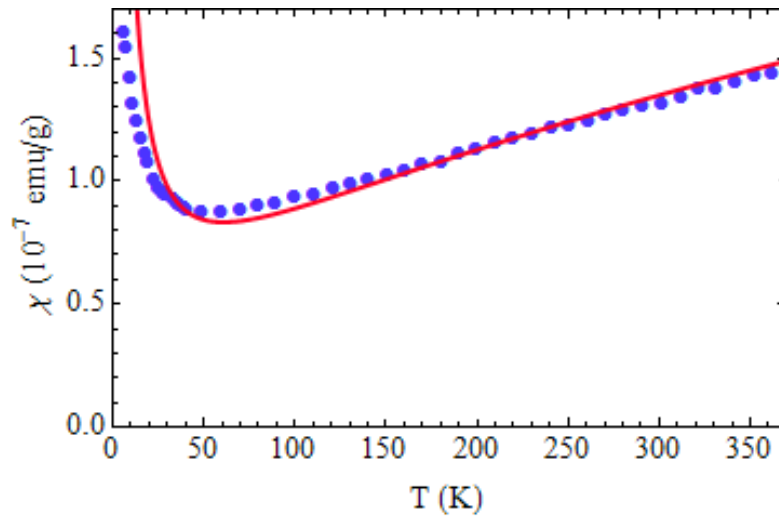


Рис.4. Температурная зависимость χ в слабо легированных купратах $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ при $x=0.05$ с параметрами $m_p=4.3m_e$, $n_D=0.145 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $\rho_M=4.2 \text{ г/см}^3$, $E_{bb}=0.0018 \text{ эВ}$. Теоретические результаты (сплошная кривая) сравнены с экспериментальными данными (круги)

Когда плотности легирующих примесей и больших поляронов увеличиваются, примесные и поляронные состояния образуют энергетические зоны в металлическом состоянии недолегированных ВТСП-купратов. Поэтому в недолегированных ВТСП-купратах куперовское спаривание больших поляронов становится возможным при некоторой характерной температуре T^* выше температуры сверхпроводящего перехода T_c в вырожденном Ферми-газе поляронов (т.е. в достаточно широкой поляронной зоне), тогда как дырочные носители в узкой примесной зоне (т.е. дырочные носители, захваченные примесями) остаются неспаренными. Таким образом, в недолегированных ВТСП-купратах дефектные центры, неспаренные носители в узкой примесной зоне, термические диссоциированные большие биполярны и куперовские пары поляронов вносят вклад в $\chi(T)$, который определяется из соотношения

$$\chi(T) = \chi_D(T) + \chi_p^*(T) + \chi_I(T) + \chi_C(T), \chi(T) = \chi_D(T) + \chi_p^*(T) + \chi_I(T) + \chi_C(T), \quad (26)$$

где $\chi_I(T) = -2\mu_B^2 \int_0^\infty \frac{D_I(\varepsilon) (\partial f_I(\varepsilon))}{\partial \varepsilon} d\varepsilon - \chi_I(T) = -2\mu_B^2 \int_0^\infty \frac{D_I(\varepsilon) (\partial f_I(\varepsilon))}{\partial \varepsilon} d\varepsilon -$

вклад в $\chi(T)$, ожидаемый от неспаренных носителей в примесной зоне, $D_I(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}m_I^{\frac{3}{2}}\sqrt{\varepsilon}}{\pi^2\hbar^3}$ $D_I(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}m_I^{\frac{3}{2}}\sqrt{\varepsilon}}{\pi^2\hbar^3}$ -плотность состояний в этой зоне,

$$f_I(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{(\varepsilon + E_{bB})}{k_B T}\right) + 1}$$

функция Ферми распределения для носителей в примесной зоне (где энергия носителей отсчитывается от энергии Ферми ε_{FI}) и m_I – масса носителей в

$$\chi_C(T) = -2\mu_B^2 \int_0^\infty \frac{D_C(\varepsilon) \left(\frac{\partial f_C(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right)}{d\varepsilon}$$

примесной зоне,

$$\chi_C(T) = -2\mu_B^2 \int_0^\infty \frac{D_C(\varepsilon) \left(\frac{\partial f_C(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\right)}{d\varepsilon}$$

-вклад поляронных компонент

термический диссоциированных куперовских пар, $D_C(\varepsilon) = \frac{D_p(\varepsilon)}{2}$

$D_C(\varepsilon) = \frac{D_p(\varepsilon)}{2}$ -плотность состояний поляронов на уровне Ферми для одной спиновой ориентации, рассматриваемой в теории БКШ,

$$f_C(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^{*2}(T)}}{k_B T}\right) + 1}$$

функция Ферми распределения для возбужденных поляронных компонент куперовских пар, $\Delta^*(T)$ – БКШ-подобная энергетическая щель (или псевдощель) в спектре возбуждений куперовских пар поляронов.

Хотя обычная теория БКШ, предложенная для описания сверхпроводимости в простых металлах является неадекватной для объяснения сверхпроводящих свойств ВТСП-купратов, тем не менее БКШ-подобная теория спаривания поляронов может быть использована для изучения аномальных свойств недолегированных ВТСП-купратов в их нормальном состоянии. В частности, БКШ-подобная теория может адекватно описать куперовские спаривания поляронных носителей в нормальном состоянии недолегированных ВТСП-купратов. Температурная зависимость БКШ-подобной псевдощели может быть аппроксимирована как

$$\Delta^*(T) \approx 1.76 k_B T^* \tanh \left[1.85 \sqrt{\frac{T^*}{T} - 1} \right] \quad (27)$$

Можно предположить, что основной вклад как в $\chi_C(T)$, так и в БКШ-подобное спаривание поляронов ниже температуры образования поляронных куперовских пар дают поляронные носители, энергии которых ближе к энергии Ферми ε_F . Тогда $D_C(\varepsilon)$ в выражение $\chi_C(T)$ можно заменить на $D_C(\varepsilon_F)$. В результате получим

$$\chi_C(T) \approx 2\mu_B^2 D_C(\varepsilon_F) \left[1 + \exp\left(\frac{\Delta^*(T)}{k_B T}\right) \right]^{-1}$$

$$\chi_C(T) \approx 2\mu_B^2 D_C(\varepsilon_F) \left[1 + \exp\left(\frac{\Delta^*(T)}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (28)$$

Чтобы сравнить вычисленные значения $\chi(T)$ с экспериментальными результатами, определяем $\chi(T)$ из следующего выражения:

$$\chi(T) = \frac{\chi_t(T)M}{\rho_M} = \mu_B^2 \left\{ \frac{n_D}{k_B T} + \frac{2\sqrt{2}m_I^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_{\varepsilon_{FI}}^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \frac{e^{(\varepsilon - \varepsilon_{FI(T)})/k_B T}}{\left[e^{(\varepsilon - \varepsilon_{FI(T)})/k_B T} + 1 \right]^2} d\varepsilon \right.$$

$$\left. + \frac{2\sqrt{2}m_p^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \frac{e^{(\varepsilon + E_{bB})/k_B T}}{\left[e^{(\varepsilon + E_{bB})/k_B T} + 1 \right]^2} d\varepsilon + \frac{2m_p^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{(1 + e^{\Delta^*(T)/k_B T})} \sqrt{\varepsilon_{F(T)}} \right\} \frac{M}{\rho_M}$$

$$+ \frac{2\sqrt{2}m_p^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \frac{e^{(\varepsilon + E_{bB})/k_B T}}{\left[e^{(\varepsilon + E_{bB})/k_B T} + 1 \right]^2} d\varepsilon + \frac{2m_p^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{(1 + e^{\Delta^*(T)/k_B T})} \sqrt{\varepsilon_{F(T)}} \right\} \frac{M}{\rho_M} \quad (29)$$

Для YBCO нами выбраны плотность массы, равная $\rho_M = 6.4 \text{ г/см}^3$, и молярная масса $M=670 \text{ г/моль}$ в наших расчетах.

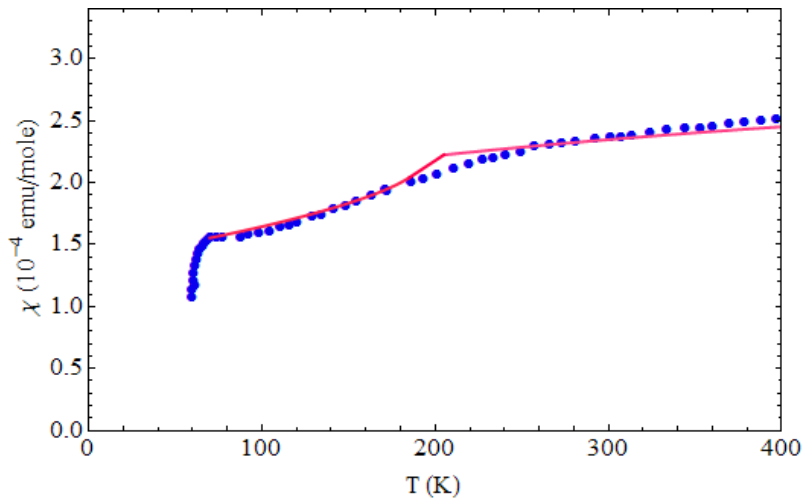


Рис. 5. Температурная зависимость χ в недолегированных купратах $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ при $x=0.62$ с параметрами $m_p=3m_e$, $m_I=4.7m_e$, $n_D=0.08 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $\varepsilon_F=0.145 \text{ эВ}$, $\varepsilon_{FI}=0.1 \text{ эВ}$, $\rho_M=5.6 \text{ г/см}^3$, $E_{bB}=0.007 \text{ эВ}$. Теоретические результаты (сплошная кривая) сравнены с экспериментальными данными (круги)

Как видно из рис.5, наши теоретически рассчитанные значения $\chi(T)$ находятся в разумном согласии с экспериментально наблюдаемой температурной зависимостью $\chi(T)$ в недолегированном YBCO. В нормальном состоянии недолегированных ВТСП-купратов БКШ-подобная псевдощель $\Delta^*(T)$ появляется в $\chi(T)$ ниже T^* , как показано на рис.5 для недолегированного ВТСП-купрата YBCO. При высоких температурах $T \gg T^*$ магнитная восприимчивость $\chi(T)$ этих ВТСП-материалов слабо зависит от температуры. Согласно (29), $\chi(T)$ постепенно начинает уменьшаться с понижением температуры до T^* и затем уменьшение $\chi(T)$ с уменьшением T ниже T^* становится более быстрым (рис.5) из-за появления псевдощели Δ^* в спектре возбуждения недолегированного ВТСП-купрата YBCO. В обычных металлах $\chi(T)$ не зависит от температуры из-за отсутствия в них поляронного эффекта. В противоположность этому поляронный эффект появляется в температурной зависимости $\chi(T)$ как выше T^* , так и ниже T^* в недолегированных ВТСП-купратах, где $\chi(T)$ сначала начинает медленно уменьшаться с уменьшением температуры до T^* и затем уменьшение в $\chi(T)$ с понижением T ниже T^* становится более быстрым (см. рис.5).

В оптимально легированных ВТСП-купратах, также как в недолегированных ВТСП-купратах, дефектные центры, дырочные носители в достаточно уширенной зоне (где $\varepsilon_{FI} \gg k_B T$), термически диссоциированные большие биполароны и поляронные компоненты диссоциированных куперовских пар дают вклад в $\chi(T)$ и выражение для полной безразмерной магнитной восприимчивости имеет следующий вид:

$$\frac{n_D}{k_B T} + \frac{2\sqrt{2}m_I^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \sqrt{\varepsilon_{FI}(T)} + \frac{2\sqrt{2}m_p^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \frac{e^{(\varepsilon+E_{bB})/k_B T}}{\left[e^{(\varepsilon+E_{bB})/k_B T} + 1 \right]^{\frac{1}{2}}} \uparrow$$

$$\frac{n_D}{k_B T} + \frac{2\sqrt{2}m_I^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \sqrt{\varepsilon_{FI}(T)} + \frac{2\sqrt{2}m_p^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 k_B T} \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \frac{e^{(\varepsilon+E_{bB})/k_B T}}{\left[e^{(\varepsilon+E_{bB})/k_B T} + 1 \right]^{\frac{1}{2}}} \uparrow \quad (30)$$

Теперь запишем выражение магнитной восприимчивости для сравнения с экспериментальными данными в виде

$$\chi(T) = \chi_t(T)M / \rho_M \quad \chi(T) = \chi_t(T)M / \rho_M \quad (31)$$

В этом случае магнитная восприимчивость $\chi(T)$, вычисленная по формуле (31), почти не зависит от температуры (см. рис.6), как это наблюдается также экспериментально в оптимально легированном ВТСП-купрате YBCO. Из приведенных выше результатов следует, что сосуществующие диэлектрические и металлические фазы проявляются в температурной зависимости магнитной восприимчивости $\chi(T)$ слаболегированных купратов, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратов.

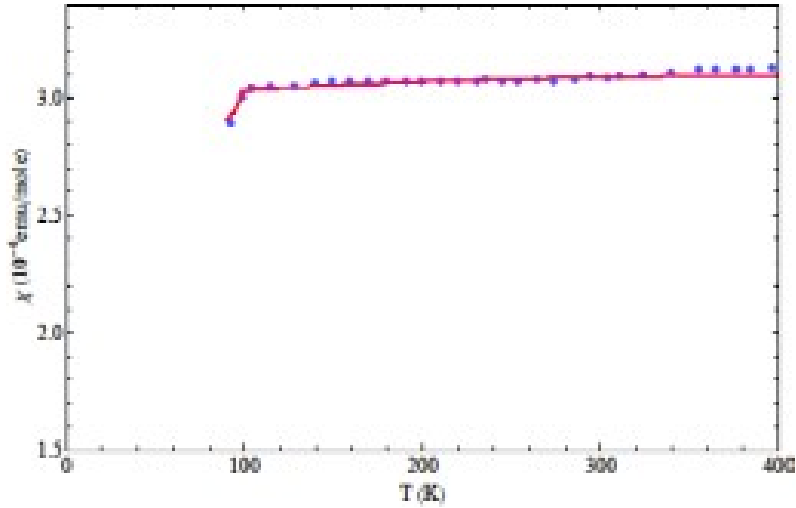


Рис.6. Температурная зависимость χ в недолегированных купратах $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ при $x=0.97$ с параметрами $m_p=2.1m_e$, $m_l=4.1m_e$, $n_D=0.05 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $\epsilon_F=0.18 \text{ эВ}$, $\epsilon_{FI}=0.148 \text{ эВ}$, $\rho_M=5.9 \text{ г/см}^3$, $E_{bB}=0.0001 \text{ эВ}$. Теоретические результаты (сплошная кривая) сравнены с экспериментальными данными (круги)

Нами также рассмотрен 3D поляронный транспорт при термической диссоциации больших биполяронов, находящихся между CuO_2 слоями ВТСП-купратов. Предполагается, что в легированных купратах локализованные большие биполяроны образуются при малых концентрациях поляронов в областях между CuO_2 слоями и поляронный транспорт вдоль c -оси становится возможным при термической диссоциации неподвижных биполяронов в отдельные поляроны, которые затем движутся путем прыжка из одного положения в другое вдоль c -оси. При этом активационная энергия E_a (т.е. высота потенциального барьера) для прыжка поляронной компоненты большого биполарона из одной потенциальной ямы в другую, ближайшую соседнюю потенциальную яму равна энергии связи этого биполарона E_{bB} . В случае одномерного поляронного транспорта дрейфовая подвижность поляронов при их прыжковых движениях вдоль c -оси можно определить из уравнения

$$\mu_n(T) = \frac{ea_n^2\omega_0}{2k_B T} \exp\left[-\frac{E_{bB}}{k_B T}\right] \mu_n(T) = \frac{ea_n^2\omega_0}{2k_B T} \exp\left[-\frac{E_{bB}}{k_B T}\right], \quad (32)$$

выше T_c выражение для прыжковой проводимости поляронов вдоль c -оси можно записать в виде

$$\sigma_c(T > T_c) = n_n e \mu_n(T) = \frac{n_n e^2 a_n^2 \omega_0}{2k_B T} \exp\left[-\frac{E_{bB}}{k_B T}\right] \sigma_c(T > T_c) = n_n e \mu_n(T) = \frac{n_n e^2 a_n^2 \omega_0}{2k_B T} \exp\left[-\frac{E_{bB}}{k_B T}\right], \quad (33)$$

где n_h концентрации поляронов, движение которых в областях между слоями CuO_2 ВТСП-купратов имеет прыжковый характер.

Таким образом, удельное сопротивление ВТСП-купратов вдоль их c -оси определяется как

$$\rho_c(T > T_c) = \frac{1}{\sigma_c(T > T_c)} = \frac{2k_B T}{n_h e^2 a_h^2 \omega_0} \exp \left[\frac{E_{bB}}{k_B T} \right]$$

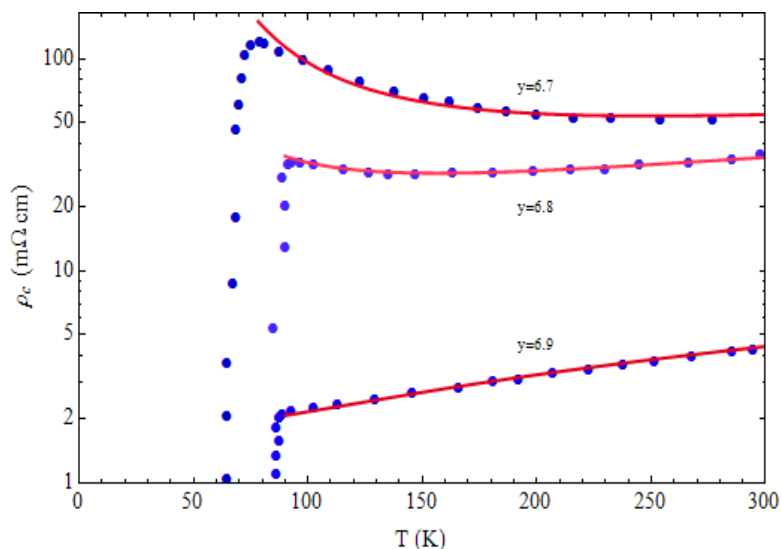
$$\rho_c(T > T_c) = \frac{1}{\sigma_c(T > T_c)} = \frac{2k_B T}{n_h e^2 a_h^2 \omega_0} \exp \left[\frac{E_{bB}}{k_B T} \right] \quad (34)$$

Учитывая остаточное сопротивление ρ_0 легированных ВТСП-материалов, выражение (34) можно переписать как

$$\rho_c(T) = \rho_0 + \frac{2k_B T}{n_h e^2 a_h^2 \omega_0} \exp \left[\frac{E_{bB}}{k_B T} \right] \rho_c(T) = \rho_0 + \frac{2k_B T}{n_h e^2 a_h^2 \omega_0} \exp \left[\frac{E_{bB}}{k_B T} \right]. \quad (35)$$

Из (35) видно, что удельное сопротивление легированных ВТСП-материалов пропорционально $e^{E_{bB}/k_B T} e^{E_{bB}/k_B T}$ и диэлектрическая температурная зависимость удельного сопротивления вдоль c -оси обусловлена активационным характером переноса больших поляронов вдоль этой оси, так что концепция, термо-активирующая их прыжковый транспорт, может объяснить естественно экспериментальные данные по $\rho_c(T)$.

Наши теоретические результаты по $\rho_c(T)$ сравнены с экспериментальными данными по $\rho_c(T)$, полученными для ВТСП-купратов YBCO при различных уровнях их легирования (рис.7). Как видно из рис.7, диэлектрическое поведение $\rho_c(T)$ в недолегированных ВТСП-купратах постепенно изменяется в металлическое поведение $\rho_c(T)$ с уменьшением энергии связи больших биполяронов в оптимально легированном режиме.



Фитирование $\rho_c(T)$ данных для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ с $y=6.7, 6.8$ и 6.9 с использованием уравнения (35) и различными параметрами (для $y=6.7, 6.8$ и 6.9 использованы соответственно

следующие параметры $\rho_0 = 0.05 \text{ м}\Omega\text{см}$, $a_h = 11.5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $\omega_0 = 5.8 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $n_i = 1.77 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $E_{\text{бв}} = 0.0215 \text{ эВ}$; $\rho_0 = 0.03 \text{ м}\Omega\text{см}$, $a_h = 11.5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $\omega_0 = 6.0 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $n_i = 2.0 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $E_{\text{бв}} = 0.0135 \text{ эВ}$ и $\rho_0 = 0.02 \text{ м}\Omega\text{см}$, $a_h = 11.5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $\omega_0 = 17.0 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $n_i = 7.35 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $E_{\text{бв}} = 0.005 \text{ эВ}$).

Рис.7. Экспериментальные данные $\rho_c(T)$ (круги), полученные для $YBa_2Cu_3O_y$ в различных уровнях легирования и фитирования по уравнению (35) (сплошные кривые)

Приведенные выше результаты показывают, что металл-диэлектрик переходы происходят не только в слабо легированных купратах, но и в недолегированных ВТСП-купратах. В результате этого диэлектрические, металлические и сверхпроводящие фазы ВТСП-купратов сосуществуют в широком диапазоне их легирования от $x \approx 0.05$ до $x \approx 0.14$. При этом конкурирующие эффекты сосуществующих диэлектрических и сверхпроводящих фаз существенно влияют на высокотемпературную сверхпроводимость недолегированных ВТСП-купратов ($x \approx 0.05-0.14$). Как известно, критическая температура сверхпроводящего перехода дырочно-легированных ВТСП-купратов достигает максимального значения в оптимально легированном режиме $x \approx 0.15-0.16$. По нашему мнению, это связано с тем, что в оптимально легированных ВТСП-купратах все диэлектрические области переходят в металлическое состояние при $T > T_c$ или в сверхпроводящее состояние при $T < T_c$, т.е. диэлектрическая фаза больше не существует в оптимально легированном режиме. Однако при $x < 0.14$ уже появляются зародыши диэлектрической фазы в виде узких полос (см.рис.3, d) в некоторых местах кристаллической решетки ВТСП-купратов и при дальнейшем уменьшении уровня легирования увеличиваются диэлектрические области и начинают уменьшаться сверхпроводящие области. Поэтому сосуществование диэлектрических и сверхпроводящих областей (фаз) приводит к подавлению сверхпроводимости (T_c начинает уменьшаться) при $x \leq 0.13$ в недолегированных ВТСП-купратах. При этом заметное подавление сверхпроводимости в недолегированных ВТСП-купратах ожидается при $x \leq 1/8$ из-за заметного увеличения доли диэлектрического объема за счет уменьшения доли сверхпроводящего объема недолегированных ВТСП-материалов. Действительно, экспериментальные результаты подтверждают наши теоретические предсказания и показывают, что сверхпроводимость в недолегированных ВТСП-купратах заметно подавляется, когда часть динамических (металлических) полос/страйпов становится статической (т.е. диэлектрической) при $x \leq 1/8$. Диэлектрические области (фазы) будут исчезать в оптимально легированных ВТСП-купратах, в которых весь объем становится сверхпроводящим с максимальным значением T_c (см.рис.3, e).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам исследований, проведенных по теме докторской диссертации «Моттовские и новые металл-диэлектрик переходы в легированных высокотемпературных сверхпроводящих купратах», сделаны следующие основные выводы.

1. Вычислены энергии основных состояний дырок в легированных купратных соединениях в континуальной модели и адиабатическом приближении и определены возможные энергетические уровни водородоподобных примесей, больших поляронов и биполяронов в диэлектрической щели (т.е. запрещенной зоне) нелегированных купратов.
2. Показано, что образование локализованных примесных, поляронных и биполяронных состояний внутри запрещенной зоны купратных соединений ответственны за новые низкоэнергетические электронные структуры дырочно-легированных купратов, которые наблюдаются во многих экспериментах.
3. Показано, что в дырочно-легированных купратах примеси, имеющие большие ионные радиусы по сравнению с радиусом ионов основной решетки и отрицательные деформационные потенциалы ($E_{ad} < 0$), образуют водородоподобные примесные (т.е. акцепторные) центры. Процессы упорядочения таких примесных центров приводят к образованию их различных сверхрешеток и узких энергетических, которые лежат между верхней зоной Хаббарда и валентной зоной кислорода.
4. Построены адекватные количественные теории моттовских и новых металл-диэлектрик переходов, первая из которых происходящая только в слабо легированных купратах при уровнях легирования $x < x_c = 0.02 - 0.03$ вызвана сильной корреляцией носителей в узкой примесной зоне ВТСП-купратах, тогда как вторая происходящая в ВТСП-купратах широком интервале легирования начиная от слаболегированного до оптимально легированного режима вызвана сильным электрон-фононным взаимодействием (поляронным эффектом).
5. На основе точного определения энергии кулоновского отталкивания между двумя дырками, находящимися на одном и том же водородоподобном атоме или примесном центре, получены новые количественные критерии моттовского металл-диэлектрик перехода, применимые для изучения возможности металл-диэлектрик переходов, вызванных сильными электронными корреляциями (т.е. сильным кулоновским отталкиванием двух электронов или дырок, находящихся на одном и том же водородоподобном ионе или примесном центре) как в нелегированных, так и легированных твердых телах.
6. Определены пределы применимости моттовских металл-диэлектрик переходов в легированных купратах в условиях существования водородоподобных примесных центров и сильных электронных корреляций в узких примесных зонах.
7. Показано, что квазисвободные дырки, появляющиеся после легирования купратов, сильно взаимодействуют с окружающими ионами решетки, создавая деформированные участки решетки и притягательные

потенциальные ямы, в которых они захватываются с образованием локализованных поляронных состояний. При этом большие поляроны подобно водородоподобным примесным центрам образуют различные сверхрешетки, приводящие к образованию узких поляронных зон в запрещенной зоне купратов.

8. Сформулированы новые универсальные критерии металл-диэлектрик переходов в легированных полярных материалах, в которых металл-диэлектрик переходы, вызванные сильными дырочно-решеточными взаимодействиями, отличаются от известных моттовских и андерсоновских металл-диэлектрик переходов, причем эти новые металл-диэлектрик переходы и наномасштабное разделение диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз происходят в дырочно-легированных ВТСП-купратах при различных уровнях их легирования начиная от слабо легированного режима ($x=0.02-0.05$) до оптимально легированного режима ($x\geq 0.15$).
9. Выяснено, что температурная зависимость магнитной восприимчивости $\chi(T)$ легированных купратов проявляет три различных поведения: 1) диэлектрическое поведение при слабо легированном режиме $x\leq 0.05$; 2) необычные металлическое поведение в недолегированном режиме ($0.05 < x \leq 0.13$) и 3) обычное металлическое поведение в оптимально легированном режиме ($x\geq 0.15$).
10. Показано, что металл-диэлектрик переходы проявляются в температурных зависимостях удельного электрического сопротивления недолегированных ВТСП-купратов вдоль их c -оси $\rho_c(T)$ выше T_c и диэлектрическое поведение $\rho_c(T)$, связанное с термической диссоциацией больших локализованных биполяронов в отдельные поляроны между CuO_2 слоями и последующим прыжковым движением больших поляронов вдоль c -оси этих материалов, постепенно меняется в металлическое поведение в оптимально легированных ВТСП-купратах, когда энергия связи больших биполяронов, образующихся в областях между CuO_2 слоями, становится равным нулю.
11. Установлено, что подавление сверхпроводимости (т.е. уменьшение T_c) в недолегированных ВТСП-купратах вызвано конкурирующими эффектами сосуществующих диэлектрических и сверхпроводящих фаз и увеличением доли диэлектрических областей за счет уменьшения доли сверхпроводящих областей, причем уменьшение доли сверхпроводящего объема в образцах недолегированных ВТСП-купратов сопровождается уменьшением T_c .

**SCIENTIFIC COUNCIL No.DSc.02/30.12.2019.FM/T.33.01 ON AWARD
OF SCIENTIFIC DEGREES AT THE INSTITUTE OF NUCLEAR
PHYSICS**

INSTITUTE OF NUCLEAR PHYSICS

KURBANOV ULUGBEK TAJIBAEVICH

**MOTT AND NEW METAL-INSULATOR TRANSITIONS IN DOPED
HIGH-TEMPERATURE CUPRATE SUPERCONDUCTORS**

01.04.07 – Condensed matter physics

**DISSERTATION ABSTRACT
of the doctor of science (DSc) on physical and mathematical sciences**

Tashkent – 2020

The theme of the doctoral dissertation (DSc) was registered by the Supreme Attestation Commission of the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number B2017.2 FM60.

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

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

Scientific consultant:	Dzhumanov Safarali doctor of physical and mathematical sciences, professor
Official opponents:	Turaev Nazar Yuldashevich Doctor of physical and mathematical sciences, professor, Academician of the Academy of sciences of the Republic of Uzbekistan Imamov Erkin Zunnunovich Doctor of physical and mathematical sciences, professor Nuritdinov Izzatillo Doctor of physical and mathematical sciences, professor
Leading organization:	Tashkent State technical university named after Islam Karimov

The defense of the dissertation will be held on “___” _____ 2020, at ___ at the meeting of the Scientific Council No.DSc.02/30.12.2019.FM/T.33.01 at the Institute of Nuclear Physics (Address: INP, Ulugbek settlement, 100124 Tashkent city. tel. (+99871) 289-31-18; fax (+99871) 289-36-65; e-mail: info@inp.uz).

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

The abstract of dissertation was distributed on “_____” _____ 2020.
(Registry record No. ____ dated “___” _____ 2020).

M.Yu. Tashmetov
Chairman of the Scientific Council on award
of Scientific degrees, D.Ph.-M.S., professor

S.B. Igamov
Scientific secretary of the Scientific Council on award
of Scientific degrees, D.Ph.-M.S., Senior researcher

I. Nuritdinov
Chairman of the Scientific seminar of the Scientific Council
on award of Scientific degrees, D.Ph.-M.S., professor

INTRODUCTION (annotation of doctoral (DSc) dissertation)

Topicality and demand of the theme of dissertation. Currently, the study of new electronic properties of hole-doped high-temperature superconducting (HTSC) -cuprates, depending on the localization and delocalization of hole current carriers and metal-insulator transitions, is one of the most important problems of modern condensed matter physics. Experimental studies have shown that the electronic properties of underdoped and even optimally doped HTSC cuprates differ significantly from the electronic properties of ordinary insulators, metals, and superconductors. Unusual electronic properties of these materials are the distinctive behaviors of their transport and magnetic properties and critical temperatures of the superconducting transition T_c , without a clear understanding of which it difficult to achieve a complete understanding of their normal and superconducting properties.

As we studied HTS materials, it became clear that their unusual normal and superconducting properties mentioned above are associated with the localization of hole current carriers leading to metal-insulator transitions, the formation of insulator and metal/superconducting bands (phases), the nanoscale separations of these phases and the coexistence of insulator and metal/superconducting phases. Despite known advances in the study of localization processes of current carriers, Mott and other types of metal-insulator transitions in doped semiconductors and HTSC materials, consistent quantitative theories of these phenomena in doped HTSC materials still do not exist. Therefore, detailed studies of the mechanisms of localization of current carriers, Mott and other possible types of metal-insulator transitions in hole-doped HTSC cuprates are extremely relevant and very important for understanding their unusual insulator, metallic and superconducting properties.

In the Republic of Uzbekistan much attention is paid to the development of semiconductor and superconducting materials science. At the same time, special attention is paid to determining the nature of localized hole current carriers and possible mechanisms of metal-insulator transitions and nanoscale phase separation in doped HTSC cuprates. The directions of these fundamental research, which is of great importance for the development of science in our country and its further practical application are reflected in the Strategy³ of actions for the further development of the Republic of Uzbekistan for 2017-2021.

This dissertation research to a certain extent performs the tasks stipulated in Presidential Decrees of the Republic of Uzbekistan No. UP-4512 of 1 March 2013 “On further development of alternative energy sources”, No. UP-4947 of 7 February 2017 “On the Action Strategy for the Further Development of the Republic of Uzbekistan for 2017–2021”, and in the Resolution of the President of the Republic of Uzbekistan No. PP-2789 “On measures to further improve the activities of the Academy of Sciences, organization, management and financing of research activities” dated 17 February 2017, as well as in other legal documents adopted in this field.

³Decree of the President of the Republic of Uzbekistan “On the Strategy for the Further Development of the Republic of Uzbekistan” No.4947 of 07 February 2017

Relevance of the research to the priority areas of science and technology development of the Republic of Uzbekistan. The dissertation was carried out in accordance with the priority directions of science and technologies development: II. “Energetics, energy and resource saving”.

Review of international scientific researchers on dissertation subject. Scientific research in the physics of insulators and high-temperature superconductors (HTSC) is carried out in research centers, institutes and universities of leading countries, including Leiden University (Netherlands), Stanford University (USA), Argonn National Laboratory (USA), Cambridge University (England), University of Tokyo (Japan), University of Zurich (Switzerland), Laboratory of Neutron Scattering (Switzerland), Hokkaido University (Japan), Princeton University (USA), McMaster University (Canada), Joseph Fourier University (France), Brookhaven National Laboratory (USA), Max Planck Institute for Solid State Physics (Germany), Los Alamos National Laboratory (USA), China University of Science and Technology (China), Massachusetts Institute of Technology (USA), Landau Institute of Theoretical Physics (Russia), Lebedev Physical Institute (Russia), Institute of Solid State Physics (Russia), University of Rome (Italy), University of Antwerp (Belgium), Loughborough University (England), University of Naples (Italy), Institute of Theoretical Physics (China), Tokyo University of Science (Japan), Institute of Low-Temperature Physics and Technology B.I. Verkin (Ukraine), Institute of Physics (Estonia), Aktobe State University (Kazakhstan), Institute of Physical-Technical Problems and Materials Science (Kyrgyzstan).

As a result of studies of the electronic properties of hole-doped cuprates in the world, a number of interesting scientific results have been obtained, in particular: The idea of segregation and separation of electronic phases in HTSC materials (Landau Institute for Theoretical Physics, Russia); Various theoretical models of phase separation in the form of alternating bands of ordered spins and charge carriers in under-doped HTSC cuprates (University of Leiden, Netherlands; Brookhaven National Laboratory, USA; University of Rome, Italy); Detection of the striped phases of ordered spins and charge carriers in under-doped HTSC cuprates (Brookhaven National Laboratory, USA); The characteristic insulator behavior of the specific resistance of HTSC cuprates along the CuO_2 layers (i.e. the ab plane) and along the c axis are determined due to the localization of current carriers in underdoped and optimally doped modes, and the tendencies of a gradual changes in their insulator behavior associated with insulator-metal transitions and carrier delocalization (Los Alamos National Laboratory, USA; Tokyo University of Science, Japan; Institute of Solid State Physics, Russia; International superconductivity technology center, Japan); Similar and rather interesting experimental data were obtained according to which the temperature dependences of magnetic susceptibility, which also indicate metal-insulator transitions in underdoped and optimally doped HTSC cuprates, were unexpected and unusual compared to the magnetic susceptibility of ordinary metals (Iowa State University, USA; Hokkaido University, Japan; University of Cambridge, England); Valuable information was obtained on the suppression of superconductivity and the

coexistence of superconductivity and the localization effects of charge carriers during the transition from the optimally doped to underdoped mode in HTSC cuprates (Brookhaven National Laboratory, USA; Tohoku University, Japan).

At present, experimental and theoretical studies are being conducted in the world to determine the relationship between various electronic processes in hole-doped HTSC cuprates. In particular, studies are being conducted to solve the following key problems of HTS materials: determining the low-energy electronic structure of doped cuprates and the true nature of current carriers introduced into them by hole doping, elucidating the mechanisms of localization and delocalization of hole carriers, metal-insulator transitions, separation of insulator, metal and superconducting phases in lightly doped and underdoped cuprates, elucidation of the mechanisms of formation of various pseudogaps in these materials, determination of possible effects of localization of current carriers, metal-insulator transitions and nanoscale phase separation, various pseudogaps and other electronic processes on the normal and superconducting properties of hole-doped HTSC cuprates.

Degree of study of the problem. Questions about the localization of current carriers and metal-insulator transitions in various classes of solids have been investigated by many well-known scientists (L.D. Landau, S.I. Pekar, R. Feynman, R. Peierls, G. Frohlich, N.F. Mott, A. Wilson, T. Holstein, F.V. Anderson, J. Hubbard, J. Toyazova, D.M. Eagles, J. Devrees, D. Emin) for many decades. These problems date back to 1933, when Landau, explaining the properties of F-centers (anion vacancy with a trapped electron) in alkali-halide crystals, advanced the idea of electron self-trapping and by 1931-1958, when A. Wilson, N.F. Mott, F. Wigner, R. Peierls and F.V. Anderson was fed to explain the change in the delocalized state of electrons to the localized, put forward ideas about metal-insulator transitions when the fully filled valence band overlaps with the overlying unfilled zone (Wilson transition), a strong electron correlation the same atom or ion of the crystal lattice) (Mott transition), crystallization of the electron gas (Wigner transition), distortion of the one-dimensional crystal lattice and doubling of the period of sieves and (Peierlstransition) and lattice disorder (Anderson transition).

The following years, these early ideas were used and developed in the study of the phenomenon of localization and delocalization of charge carriers and metal-insulator transitions in various classes of solids, in particular, oxide materials and doped semiconductors. At the same time, the ideas of the Mott and Anderson metal-insulator transitions were significantly developed in studies of oxide insulators and doped semiconductors conducted abroad in the field of physics (J. Hubbard, O. Madelung, M.I. Klinger, J. R. Kullen, E.R. Cullen, J. Kanamor, J. Zaanen, G.A. Savatsky, J.V. Allen, B.I. Shklovsky, A.L. Efros, G. Kotliar, V. Dobrosavlzhevik). After the discovery of new doped copper-oxide (cuprate) high-temperature superconductors, research is being conducted on the problems of localization of current carriers and metal-insulator transitions in these complex materials using various methods and approaches (M. Imada, P. Clemeriale, J. Fink,

A.N. Lavrov, V.F. Gantmakher, G.S. Boebinger, J. Endo, S. Castellani, P.A. Magetta, J. B. Su, Yu Li, S. Ono).

Despite the fact that theoretical studies of the electronic properties of hole-doped HTSC cuprates, the mechanisms of localization and delocalization of hole current carriers and possible metal-insulator transitions in these materials have not been clarified. Since the questions about the adequate quantitative criteria of Mott and other metal-insulator transitions remained unresolved. In particular, the limits of applicability of the criteria for Mott and other possible metal-insulator transitions in doped cuprates have not been defined and the theory of these phenomena has not yet been constructed. In theoretical studies on transitions of current carriers and metal-insulator transitions in HTSC materials devoted to the study of the effects of unusual electron-phonon interactions and polaron effects remained unexplored.

Connection of the topic of the dissertation research with the plans of the scientific-research works of the scientific research institution, where the dissertation was conducted. The dissertation research has been carried out within the framework of the scientific projects of the Institute of Nuclear Physics: FA-F2-F075+F070 “Studies of specific electrical, thermal and mechanical properties of reactor materials and high-temperature superconductors” (2007-2011); Φ 2- Φ A- Φ 120 “Electronic properties and radiation modification of low-dimensional high-temperature superconductors, semiconductor heterostructures, metals and their oxides” (2012-2016); OT-F2-15 “Theoretical studies of new superconducting and superfluid properties of high-temperature superconductors and related condensed systems” (2017-2021).

The aim of the research is to determine the mechanisms of localization of current carriers and the mechanisms of Mott and new metal-insulator transitions and nanoscale phase separations in doped high- T_c cuprates.

The tasks of the research:

to investigate the mechanisms of localization of hole carriers near impurities and in a deformed crystal lattice of lightly doped cuprates;

to determine the possibility of the formation of hydrogen-like localized states and polaron states that appearing inside the energy gap of charge transfer (i.e. in the forbidden zone) of cuprates, which are called localized intragap states;

to investigate the specific mechanisms of the Mott metal-insulator transitions realized in hole-doped HTSC cuprates;

to study new mechanisms of metal-insulator transitions caused by unusual carrier-phonon interactions and realized in variously doped cuprates;

to elucidate the mechanisms of hole carrier segregation in doped HTSC cuprates, leading to the formation of layers saturated and depleted by carriers with an inhomogeneous spatial distribution of charge carriers localized at impurity centers and in a deformable lattice;

to determine the possibility of manifestations of metal-insulator transitions and nanoscale separations of insulator and metallic phases in unusual behaviors of magnetic susceptibility and electrical resistance above T_c and in the mechanisms of high-temperature superconductivity of underdoped cuprates.

The object of the research is lightly doped cuprates $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ (LBCO), $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO) and $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO), under-doped and optimally doped with HTS-cuprates LBCO, LSCO and YBCO.

The subject of the research is the processes of localization and delocalization of hole current carriers, Mott and new metal-insulator transitions, nanoscale separation of insulator, metallic and superconducting phases in lightly doped cuprates, underdoped and optimally doped HTSC cuprates.

The methods of the research. Variational methods, the use of the adiabatic approximation and the continual model of the intrinsic and improper self-trapping of carriers, the strong coupling method, computer graphics (Mathematica).

The scientific novelty of the dissertation research is as follows:

the energies of the ground states of holes in doped cuprate materials and the energy levels of hydrogen-like impurities, large polarons and bipolarons formed in the band gap of undoped cuprates have been determined;

an adequate quantitative theory of Mott metal-insulator transitions in lightly doped cuprates, caused by a strong correlation of carriers in a narrow impurity band of HTSC cuprates, was developed;

the mechanisms of new metal-insulator transitions caused by strong hole-phonon interaction in doped HTSC cuprates were proposed for the first time, and criteria for such metal-insulator transitions were obtained;

a detailed quantitative theory of new metal-insulator transitions in hole-doped HTSC cuprates, caused by strong hole-phonon interaction, is developed and the possibilities of their implementation in lightly doped cuprates, underdoped and optimally doped HTSC cuprates are shown;

elucidated microscopic mechanisms of nanoscale separation of dielectric, metallic and superconducting phases in lightly doped cuprates, underdoped and optimally doped HTSC cuprates;

for the first time the possibility of coexistence of competing dielectric, metallic and superconducting phases in doped cuprate materials has been shown, which is the true reason for the suppression of superconductivity in HTSC cuprates during the transition from the optimally doped to the underdoped regime;

for the first time, analytic expressions were obtained that adequately describe the temperature dependences of the magnetic susceptibility of lightly doped cuprates, underdoped and optimally doped HTSC cuprates and explaining the reasons for the origin of various anomalies in the temperature dependences of the magnetic susceptibility;

the possibility of manifestation of metal-insulator transitions and various pseudogaps in the temperature dependences of the magnetic susceptibility and electrical resistance of lightly doped cuprates, underdoped and optimally degenerated HTSC cuprates is shown.

The practical results of the research are as follows:

developed the theory of Mott and new metal-insulator transitions in doped materials;

formulas for the criteria for new metal-insulator transitions in doped oxide semiconductors and insulators were obtained;

new formulas have been obtained for determining the magnetic susceptibility of lightly doped, underdoped, and optimally doped oxide semiconductors and insulators.

The reliability of the research results is confirmed by the use of proven mathematical methods and theoretical approaches, such as variational and strong coupling methods, a continuous solid model for describing carrier self-trapping near impurities and in a deformable lattice, the Mott-Hubbard model, which allows describing the effects of strong electron correlation in narrow impurity zones, as well as the coincidence of the results obtained with existing experimental data.

The scientific and practical significance of the research results. The scientific significance of the research results lies in the fact that they contribute to the expansion of physical ideas about the localization and delocalization of hole current carriers, metal-insulator transitions and nanoscale separations of electronic phases.

The practical significance of the research results is that the developed theories of Mott and new metal-insulator transitions in doped HTSC materials can be used in the development of the physical fundamentals of semiconductor and superconducting materials science and allow us to predict possible ways to create oxide HTSC materials with improved electronic properties, in particular, with high critical temperatures of the superconducting transition T_c .

Implementation of the research results. Based on the scientific results obtained on the study of Mott and new metal-insulator transitions in doped high-temperature superconducting cuprates:

the results of determining the energy of the ground states of holes in doped cuprate materials and the energy levels of hydrogen-like impurities, large polarons and bipolarons were used in the framework of the target scientific and technical Program "Development of hydrogen energy technologies" (Letter of the L.N. Gumilyov Eurasian National University No. 03- 02-12/704 dated 02.14.2019). The use of new scientific results made it possible to improve the technical characteristics of functional thermoelectric and nanocomposite materials for the technology of hydrogen energy under various conditions;

the developed adequate quantitative theories of Mott and new metal-insulator transitions in lightly doped cuprates and HTSC cuprates in a wide doping range were used in the performance of research work within the framework of the state order under the budget program on topics No. 0113RK00953 "Development of technology for controlling the physical properties of alkali superconducting materials with a decrease in the lattice symmetry" (2012-2017) and No. 0115RK01111" Technology for controlling the mechanism of transformation of the energy of ionizing radiation in alkali-halide scintillator crystals" (2012-2017) (Letter from the Aktobe Regional State University named after K. Zhubanov No. 21-13/569 dated 02.15.2019). The use of new theoretical results has made it possible to explain various electronic processes occurring in superconducting materials with reduced lattice symmetry;

the proposed mechanisms of new metal-insulator transitions and microscopic mechanisms of nanoscale separation of insulating, metallic and superconducting phases in lightly doped cuprates, underdoped and optimally doped HTSC cuprates, as well as the revealed possibility of coexistence of competing insulating, metallic and superconducting phases in doped cuprate materials were used in within the framework of the research project No. 0115RK02715 "Development of new carbon nanomaterials for a wide range of applications" in the study of unusual electronic properties of nanocomposite materials (Letter No. 19-9-396 of the Kazakh National University named after al-Farabi dated 12.02.2019). The use of new scientific results made it possible to explain the physical processes occurring in composite materials during insulating-metal and metal-carbon transitions, as well as during the development and research of nanomaterials;

the results of theoretical studies on the effect of metal-insulator transitions and various pseudogaps on the temperature dependences of the magnetic susceptibility and electrical resistance of lightly doped cuprates, underdoped and optimally doped HTSC cuprates were used within the framework of the research project "Investigation of magnetization and electrical resistance in magnetic superconductors FeSexTe_{1-x} and $\text{ErFexCo}_{1-x}\text{As}_2$, RE ($\text{Rh}_x\text{Ru}_{1-x}$) 4B4 in magnetic fields up to 14 T "(2013–2017) (Letter from the BI Verkin Physico-Technical Institute for Low Temperatures of the National Academy of Sciences of Ukraine No. 64/92 dated 12.02. 2019). The use of new scientific results has made it possible to explain the peculiarities of the behavior of the pseudogap in magnetic high-temperature superconductors.

Testing of the research results. The main results of the dissertation were reported and discussed at 9 international and 3 republican scientific and practical conferences.

Publication of the research results. On the topic of the thesis 25 scientific works were published, 13 scientific articles, 5 of them in foreign scientific journals, recommended by the Higher Attestation Commission of the Republic of Uzbekistan for publication of the main scientific results of doctoral theses.

Volume and structure of the dissertation. The dissertation consists of an introduction, five chapters, conclusion, list of references and contains 148 pages.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (Часть I; Part I)

1. Джуманов С., Ганиев О.К., Джуманов Ш.С., Курбанов У.Т. Роль поляронных эффектов в необычных туннельных спектрах ВТСП купратов // Доклады Академии наук Республики Узбекистан.– Ташкент, 2013.– № 1.– С.30–33 (01.00.00. №7).
2. Dzhumanov S., Karimboev E.X., Kurbanov U.T., Ganiev O.K., DjumanovSh.S. Temperature-independent pseudogap and thermally activated *c*-axis hopping conductivity in layered cuprate superconductors//Superlattices and Microstructures.- Elsevier: Holland, 2014.- vol.68.-pp.6-15 (№ 39. Impact Factor Search; IF = 2.099).
3. Dzhumanov S., Karimboev E.X., Kurbanov U.T., Ganiev O.K., DjumanovSh.S., Khudayberdiev Z.S. Nanoscale phase separation and thermally activated *c*-axis hopping conductivity in layered cuprate superconductors//Uzbek Journal of Physics. -Ташкент, 2014.- Vol.16, №3.- С.187-196 (01.00.00. №5).
4. Dzhumanov S., Kurbanov U. The new metal-insulator transitions and nanoscale phase separation in doped cuprates//Superlattices and Microstructures.- Elsevier: Holland, 2015.- V. 84.-pp.66-71 (№ 39. Impact Factor Search; IF = 2.099).
5. Джуманов С., Курбанов У., Худайбердиев З.С., Хафизов А.. Металл-диэлектрик переходы и магнитная восприимчивость в легированных купратных соединениях//Физика низких температур.– Харьков, 2016.–Т. 42, No 11.–С.1345–1353; DzhumanovS., KurbanovU.T., KhudayberdievZ.S., HafizovA. Metal-insulator transitions and magnetic susceptibility in doped cuprate compounds//Low Temperature Physics.-American Institute of Physics (USA), 2016.- V.42, №11.-pp.1057-1062 (№ 39.ImpactFactorSearch; IF = 0.86).
6. Явидов Б.Я., Курбанов У.Т., Джуманов С., Каримбаев Э.Х. Влияние одноосного напряжения на температуру Бозе–Эйнштейновской конденсации биполярных носителей в слоистых ВТСП-купратах// Доклады Академии наук Республики Узбекистан.–Ташкент, 2016.– №3.– С.18–21 (01.00.00. №7).
7. Джуманов С., Курбанов У.Т., Явидов Б.Я. Механизмы локализации носителей заряда и магнитная восприимчивость в легированных купратах//Доклады Академии наук Республики Узбекистан.–Ташкент, 2017.– №3.–С. 23–26 (01.00.00. №7).
8. Dzhumanov S., Kurbanov U.T. The coexistence of insulating and metallic/superconducting phases and their competing effects in various underdoped cuprates//Modern Physics Letters B.- World Scientific

- (Singapore), 2018.-vol.32, N 26.-id.1850312.-10 p. (№ 39. Impact Factor Search; IF = 0.731).
9. Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Rashidov J.Sh. Coexisting insulating and metallic/superconducting phases and their role in normal state properties of underdoped cuprates// Доклады Академии наук Республики Узбекистан.-Ташкент, 2018.- №3.- С.22-27 (01.00.00. №7).
 10. С. Джуманов, У.Т. Курбанов, З.С. Худайбердиев. Возможные металл-диэлектрик переходы и наноразмерное разделение фаз в дырочно-легированных купратах// Доклады Академии наук Республики Узбекистан.- Ташкент, 2018.- №6.-С.14-20 (01.00.00. №7).
 11. Dzhumanov S., Khidirov I., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Rashidov J.Sh. Distinctive features of metal-insulator transitions, multiscale phase separation, and related effects in hole-doped cuprates// Ukrainian Journal of Physics.-Kyiv, 2019.-vol.64, No.4.-P. 322-335. (№ 39. Impact Factor Search; IF = 0.51).

II бўлим (Часть II; Part II)

12. Dzhumanov S., Kurbanov U. Metal-insulator transitions in cuprate high-temperature superconductors//Eurasian Physical Technical Journal.-Karaganda, 2017.- Vol.14, No.1 (27).-pp. 49-55.
13. Dzhumanov S., Kurbanov U.T. Metal-insulator transitions and nanoscale phase separation in various underdoped cuprates//Eurasian Journal of Physics and Functional Materials.- Astana, 2018.- vol.2, No.3.-pp.219-230.
14. Dzhumanov S., Ganiev O.K., Khudayberdiev Z.S., Kurbanov U.T. Carrier localization, metal-insulator transitions and stripe formation in inhomogeneous hole-doped cuprates//«Fundamental and applied questions of physics»: Book of Abstracts of the conference, dedicated to 80th anniversary of academician M.S. Saidov 24-25 November, 2010.- Tashkent- 2010.- pp. 337-339.
15. Dzhumanov S., Ganiev O.K., Khudayberdiev Z.S., Karimboev E.X., Kurbanov U.T. Metal-insulator transitions and stripe formation in cuprates//“Nuclear Science and Its Applications”: Book of Abstracts of the International Conference September 25-28, 2012. – Samarkand, 2012.- p.282.
16. Dzhumanov S., Ganiev O.K., Djumanov Sh.S., Kurbanov U.T., Karimboev E.X., Khudayberdiev Z.S. Normal-state charge transport properties of high- T_c cuprates//“Physics and Ecology”: Book of Abstracts of the Republican scientific-practical conference 11-12 December 2013.- Nukus, 2013. -p.26-27.
17. Kurbanov U.T., Ganiev O.K. Carrier localization and Mott metal-insulator transitions in hole-doped cuprates// Сборник тезисов докладов Республиканской научно-практической конференции молодых ученых посвященной 70-летию Академии наук Республики Узбекистан, 26 Декабря 2013.- Ташкент, 2013.- С.116.
18. Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S. Metal-insulator transitions in doped high temperature cuprate superconductors//«Nuclear

- Science and its Application»: Book of Abstracts of the VII Eurasian Conference October 21-24, 2014.- Vaku, 2014.- pp.255-256.
19. Курбанов У., Худайбердиев З.С., Каримбаев Э., Джуманов С. Возможные металл-диэлектрик переходы и наноразмерное разделение фаз в дырочно-легированных купратах//«Современные материалы и технологии»: Сборник докладов Международной конференции 21–23 Октября, 2015.– Тбилиси, 2015.– С.195–199.
 20. Dzhumanov S., Kurbanov U.T. Possible mechanisms of carrier localization and metal–insulator transitions in hole-doped cuprates//“Nuclear and radiation physics”: Reports of the 10th International conference September 8-11, 2015. – Kurchatov, 2016. – p. 129-134.
 21. Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Imamberdiyev S.S. The metal-insulator transitions and nanoscale phase separation and their manifestations in electronic properties of doped high- T_c cuprate superconductors// Хозирги замон аниқ ва техник фанлар муаммолари ва уларнинг ечимлари-Республика илмий-назарий анжуман Материаллари II бўлим, Нукус, 2017й.-б.42-43.
 22. Dzhumanov S., Kurbanov U.T. The metal-insulator transitions and nanoscale phase separation and their manifestations in electronic properties of doped high- T_c cuprate superconductors//«Nuclear Science and Technologies»: Book of Abstracts of the International Scientific Forum dedicated to the 60th anniversary of the Institute of Nuclear Physics, September 12-15, 2017.- Almaty, 2017.- pp.215.
 23. Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Rashidov J.Sh. The coexisting insulating and metallic/superconducting phases and their manifestations in various underdoped cuprates//Book of Abstracts of the Seventh International Conference on Physical Electronics IPEC-7 May 18-19, 2018.-Tashkent, 2018.- pp. 129.
 24. Джуманов С., Курбанов У.Т. Сосуществующие диэлектрические и металлические/сверхпроводящие фазы и их конкурирующие эффекты в различных недолегированных купратах//Физика твердого тела, Функциональные материалы и новые технологии (ФТТ-2018): Материалы XIV Международной научной конференции, посвященной 80-летию основателя конференции профессора Т.А. Кукетаева, 1–4 августа 2018 г.– Бишкек–Караганда, 2018.– С.42–45.
 25. Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Rashidov J.Sh. Nanoscale phase separation and coexisting insulating, metallic and superconducting phases in underdoped cuprates// Materials and Mechanisms of superconductivity and high temperature superconductors-Book of Abstracts of the 12th International Conference August 19-24, 2018. -Beijing, China, 2018.- pp. 717.

Илмий маслахатчи

С. Джуманов

Талабгор

У.Т. Курбанов