АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

На правах рукописи
УДК 537.312.62; 538.945

ДЖУМАНОВ ШЕРЗОД САФАРАЛИЕВИЧ

ПСЕВДОЩЕЛЕВЫЕ ЯВЛЕНИЯ И РАЗРАБОТКА МОДЕЛЕЙ ВЛИЯНИЯ ИЗОТОПИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ НА ТЕМПЕРАТУРУ ОБРАЗОВАНИЯ ПСЕВДОЩЕЛИ В КУПРАТНЫХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

01.04.07 – физика конденсированного состояния

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени доктора философии (PhD)

по физико-математическим наукам

Научный консультант: Оксенгендлер Борис Леонидович
доктор физико-математических наук

Ташкент – 2020

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ……	6
ГЛАВА I. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА НЕЛЕГИРОВАННЫХ И ЛЕГИРОВАННЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ……	17
§1.1. Классификация твердых тел по химическим связями электрической проводимости ……..	17
§1.2. Обычная одноэлектронная зонная структура в кристаллических твердых телах ……..	24
§1.3. Зонная структура нелегированных купратов……..	30
§1.4. Одноэлектронная зонная теория……	33
§1.5. Сильные электронные корреляции ……	35
§1.6. Низкоэнергетическая электронная структура слабо легированных купратов……..	40
§1.7. Низкоэнергетические электронные структуры и псевдощелевые особенности недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных купратов……...	41
§1.8. Изотопическиеэффектыв легированных ВТСП-купратах ……..	44
§1.9. Цель и задачи исследования	47
ГЛАВА II. ПСЕВДОЩЕЛЕВЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ЛЕГИРОВАННЫХ ВТСП-КУПРАТНЫХ $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ И $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ СОЕДИНЕНИЯХ……..……	49
§2.1. Образование неспаривательной поляронной псевдощели при промежуточных уровнях легирования купратов……	51
§2.2. Прекурсивное БКШ-подобное спаривание больших поляронов и образование температурно зависящей спаривательной псевдощели в купратных соединениях на основе лантана и висмута ……	57
§2.3. Концентрационные зависимости БКШ-подобной псевдощели и температура ее образования в лантановых и висмутовых ВТСП-купратах	69

§2.4. Фазовая диаграмма нормальных состояний ВТСП-купратов и псевдощелевая квантовая критическая точка ……...	72
Выводы к главе II ……...	76
ГЛАВА III. АНОМАЛЬНЫЕ ИЗОТОПИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В НОРМАЛЬНОМ СОСТОЯНИИ КУПРАТНЫХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ…….	78
§3.1. Изотопический эффект на критическую температуру сверхпроводящего перехода в обычных металлических сверхпроводниках ……...	78
§3.2. Аномальный изотопический эффект на температуру образования БКШ-подобной спаривательной псевдошели в ВТСП-купратах ……...	80
§3.3. Аномальные изотопические эффекты на температуру образования псевдощели в ВТСП-купратах с большими энергиями Ферми …….....	87
§3.4. Характерные кислородныеимедные изотопические эффекты на температуры образования псевдощели в сильно недолегированных ВТСП-купратахс малыми Ферми поверхностями ……..	95
§3.5. Изотопические эффекты на критической температуры сверхпроводящего перехода в сильно сверхлегированныхкупратах ……	100
Выводы к главе III ……	103
ЗАКЛЮЧЕНИЕ …….....	105
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ ……...	108

ОСНОВНЫЕ УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

Купраты – медно-оксидные соединения

СП – сверхпроводимость

ВТСП – высокотемпературная сверхпроводимость

LSCO- $La_{2-x}Sr_xCuO_4$

Bi-2212 – $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$

T^*- температура образование псевдощели

T_c– температура сверхпроводящего перехода

E_F – энергия Ферми нелегированных купратов

E_p–энегия связи больших поляронов

E_c –энергия кулоновского отталкивания между двумя большими поляронами

Δ_p – поляроннаяпсевдощель

V_{ph}– притягательный потенциал эффективного взаимодействия между поляронами

V_c–отталкивательный кулоновский потенциал взаимодействия между поляронами

λ^*-БКШ-подобная константа связи

m^* – эффективная масса свободного носителя заряда

n_p – концентрация поляронов

x_c – критическая концентрация носителей или легирования (безразмерной единице) при которой происходит ионизация примесного центра

U_d – энергия кулоновского отталкивания на одном и том же узле решетки

α- безразмерная константа фрелиховской электрон-фононной связи

ε_∞ – высокочастотная диэлектрическая проницаемость

ε_0 – статическая диэлектрическая проницаемость

$\tilde{\varepsilon}$- эффективная диэлектрическая проницаемость

K – упругая постоянная решетки

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность и востребованность темы диссертации. В настоящее время изучение псевдощелевых явлений в нормальном состоянии (т.е. выше критической температуры сверхпроводящего перехода T_c) и механизма высокотемпературной сверхпроводимости в легированных медно-оксидных (купратных) соединениях остается одним из важнейших направлений современной физики конденсированного состояния. Интерес к изучению новой физики этих высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) возрастает, несмотря на небывалое количество исследований в данной области. Это, прежде всего, связано с тем, что ВТСП-материалы уже широко используются в различных отраслях техники и энергетики. Несмотря на то, что интенсивные теоретические и экспериментальные исследования легированных ВТСП-купратов продолжаются вот уже более трех десятилетий, нет еще достаточной ясности в отношении понимания природы необычной высокотемпературной сверхпроводимости в этих материалах в недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных режимах. На сегодняший день не представляется возможным вияснить микроскопическую теорию высокотемпературной сверхпроводимости без полного понимания природы необычных свойств таких легированных ВТСП-систем в нормальном псевдощелевом состояний. Существующие экспериментальные данные свидетельствуют о том, что нормальные свойства купратов в недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных режимах сильно отличаются от таких свойств обычных металлов и сверхпроводников. В этих режимах легирования в купратах наблюдаются многочисленные аномалии их электронных свойств в нормальном состояний (выше T_c), связанные с падением плотности состоянии или образованием псевдощели вблизи уровня Ферми. При этом наиболее спорными и ключевыми вопросами физики ВТСП-материалов являются вопросы появления псевдощелей в спектрах их возбуждения ниже

некоторой характеристической температуры, новых изотопических эффектов на температуре образования псевдощели и связи псевдощелевых явлений с явлением высокотемпературной сверхпроводимости. Предпринимались многочисленные попытки описать псевдощелевые явления и новые изотопические эффекты на температуру образования псевдощели в ВТСП-купратах в рамках различных теоретических подходов, основанных на модифицированных вариантах модели Хаббарда (т.е. на сильной электронной корреляции, которые могут существовать только в нелегированных купратах), на модели упорядочения носителей зарядов и образования страйпов и на модели малых (би)поляронов, многие из которых часто пренебрегают необычными электрон-фононными взаимодействиями, присущими к этим полярным материалам. Однако, такие попытки наталкиваются на значительные трудности при описании псевдощелевых явлений и необычных изотопических эффектов на температуру образования псевдощели в ВТСП-материалах. Поэтому исследование ключевых проблем физики ВТСП-систем, а именно, псевдощелевых аномалий и новых изотопических эффектов в двух классах купратных соединений $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ($LSCO$) и $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ ($Bi-2212$), которые являются модельными системами, особенно при существующих неясностях их причины происхождения, представляет очень большой интерес и является весьма актуальным. Данная диссертационная работа посвящена решению этих фундаментальных проблем в рамках новых теоретических подходов.

В Республике Узбекистан большое внимание уделяется развитию физики конденсированного состояния (в частности, физики полупроводников и ВТСП) и проведению фундаментальных исследований в этом направлении на мировом уровне. При этом особое внимание уделяется определению природы псевдощелевые аномалий и новых изотопических эффектов в двух классах купратных соединений $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ($LSCO$) и $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ ($Bi-2212$), которые являются модельными системами 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.[1]

Данное диссертационное исследование в определенной степени будет выполнять задачи, предусмотренные в постановлениях Президента Республики Узбекистан УП-4947 «О Стратегии действии по дальнейшему развитию Республики Узбекистан на 2017-2021-гг» от 7февраля 2017года, ПП-2772 «О приоритетных направлениях развития электротехнической промышленности в 2017-2021 годах» от 13 февраля 2017 года, ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года, а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики Узбекистан. Диссертационное исследование выполнено в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий в Республике Узбекистан II. “Энергетика, энергосбережение и альтернативные источники энергии”.

Степень изученности проблемы. Псевдощелевые состояния в легированных ВТСП-купратах исследуются теоретически и экспериментально многими учеными ведущих научных центров мира, например, американскими (P.W. Anderson, J.R. Schrieffer, D. Pines, S.A. Kivelson, P.A. Lee, C.M. Varma и др.), английскими (A.S. Alexandrov, V.J. Emery, T. Rice и др.), индийскими (G. Baskaron и др.), российскими (A.I. Larkin) и другими. Однако, в этих работах, не рассматриваются сильные и необычные электрон-фононные взаимодействия и связанные с ними поляронные эффекты, которые играют важную роль в ВТСП-купратах.

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

В различных экспериментах обнаружены необычные изотопические эффекты температуры образования куперовских пар и БКШ-подобной щели (псевдощели) $T^* > T_c$, которые рассмотрены многими авторами, например, российскими (M.V. Eremin, I.M. Eremin, S.V. Varlamov), итальянскими (C.Di. Castro, M. Grilli), английскими (A.R. Bishop) и другими. Ими даны различные объяснения с участием поляронов, тем не менее в настоящее время нет адекватной количественной теории, которая сможет объяснить все наблюдаемые экспериментальное данные.

Несмотря на огромное количество теоретических и экспериментальных исследований, до сих пор не выяснена природа псевдощелевых явлений, происходящих в различных недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратах, а также истинные причины происхождения новых изотопических эффектов на температуре образования псевдощели T^*.

Связь темы диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертация. Диссертационное исследование выполнено в рамках научно-исследовательских проектов Института ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан по темам: ФА-Ф2-ФО70 “Исследование необычных транспортных, тепловых и упругих свойств легированных купратных высокотемпературных сверхпроводников $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ выше температуры сверхпроводящего перехода” (2007-2011); Ф2-ФА-Ф120 “Электронные свойства и радиационная модификация низкоразмерных высокотемпературной сверхпроводимости, полупроводниковых гетероструктур, металлов и их оксидов” (2012-2016); ОТ-Ф2-15 “Теоретические исследования новых сверхпроводящих и сверхтекучих свойств высокотемпературных сверхпроводников и родственных конденсированных систем” (2017-2020).

Целью исследования является разработка детальных микроскопических моделей образования псевдощелей и определение новых изотопических

эффектов температуры образования БКШ-подобной псевдощели в модельных купратных высокотемпературных сверхпроводниках.

Для достижения поставленной цели сформулированы следующие **задачи исследования:**

изучить низкоэнергетические электронные структуры дырочно легированных купратов и образование поляронной зоны внутри энергетической щели переноса заряда и поляронной (неспаривательной) псевдощели вблизи уровня Ферми квазисвободных дырочных носителей;

развить теории куперовского спаривания поляронных носителей и образования БКШ-подобных энергетических щелей, которые появляются как псевдощели в нормальном состоянии недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратов $LSCO$ и $Bi-2212$, имеющих разные (малые и относительно большие) поверхности Ферми;

получить явные аналитические выражения для характеристической температуры образования БКШ-подобной псевдощели T^* и определить зависимость T^* от концентрации поляронных носителей и от массы изотопов кислорода и меди в ВТСП-купратах;

определить изотопические сдвиги температуры образования БКШ-подобных псевдощелей T^* при замещениях изотопов кислорода ($^{16}O \rightarrow {}^{18}O$) и меди ($^{63}Cu \rightarrow {}^{65}Cu$) в различных ВТСП-купратах при разных уровнях их легирования;

получить явные аналитические выражения для коэффициентов кислородных ($\alpha_{T^*}^{O}$) и медных ($\alpha_{T^*}^{Cu}$) изотопических эффектов на T^* в ВТСП-купратах и вычислить эти коэффициенты как функции основных параметров ВТСП-материалов (таких, как массы атомов кислорода M_O и меди M_{Cu}, эффективной диэлектрической проницаемости $\tilde{\varepsilon}$, упругой постоянной решетки β, энергия оптических фононов $\hbar\omega_{LO}$ и концентрация носителей тока n);

продемонстрировать экспериментальные подтверждения теоретически предсказанных температур образования псевдощели T^*, изотопических сдвигов

ΔT_O^* и ΔT_{Cu}^*, и коэффициентов изотопических эффектов $\alpha_{T^*}^O$ и $\alpha_{T^*}^{Cu}$ путем сравнения расчетных значений этих физических величин с их экспериментальными значениями в различных ВТСП-купратах.

Объектом исследования являются недолегированные, оптимально легированные и умеренно сверхлегированные ВТСП-купраты.

Предметом исследования являются новые псевдощелевые явления и изотопические эффекты температуры образования псевдощелей T^* в ВТСП-купратах при различных уровнях их легирования.

Методы исследований математический аппарат квантовой и статической механики, поляронная модель, БКШ-подобный метод среднего поля, численные методы.

Научная новизна диссертационного исследования заключается в следующем:

развита количественная концепция происхождения псевдощелевых явлений в недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных купратах $LSCO$ и $Bi-2212$ в рамках модели больших поляронов и модифицированной БКШ-подобной модели прекурсивного спаривания поляронных носителей выше T_c в этих необычных ВТСП-материалах;

показано, что поляронная псевдощель Δ_p в спектрах возбуждения в ВТСП-купратах $LSCO$ и $Bi-2212$ образуется при сыльных электрон-фононных взаимодействиях и промежуточных уровнях легирования и проявляется при температурах ниже характерной температуры диссоциации больших поляронов T_p;

установлено, что БКШ-подобная псевдощель Δ^* образуется в спектрах возбуждения недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратов $LSCO$ и $Bi-2212$ при куперовском спаривании больших поляронов выше T_c;

полученых характерные фазовые диаграммы нормальных состояний ВТСП-купратов $LSCO$ и $Bi-2212$ и показаны возможности существования двух различных характеристических температур T_p и T^* выше T_c;

получены новые аналитические выражения для температуры образования БКШ-подобной псевдощели T^* в ВТСП-купратах с большими и малыми поверхностями Ферми, а также аналитические выражения для T^*, для изучения изотопических эффектов на T^*;

получены новые аналитические выражения для вычисления коэффициентов кислородного $\alpha_{T^*}^{O}$ и медного $\alpha_{T^*}^{Cu}$ изотопических эффектов на T^* в ВТСП-купратах.

Практические результаты исследования заключаются в следующем:

разработан микроскопический подход, хорошо описывающий основные свойства псевдощелевого состояния ВТСП-купратов и новые изотопические эффекты температуры образования псевдощели в различных типах ВТСП-материалов.

Достоверность результатов исследования подтверждается применением методов квантовой механики и теоретической физики, а также БКШ-подобного метода среднего поля при выводе новых формул для псевдощели и температуры образования псевдощели, совпадением полученных результатов с экспериментальными данными.

Научная и практическая значимость результатов исследования. Научная значимость результатов исследования заключаются в том, что они способствуют расширению физических представлений о псевдощелевых явлениях и изотопических эффектах в легированных купратных сверхпроводниках и других родственных материалах.

Практическая значимость результатов исследования заключается в том, что развитие модельных представлений об образовании псевдощелей и изотопических эффектов температуры образования псевдощели в легированных

ВТСП-купратах позволяет существенно продвинуться вперед при разработке теории псевдощелевых явлений и высокотемпературной сверхпроводимости.

Внедрение результатов исследования. На основе полученных результатов по исследованию псевдощелевых явлений и изотопических эффектов температуры образования псевдощели в купратных высокотемпературных сверхпроводниках:

развитая количественная концепция происхождения псевдощелевых явлений и изотопических эффектов температуры образования псевдощелей в модельных ВТСП-купратах $LSCO$ и $Bi-2212$, а также полученные аналитические выражения для их вычисления были использованы для изучения необычных электронных свойств полимерных композитных материалов в рамках научно-исследовательского проекта “Улучшение физико-химических свойств полимерных композитных материалов при введении в полимерную матрицу микроразмерных минеральных наполнителей” (2013-2017) (письмо Актюбинского регионального государственного университета им. К. Жубанова № 21-13/753 от 04.03.2019). Использование научных результатов позволило объяснить щелевые (псевдощелевые) особенности этих материалов;

полученные результаты по образованию псевдощелей в ВТСП-купратах и новых изотопических эффектов температуры образования псевдощелей, а также аналитические выражения для их изучения использованы зарубежными исследователями (ссылки в зарубежных журналах International Journal of Physics B, 2019; International Journal of Physics B, 2018 International Journal of Physics B, 2016; International Journal of Physics B, 2015). Использование научных результатов позволило определить природу изотопических эффектов температуры образования псевдощелей в различных типах ВТСП-материалов.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на 3 международных и 4 республиканских конференциях

Публикация результатов исследований. По теме диссертации опубликовано 12 научных работ, из них 4 статьи в журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов диссертации, в том числе 2 в зарубежных

Структура и объем диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения списка использованной литературы. Объем диссертации составляет 124 страницы.

Список опубликованных работ:

1. Dzhumanov S., Gafforov N., Djumanov Sh.S. Modified BCS-like pairing theory of polaronic carriers // Доклады Академии наук Республики Узбекистан.-Ташкент, 2014.-№4.-С.25-28 (01.00.00. №7).
2. Dzhumanov S., Khudayberdiev Z.S., Djumanov Sh.S. Peculiar oxygen and copper isotope effects on the pseudogap formation temperature in underdoped to overdoped cuprates: Pseudogap induced by pairing correlation above T_c in cuprates with large and small Fermi surfaces // Physica B.- Elsevier: USA, 2015.- vol.465.-pp.29-37 (№ 39. Impact Factor Search; IF = 1.874).
3. Dzhumanov S., Baimatov P.J., Djumanov Sh.S. Unusual isotope effects on the pseudogap in high-T_c cuprate superconductors as support for the BCS-like pairing theory of large polarons above T_c // Physica C.- Amsterdam, (Netherlands). 2015.-V.513.-pp.43-50 (№ 39. Impact Factor Search; IF = 0.99).
4. Dzhumanov S., Djumanov Sh.S., Oksengendler B.L. Isotope effects on the critical temperature of superconducting transition in heavily overdoped cuprates // Доклады Академии наук Республики Узбекистан.-Ташкент, 2017.-№5.- С.17-20 (01.00.00. №7).
5. Dzhumanov S., Baimatov P.J., Djumanov Sh.S. Unusual conduction mechanisms of cuprate superconductors in the normal state and pseudogap effects // Вестник Национального ядерного центра Республики Казахстан.-Курчатов (Казахстан), 2016. - № 1. - С.34-38.
6. Djumanov Sh.S. Pseudogap phenomena and novel isotope effects on the pseudogap formation temperature in high-$T_c$superconductors // The Bulletin of Young Scientists. – Tashkent: Uzbekistan Academy of Sciences, 2019. - №1 (3). - С. 56.
7. Dzhumanov S., Djumanov Sh.S. Pseudogap states in nuclaer matter // VII Eurasian Conference «Nuclear Science and its Application», Book of abstracts, October 21-24, 2014. – Baku (Azerbaijan), 2014. -pp.253-254.
8. Оксенгендлер Б.Л., Джуманов Ш.С., Джуманов С., Каримов З.И. О таммовских состояниях сверхпроводниках // Труды Международной научной

конференции «Фундаментальные и прикладные вопросы физики», 13-14 июня 2017. – Ташкент, 2017. - С. 262.

9. Djumanov Sh.S. Pseudogap phenomena and novel isotope effects on the pseudogap formation temperature in high-T_c superconductors // V Республиканская конференция молодых физиков Узбекистана “Ядерная физика и ядерные технологии”: Сборник докладов, 4-5 декабря, 2018. – Ташкент: Институт ядерной физики АН РУз, 2018.– С. 91-95.
10. Dzhumanov S., Rashidov J., Djumanov Sh.S. BCS-like Pseudogap and Novel Isotope Effects in high-T_c Cuprate Superconductors // 12th International Confernce on materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors, August 19-24, 2018. – Beijing (China), 2018. – p.247.
11. Djumanov Sh.S. Pseudogap phenomena and novel isotope effects on the pseudogap formation temperature in high-T_c superconductors // II International Scientific Forum “Nuclear Science and Technologies”: Book of abstracts, 24-27 June, 2019. – Almaty (Kazakhstan), 2019. -pp.68.
12. Dzhumanov S., Oksengendler B.L., Djumanov Sh.S. Pseudogap phenomena and anomalous isotope effects on the pseudogap formation temperature in high-T_c cuprate superconductors // 9th International Confernce “Modern Problems of Nuclear Physics and Nuclear Technologies”, 24-27 September 2019. – Tashkent, 2019. – pp.245-246.

ГЛАВА I. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА НЕЛЕГИРОВАННЫХ И ЛЕГИРОВАННЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

§1.1 Классификация твердых тел по химическим связям и электрической проводимости

Физика твердого тела, занимается главным образом изучением кристаллических твердых тел и поведением электронов в этих телах [1; с.13]. Так, например, совершенно различны по физико-химическим свойствам кристаллы, построенные из атомов, внешний слой электронной оболочки которых полностью заполнен (такая ситуация реализуется в кристаллах инертных газов), или есть в этом слое только один электрон как это имеет место в кристаллах щелочных металлов, или, наконец, когда там не хватает лишь одного электрона до полного заполнения (внешняя электронная оболочка атомов галоидов соответствует именно этому случаю) [2; с.50]. В кристаллах щелочных металлов атомы легко отдают один внешний электрон в общий коллектив кристалла, образуя при этом положительно заряженные ионы-катионы ($Li^{+}, Na^{+}, K^{+}, Rb^{+}, Cs^{+}$). После потери внешнего электрона электронные оболочки атомов щелочных металлов становятся такими же, как и внешние оболочки атомов инертных газов (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn), имеющие очень устойчивую электронную конфигурацию, первый потенциал ионизации для которых очень велик и изменяется от 12 до 25 эВ [3; с.86]. В щелочногалоидных кристаллах атомы галоидов будут принимать от атомов щелочных металлов один электрон, чтобы заполнить единственное пустое место во внешней электронной оболочке. Вышеизложенная приближенная картина качественно правильно описывает характер электронной природы химических связей в твердых телах. Поэтому, основные типы твердых тел можно классифицировать, воспользовавшись этой картиной. Заметим, что вопрос об определении типа твердого тела, а следовательно, и химической связи весьма сложный и многоплановый. Классификация твердых тел основана либо на типах

химических связей, либо на их электрических свойствах. Классификация для существующих твердых тел, основанная на характере взаимодействия их атомов или молекул позволяет анализировать природу химических связей в них и обеспечивать существование стабильной кристаллической решетки. Согласно этой классификации, все твердые тела можно условно разделить на шесть типов [1; с.111, 2; с.50, 3; с.83, 4; с.68] металлические, ковалентные, ионные, молекулярные и квантовые кристаллы и кристаллы с водородной связью[1; с.111, 2; с.50, 3; с.84, 4; с.68].

Металлические твердые тела характеризуются высокую электропроводность, и поэтому значительная часть электронов в металле должна быть свободной, чтобы иметь возможность перемещаться. Металлическая связь возникает при взаимодействии атомов электроположительных элементов, внешные валентные электроны которых связаны с ядром относительно слабо. Металлы являются типичные твердые тела с характерной энергией связи от 1 до 5 эВ на один атом. В щелочных металлах Li, Na, K, Rb, и Cs значания энергии связи соответствуют нижней границе этого интервала и представлять себе в виде правильно расположенных положительных ионов, погруженных в более или менее однородную отрицательную электронную жидкость. С энергетической точки зрения металлическая связь слабее, чем ионная и ковалентная [1; с.141, 2; с.54, 3; с.112, 4; с.85].

В отличие от металлов, ковалентные кристаллы относятся к другому типу твердых тел, кристаллические решетки которых образована за счет ковалентной связи и электроны отдельных атомовв каждой ковалентной связе становятся общими только для двух взаимодействующих атомов, т.е., электроны двух атомов коллективизируются образуя ковалентную связь междуними. Например, в ковалентных кристаллах кремния Si и германия Ge четыре валентные электроне атомов коллективизируются, давая четыре ковалентные связи направленные к четырем ближайшим тетраэдрическим узлам кристаллической решетки[1; с.137, 2; с.52, 3; с.105, 4; с.77].

Ионнные кристаллы обусловлена электростатическое кулоновское взаимодействия между двумя противоположного знака ионами. Наиболее характерным примером ионных кристаллов представляют щелочно галоидные соединения, такие как $NaCl, KCl, CsCl, NaBr, KBr, CsBr$, состоящие из положительных ионов щелочных металлов и отрицательных ионов галоидов. При образование ионных кристаллов электроны принадлежащие ионного кристалла не коллективизируются и относятся только отдельным ионам (например, ионам галоидов F^-, Cl^-, Br^- и I^- в щелочногалоидных кристаллах). Например, электронная конфигурация $1s^2 2s^2 2p^6$ иона Na^+ совпадает с электронной конфигурацией атома неона Ne [1; с.126, 2; с.51, 3; с.99, 4; с.74].

К молекулярным кристаллам относят твердые тела, в узлах кристаллической решетки которых располагаются либо одинаковые молекулы ($H_2, O_2, N_2, Cl_2, Br_2, I_2, NH_3, CO_2, CH_4$), либо атомы инертных газов (Ne, Ar, Kr, Xe, Rn). Одной из характерных особенностей молекулярных кристаллов является то, что частицы (атомы, молекулы) в кристалле удерживаются вместе очень слабыми силами Ван-дер-Ваальса, пропорциональными шестой степени расстояния между частицами (r^{-6}). Вэтих кристаллах сила связи внутри молекул, располагающихся по узлам решетки, оказывается заметно больше силы связей между молекулами [1; с.137, 2; с.52, 3; с.93, 4; с.69].

Кристаллами с водородной связью являются также кристаллы молекулярного типа. Однако связь в них осуществляется обобществленным протоном (ион атома водорода) и эта связь носит, в основном, ионный характер (атом водорода теряет свой единственный электрон и, отдавая его одному из двух атомов молекулы, превращается в протон, который и осуществляет связь между атомами). Малые размеры протона не позволяют ему иметь ближайшими соседями более чем два атома, и водородная связь осуществляется только между двумя атомами. Примером являет водородная связь между атомом кислорода и атомами водорода H_2O вольду и воде [1; с.142, 2; с. 56, 4; с.100].

К квантовым кристаллам относятся кристаллы водорода и двух изотопов гелия ^3He и ^4He, в которых амплитуда квантовых нулевых колебаний не мала по сравнению с параметром решетки [2; с.56]. Кристаллы, в которых амплитуда нулевых колебаний сравнима по порядку величины с периодом их решетки и параметр де Бура $\Lambda_Б$ [5; с.328] не мал, называются квантовыми кристаллами. Например, для кристаллов ^3He, ^4He и H_2 значения параметра де Бура соответственно равны $\Lambda_Б = 0.48$, 0.43 и 0.28. Даже для кристалла Ne оказывается $\Lambda_Б \simeq 0.1$ [5; с.328]. Другая классификационная схема, основанная на электрической проводимости σ твердых тел, дает возможность узнать важное различие между электронными структурами и свойствами различных твердых тел. Согласно этой классификации, существующие твердые тела условно разделяют на четыре типа: металлы, полупроводники, диэлектрики и сверхпроводники [1; с.420, 2; с.425, 3; с.400,4; с.350].

Металлы являются хорошими прекрасными проводниками и их электропроводность σ при низких температурах изменяется от 10^4 до 10^9 Ом$^{-1}$см$^{-1}$ [3; с.253]. Противоположность этому, диэлектрики практический не проводят электрический ток и их проводимость σ изменяется от 10^{-12} до 10^{-20}Ом$^{-1}$см$^{-1}$. Кроме того, твердые тела, имеющие промежуточные значения σ в диапазоне от 10^4 до 10^{-12}Ом$^{-1}$см$^{-1}$, принадлежат классу полупроводников [3; с.253]. Такие различия между проводимостями металлов, полупроводников и диэлектриков зависят от особенностей электронной структуры этих систем и электронных свойств твердых тел, которые определяются взаимным расположением различных энергетических зон и распределением электронов в этих зонах. В частности, зона проводимости металлов частично заполнена электронами. Тогда как, зона проводимости полупроводников и диэлектриков при температуре $T = 0$ К является полностью пустой и разделена от полностью заполненной валентной зоны энергетической щелью E_g, которая меньше чем 2 эВ в полупроводниках. В отличие от полупроводников энергетическая щель, разделяющая валентную зону от зоны

проводимости в диэлектриках намного больше чем 2 эВ. При низких температурах полупроводник становится диэлектриком с увеличением температура T, часть электронов в полупроводниках термически возбуждается из валентной зоны к зоне проводимости, и концентрация термически возбужденных электронов, равная $n_e = nexp[-E_g/k_BT]$ (где n концентрация валентных электронов, k_B постоянная Больцмана), будет намного меньше концентрации электронов в зоне проводимости металлов, в которых энергетическая щель E_g отсутствует (т.е. $E_g = 0$) [1; с.420, 2; с.425, 3; с.400, 4; с.350]. Различия между металлом и полупроводником ясно проявляются в температурной зависимости их электрических сопротивлений, как показано на Рис. 1.1.

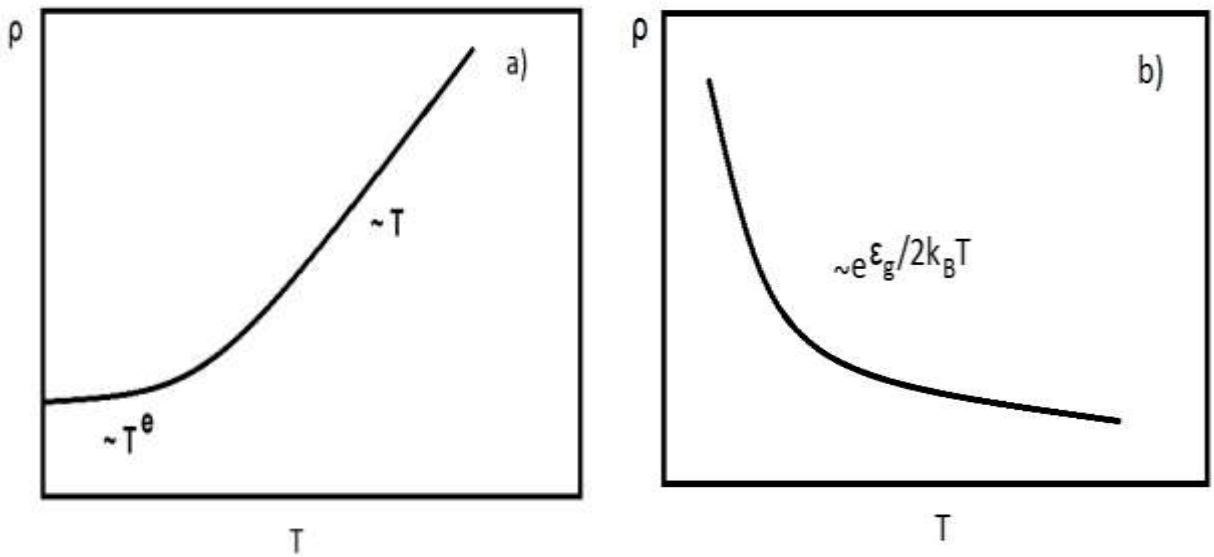

Рис. 1.1. Характерная температурная зависимость сопротивления металлов (а) и полупроводников (б).

Низкотемпературное сопротивление чистых металлов следует T^2 закону как $\rho(T) = \rho_0 + a_1T^2$ [1; с.420, 2; с.425, 3; с.400, 4; с.350, 5; с.328, 6; с. 965-990] (где ρ_0 остаточное сопротивление, a_1 постоянный коэффициент) из-за доминирующего электрон-электронного рассеяния, тогда как их

высокотемпературное сопротивление проявляет линейную температурную зависимость $\rho(T) = \rho_0 + a_2 T$ [1; с.714] (где a_2 постоянный коэффициент) из-за доминирующего рассеяния электронов на акустических фононах [1; с.714]. Температурная зависимость ρ в полупроводниках и диэлектриках для доминирующего рассеяния электронов (или дырок) дается выражением $\rho(T) = a_3 \exp(\mathrm{E_g}/2\mathrm{k_B T})$ [7; с.523], где a_3 коэффициент пропорциональности [7; с.523].

При низких температурах многие металлы и легированные полупроводники, а также другие материалы становятся сверхпроводниками [1; с.714, 3; с.494, 4; с.574, 8; с.262] и ниже температуры сверхпроводящего перехода T_c, электрическое сопротивление в этих твердых телах практический исчезает (Рис. 1.2) [1; с.714, 3; с.494, 4; с.574, 8; с.262]. В частности, сопротивление металлических низкотемпературных сверхпроводников меньше чем 10^{-23}Ом см [8; с.262, 9].

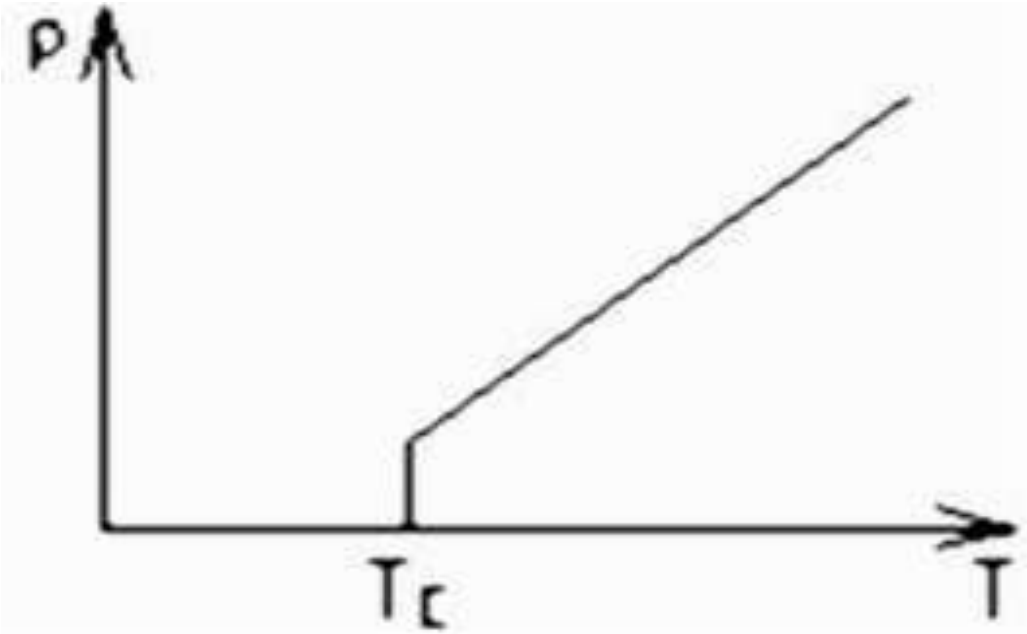

Рис. 1.2. Кривая сопротивления сверхпроводника, показывающая падение сопротивления до нуля вблизи T_c

Диэлектрики могут быть подразделены на обычные (зонные) диэлектрики [1; с.714, 3; с.494], Моттовские и Андерсоновские диэлектрики [1; с.714, 2; с.454, 3;

с.494], а также условно на необычные (например, (би)поляронные) диэлектрики [10; с.356]. После открытия новых медно-оксидных (купратных) высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) стало известном, что в промежуточных уровнях легирования эти купратные соединения становятся необычными псевдощелевыми металлами выше температуры сверхпроводящего перехода T_c и температурная зависимость их электрического сопротивления $\rho(T)$ выше некоторой характеристической температуры T^* [10; с.356, 11; с.539-564, 12; с.1168-1176] является линейной ($\rho(T) \sim T$), а ниже этой температуры ($T < T^*$) $\rho(T)$ отклоняется вниз от линейного закона (см. Рис. 1.3).

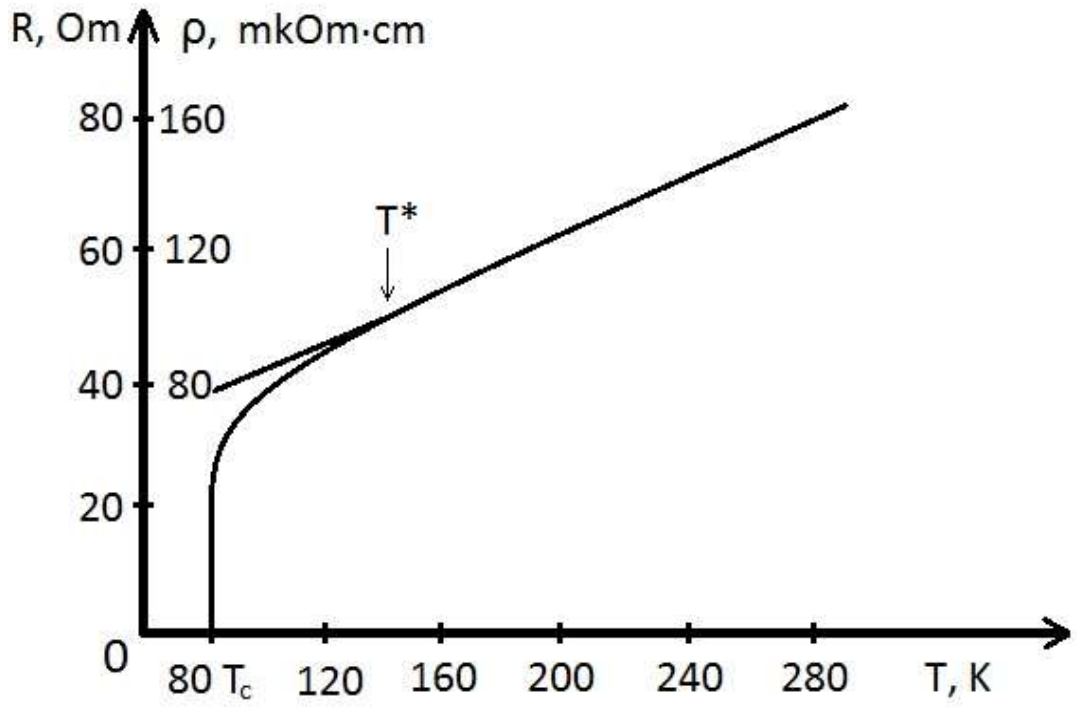

Рис. 1.3. Зависимость от температуры сопротивления R удельного сопротивления ρ в интервале 80-300 К для слегка недолегированных ВТСП $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}(YBCO)$ [12; с.1168-1176], где $T_c \simeq 89,5$ К и температура образования псевдощели $T^* \approx 150$ К

Вышеописанная классификация твердых тел с точки зрения их электрических свойств основана на двух основных понятиях, касающихся энергетических зон: 1) понятии энергетической щели между различными зонами и 2) понятии

заселенности (или степени заполнения разрешенных зон электронами) [10; с.356, 11; с.539-564, 12; с.1168-1176].

§1.2. Обычная одноэлектронная зонная структура твердых тел

Любое твердое тело состоит из атомов, т.е. представляет собой совокупность ядер и электронов, масса ядра M велика по сравнению с массой электрона m_e. Рассмотрим для простоты очень большое число одинаковых атомов, удаленных друг от друга настолько далеко, что взаимодействие между ними отсутствует. В этом случае каждый из атомов ведет себя как изолированный и имеет определенный энергетический уровень. Система из N удаленных атомов будет иметь те уровни энергии, каждый из которых повторится N раз или N кратно вырожден. Кристаллическое твердое тело образуется при сближении этих удаленных атомов до некоторого расстояния a_0 (которое называется постоянной решетки). При этом появится взаимодействие между атомами, в результате чего каждый первоначальный энергетический уровень атома будет смещаться и энергетические уровни системы атомов расщепляются на N отдельных уровней. Вместо однократно вырожденного уровня возникают N отдельных уровней, образующих полосу или энергетическую зону. Вышеизложенное наглядно поясняет, как из отдельных уровней изолированных атомов возникает зонная структура энергии кристалла.

Взаимодействие атомов при их сближении проявляется, прежде всего, на электронах внешних оболочек, волновые функции которых сильно перекрываются. Влияние этого взаимодействия на электроны внутренних оболочек гораздо слабее, и поэтому глубоко расположенные атомные уровни переходят в твердом теле в очень узкие полосы, а высоко расположенные уровни порождают значительно более широкие энергетические зоны. Самыми широкими оказываются зоны, соответствующие уровням валентных электронов. Таким образом, энергетический спектр кристалла состоит из нескольких полос,

называемых энергетическими зонами, каждый из которых возникает в результате расщепления энергетических уровней отдельных атомов из-за их взаимодействия. Определенные энергетические зоны будут заполнены электронами, а более высоколежащие зоны будут пусты. Соседние энергетические зоны будут разделены энергетической щелью конечной ширины. Наибольший интерес представляют две соседние зоны, одна из которых является наивысшей из заполненных (она называется валентной зоной, а ее максимальная энергия обозначается через E_v), а другая-наинизщей из пустых (она называется зоной проводимости, а ее минимальная энергия обозначается через E_c) [1; с.714, 4; с.574]. Разность $\varepsilon_g = E_c - E_v$ называется энергетической щелью или шириной запрещенной зоны. Характерная энергия, которая отделяет заполненные уровни от пустых, называется уровнем Ферми E_F [1; с.714, 4; с.574].

Описанную выше зонную структуру энергетического спектра кристалла можно получить также из решения уравнения Шредингера для стационарных состояний. Однако уравнение Шредингера для кристалла, состоящего из многих частиц в целом решить и исследовать невозможно из-за громадного числа частиц (атомных ядер и электронов, имеющих массы m_e) в кристалле. Поэтому это уравнение необходимо предварительно упростить и только после этого его решение можно получить путем использования различных упрощающих предположений. В частности, адиабатическое приближение, основанное на большом различии масс ядер и электронов $M \gg m_e$ позволяет рассмотреть независимые движения атомных ядер и электронов [3; с.494]. Ядра ввиду их массивности считаются при этом неподвижными и движение электронов можно рассматривать прификсированных положениях ядер. Однако, волновая функция кристалла зависит еще от координат r всех электронов и решение уравнения Шредингера для многих электронов требует дальнейших приближений [3; с.494]. Такими важными упрощающими предположениями являются следующие: 1) кристаллическая решетка, построенная из неподвижных атомных ядер, имеет строгую периодичность; 2) электрон-электронное взаимодействие

можно заменить энергией взаимодействия электронов с некоторым эффективным полем $\widetilde{U}(r)$ в Хартри-Фоковском приближении [3; с.494]; и 3) электрон-решеточное взаимодействие является достаточно слабым и оно рассматривается как малое возмущение. Эти три предположения, лежащие в основе обычной одноэлектронной зонной теории твердого тела дают возможность найти приближенное решение электронного уравнения Шредингера. При таком предварительном упрощении считается, что состояние кристалла можно приближенно описать не полной волновой функцией, зависящей от координат всех электронов и атомных ядер, а одночастичными волновыми функциями каждого электрона. Каждая из таких волновых функций зависит уже только от координат одного электрона, который находится в силовом поле, создаваемом атомными ядрами и остальными электронами кристалла [3; с.494]. Таким путем многочастичное волновое уравнение Шредингера заменяется одночастичным для каждого электрона, потенциальная энергия которого будет равна

$$V(\vec{r}) = \widetilde{U}(\vec{r}) + U(\vec{r}), \tag{1.1}$$

где $U(\vec{r})$ −потенциальная энергия электрона в поле всех ядер. Тогда упрощенное уравнение Шредингера можно записать в виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta(\vec{r}) + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \tag{1.2}$$

где $\Delta(\vec{r})$ −оператор Лапласа для электрона, $\Psi(\vec{r})$ и E −соответственно волновая функция и энергия электрона. Решение этого упрощенного уравнения Шредингера можно получить в приближении почти свободных электронов и в приближении сильной связи [10; с.356, 13; с.640]. В модели почти свободного электрона, энергия которого равна $E_0(\vec{R}) = \hbar^2\vec{k}^2/2m_e$, потенциал $V(\vec{r})$ − рассматривается как малое возмущение и решения уравнения (1.2) являются блоховскими функциями [10; с.356, 13; с.640]

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{r}}, \tag{1.3}$$

где Ω−объем кристалла, $\vec{k}$ −волновой вектор электрона. Ввиду того, что потенциал $V(\vec{r})$ −периодичен, он может быть разложен в ряд Фурье

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\vec{r}}\ , \tag{1.4}$$

где $V_{\vec{g}}$ −Фурье компонента потенциала $V(\vec{r})$, $\vec{g}$ −вектор обратной решетки с периодом $2\pi/a_0$. Матричные элементы $V(\vec{r})$ относительно функций (1.3) отличны от нуля, если $\vec{k} - \vec{k}' = \vec{g}$.

Когда волновой вектор $\vec{k}$ близок к границе зоны Бриллюэна $g/2$, энергетический спектр кристалла имеет вид [1; с.714, 10; с.356, 13; с.640, 14; с.520].

$$E(\vec{k}) = \frac{1}{2}[E_0(\vec{k}) + E_0(\vec{k} + \vec{g})] \pm \frac{1}{2}[(E_0(\vec{k}) - E_0(\vec{k} + \vec{g}))^2 + 4|V_{\vec{g}}|^2] \tag{1.5}$$

Таким образом, периодический потенциал кристаллической решетки приводит к расщеплению энергетических зон электронов вблизи границы зоны Бриллюэна, где наблюдаются разрывы в энергетическом спектре $E(\vec{k})$, величина которых равна $E_g = 2|V_{\vec{g}}|$. При удалении от границы зоны Бриллюэна роль возмущения становится незначительной и интервал значений к между $-\pi/a$ и π/a называется первой зоной Бриллюэна (для одномерной решетки). При $g = 2\pi/a_0$ границы первой зоны Бриллюэна соответствуют $k = \pm\pi/a_0$. Уравнение (1.5) показывает, что энергетический спектр почти свободных электронов приобретает зонный характер, т.е. возникают две разрешенные зоны, которые разделены энергетической щелью E_g (Рис.4). Все энергетические зоны из-за периодической зависимости энергии электрона $E(\vec{k})$ от $\vec{k}$ (т.е., $E_0(\vec{k}) = E_0(\vec{k} + \vec{g})$) можно рассматривать в пределах первой зоны Бриллюэна.

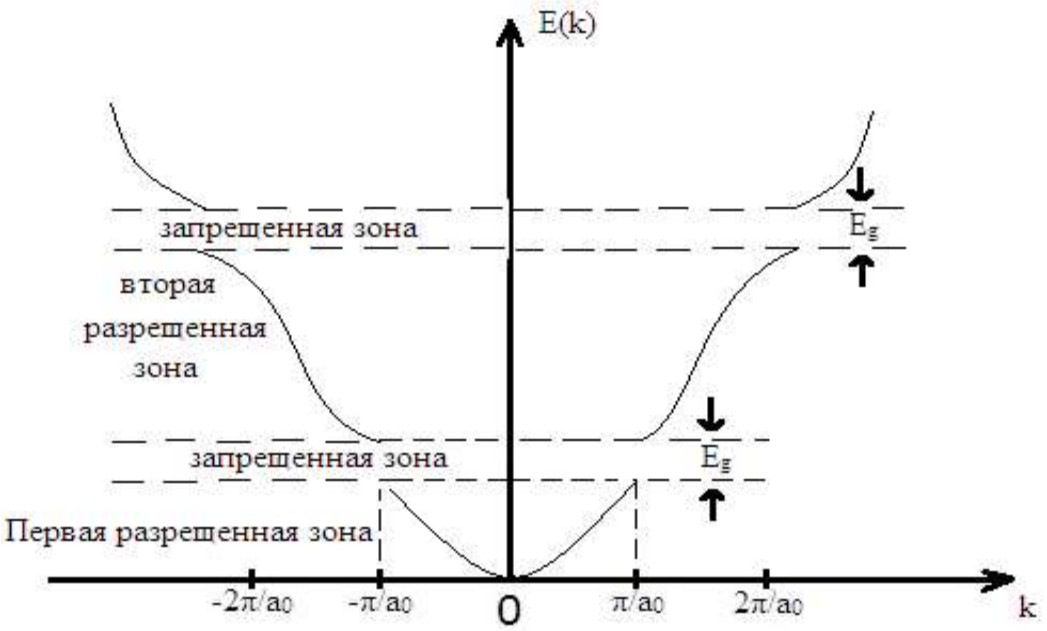

Рис. 1.4. Зависимость одноэлектронной энергии от волнового вектора в одномерной решетке с расстоянием между атомами (постоянной решетки), равным a_0. Показана энергетическая щель (запрещенная зона) E_g.

Теперь рассмотрим другой предельный случай, соответствующий приближению сильно связанных электронов и будем считать, что электронные оболочки атомов мало перекрываются и каждый электрон принадлежит своему атому. Это означает, что электронное состояние в изолированном атоме изменяется незначительно при образовании кристалла из атомов. В этом случае метод сильной связи является лучшим приближением для описания электронных состояний кристалла, и перекрывание электронных оболочек атомов будет рассматриваться как возмущение. При этом энергетический спектр кубического кристалла в приближении сильной связи имеет вид [10; с.356]

$$E(\vec{k}) = E_a + 2I(a_0)\left(cosk_x a_0 + cosk_y a_0 + cosk_z a_0\right), \qquad (1.6)$$

где $E_a = \int \psi_a^*(\vec{r})\hat{H}(\vec{r})\psi_a(\vec{r})d^3\vec{r}$ –энергия свободного (т.е. изолированного атома), $\hat{H}(\vec{r})$ –оператор одноэлектронного гамильтониана, $\psi_a(\vec{r})$ –волновая функция электрона в изолированном атоме, $I(a_0) = \int \psi_a^*(\vec{r} + a_0)\hat{H}(\vec{r})\psi_a(\vec{r})d^3r$ интеграл перекрытия. Как видно из уравнения (1.6), $E(\vec{k})$ изменяется от $E_{min} =$

$E_a - 6I(a_0)$(при $\pm\vec{k}_x = \pm\vec{k}_y = \pm\vec{k}_z = \pi/a_0$) до $E_{max} = E_a + 6I(a_0)$ ($k_x = k_y = k_z = 0$) и значения $E(\vec{k})$ образуют энергетическую зону шириной

$$W = 12I(a_0) \tag{1.7}$$

При малых значениях $\vec{k}$ (когда $\vec{k}a$<<1), можно разложить $cosk_x a_0$, $cosk_y a_0$ и $cosk_z a_0$ в ряд Тейлора по степеням $k_x a_0$, $k_y a_0$, $k_z a_0$:

$$cosk_x a_0 \approx 1 - \frac{1}{2}(k_x a_0)^2 + \cdots \tag{1.8}$$

(аналогичные разложения имеют место для $cosk_y a_0$ и $cosk_z a_0$). Тогда из (1.6) получаем

$$E(\vec{k}) = E_a + 6I(a_0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \tag{1.9}$$

где $m^* = -\hbar^2/2a_0^2 I(a_0)$ −эффективная масса электрона вблизи центра зоны.

Если $a_0 \to \infty$, тогда $I(a_0) \to 0$ (так как перекрывание волновых функций соседних атомов $\psi_a(\vec{r} + a_0)$ и $\psi(\vec{r})$ стремится к нулю) и $W \to 0$. Это позволяет объяснить образование энергетических зон в кристалле. Если N атомовнаходятся вдали друг от друга в одном и том же состоянии, описываемом локализованной волновой функцией ψ_a с уровнем энергии E_a, то электрон может находиться в каждом из атомов в состоянии ψ_a и уровень E_a является вырожденным. При сближении атомов они возмущают друг друга из-за перекрытия их электронных оболочек. Поэтому вырождение снимается и атомные уровни расщепляются в энергетические зоны (Рис. 1.5).

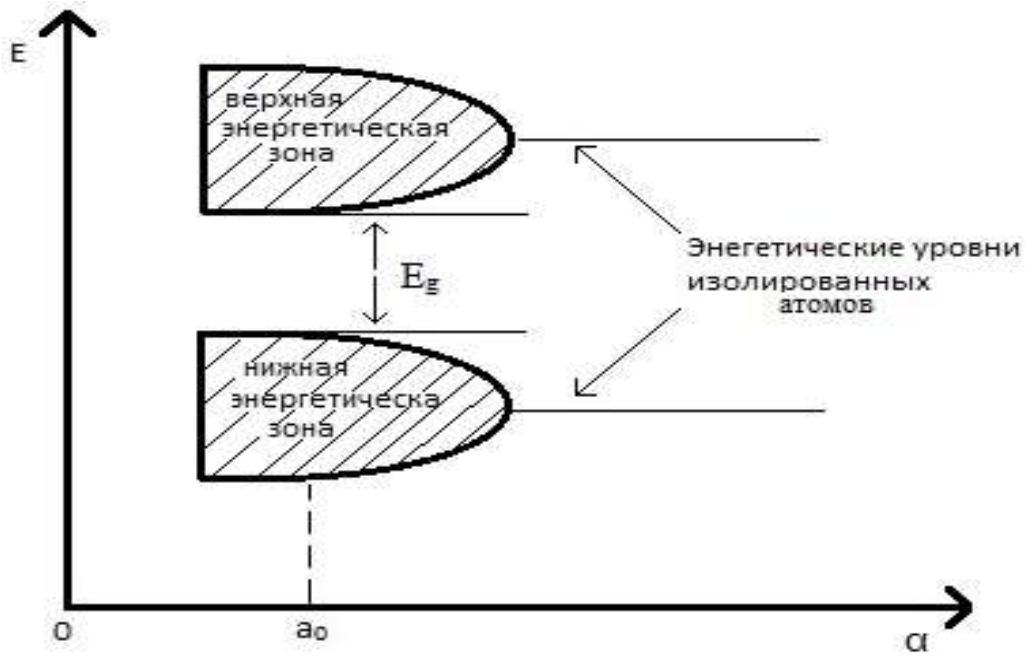

Рис. 1.5. Расщепление энергетических уровней атомов в энергетические зоны с уменьшением межатомного расстояния в кристалле, a_0 постоянная решетки.

§1.3. Зонная структура нелегированных купратов

До сих пор рассматривались свойства одноэлектронных состояний, в то время как, для описания свойств твердых тел даже в рамках обычной зонной модели надо учесть многочастичные эффекты (например, взаимодействие электрона с примесными атомами или колебаниями атомов в кристаллической решетке). В одноэлектронной зонной модели кристаллическая решетка считалось жесткой (неподвижной), а электроны – невзаимодействующими. Оба эти предположения, лежащие в основе обычной зонной модели, могут привести к серьёзным ошибкам в основном вопросе о классификации твердых тел по электрической проводимости и о критериях металлического и диэлектрического состояний [2; с.454]. Обсудим, насколько серьезно могло повлиять на критерий металл-неметалл (диэлектрик) пренебрежение межэлектронным взаимодействием, т.е. межэлектронной корреляцией [2; с.454].

Если рассмотреть кристалл с числом электронов, равным числу атомов, расположенных на узлах решетки, то согласно вышеизложенной зонной теории основное состояние такой многоэлектронной системы является металлическим и представляет собой наполовину заполненную энергетическую зону, когда на каждом узле кристалла находится один электрон. Однако, есть вероятность, что обнаружить на некотором узле кристаллической решетки два электрона с противоположно направлеными спинами. Если ширина энергетической зоны электронов равна W (которая определяется характерной кинетической энергией электронов), а энергия кулоновского отталкивания двух электронов на одном и том же узле кристалла равна U, то при $U \ll W$ межэлектронное взаимодействие будет приводить лишь к малым поправкам к одноэлектронной зонной теории, предсказывающей металлическое состояние системы. Однако, при $U \gtrsim W$ основное состояние системы радикально меняется, и каждый электрон локализован на своем узле и такое состояние будет непроводящим (неметаллическим). Таким образом, в узких энергетических зонах ($W < U$ или даже $W \ll U$) движение электронов резко отличается от предсказанного зонной теорией [2; с.454, 10; с.356]. Классическими примерами веществ, которые должны быть металлами по обычной зонной теории, а на самом деле не бывают ими из-за сильной электронной корреляции ($U \gg W$), являются некоторые окисли переходных металлов типа NiO и медно-оксидные (купратные) соединения. Такие вещества называют Моттовскими изоляторами и зонные структуры нелегированных купратов будут обсуждены ниже. Нелегированные купраты имеют слоистые кристаллические структуры типа перовскита и их основными структурными элементами являются CuO_2 слои. Ион меда Cu^{2+} в этих соединениях имеет 9 электронов в d орбиталах, так что его электронная конфигурация является $3d^9$ с единственной дыркой в высоколежащей $3d_{x^2-y^2}$ орбитали. В кубическом кристаллическом поле, пятикратно вырожденный d уровень иона Cu^{2+} расщепляется на двухкратно и трехкратно вырожденные l_g и t_{2g} уровня. Далее расщепление этих вырожденных l_g и t_{2g} уровней происходит

под действием тетрагонального кристаллического поля (Рис. 1.6). Так как Ян-телловское искажение [15; с. 360, 16; с. 254, 17; с. 454] приводит к удлинению октаэдра вдоль оси c, которая сопровождается расщеплением вырожденного l_g уровня на нижний $d_{3z^2-r^2}$ и верхний $d_{x^2-y^2}$ уровни [15; с. 360, 16; с. 254, 17; с. 454].

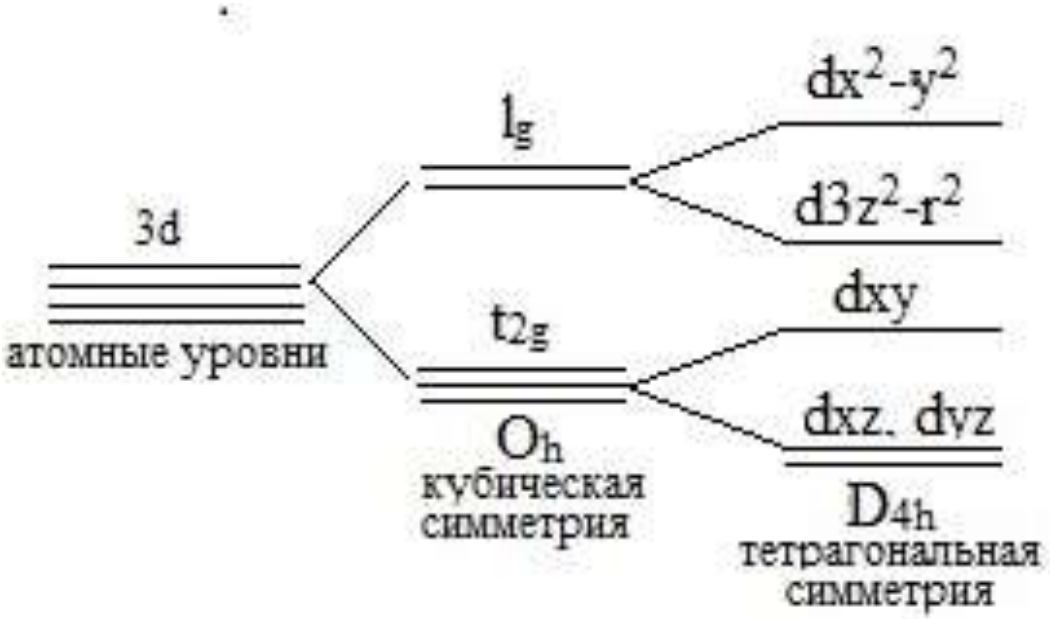

Рис. 1.6. Расщепление $3d$ уровней меди под действием кристаллического поля кубической (O_h) и тетрагональной (D_{4h}) симметрии

При этом вырожденный l_g уровень расщепляется на нижний $d_{3z^2-r^2}$ и верхний $d_{x^2-y^2}$ уровни. Согласно теории поля Лигандов [15; с. 360, 15; с. 254, 17; с. 454], d_{xy}, d_{xz}, d_{yz} орбитали Cu слабо гибридизируются с РП орбиталями кислорода O и образуют несвязывающие (NB) зоны и РП орбитали O, невзаимодействующие с $d_{x^2-y^2}$ и $d_{3z^2-r^2}$ орбиталями Cu образуют П зоны, тогда как $d_{x^2-y^2}$ и $d_{3z^2-r^2}$ орбитали Cu образуют с P орбиталями O связывающие σ и разрыхляющие (т.е. антисвязывающие) σ* зоны (Рис. 1.7) [15; с. 360, 16; с. 254, 17; с. 454].

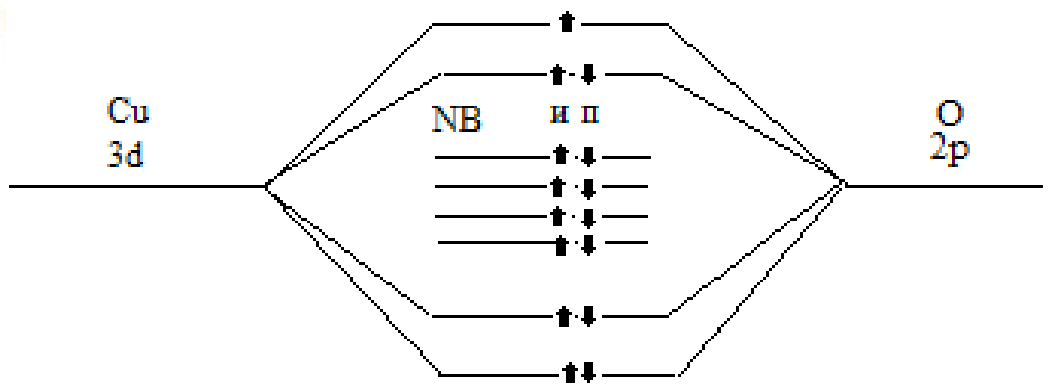

Рис. 1.7. Схематическая диаграмма энергетических уровней нелегированных оксидов меди (купратов).

t_{2g} и $d_{3z^2-r^2}$ орбитали полностью заполнены, тогда как $d_{x^2-y^2}$ орбиталь остается наполовину заполненной [15; с. 360, 16; с. 254, 17; с. 454].

§1.4. Одноэлектронная зонная теория

Описанная выше качественная картина (Рис. 1.7) была подтверждена расчетами одноэлектронной зонной структуры нелегированных купратов [18; с.433, 19; с.351]. Эти расчеты были основаны на теории функционала плотности и эффективных одноэлектронных схемах, которые используют делокализованные блоховские состояния и получают электронные структуры, принимая приближение локальной плотности, чтобы рассмотреть корреляционные эффекты. При этом на основе теоретических расчетов получена картина одноэлектронной зонной структуры нелегированных купратов, образованной $Cu\ 3d$ и $O\ 2p$ орбиталями, которая показана на рисунке 1.8 [18; с.433, 19; с.351].

Однако, стало очевидным, что эта одноэлектронная зонная структура имеет принципиальное ограничение при применении для исследования

электронной структуры нелегированных купратов [20; с.770]. Прежде всего, одноэлектронные расчеты давали нулевой магнитный момент на меди, тогда как экспериментально все нелегированные купратные соединения являются антиферромагнетиками (АФ). Далее одноэлектронные расчеты предсказывали металлический характер основного состояния этих материалов (см. наполовину заполненные наивысшие σ^* или $d_{x^2-y^2}$ зоны на Рис.1.8), тогда как в эксперименте они являются диэлектриками [20; с.770].

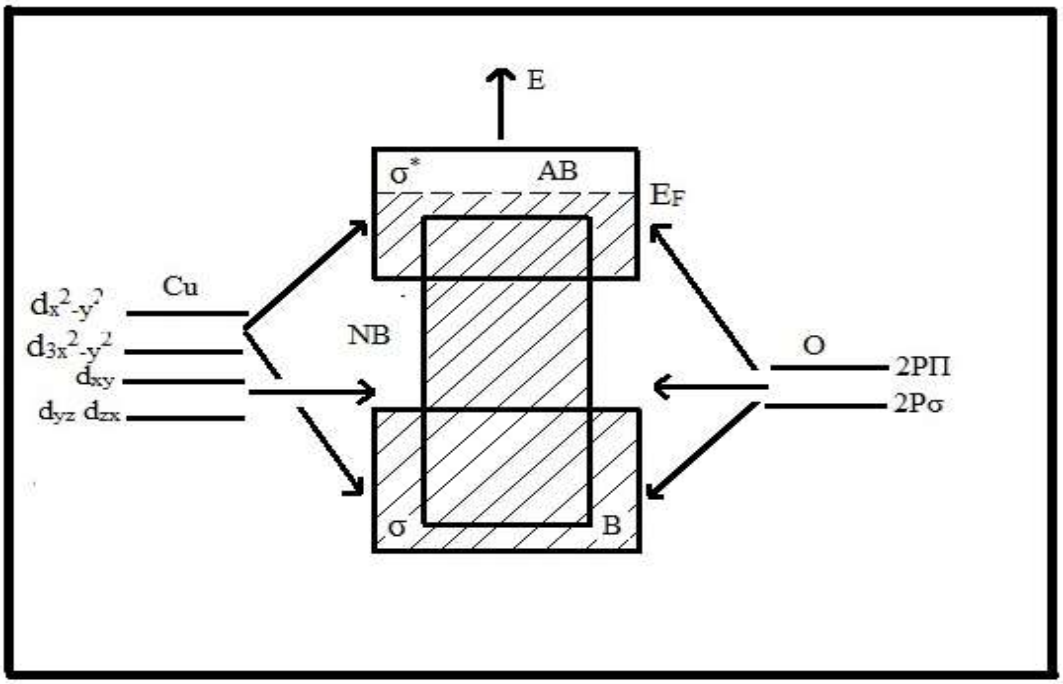

Рис.1.8. Схематическая диаграмма одноэлектронных энергетических нелегированных купратов, возникающих от $Cu\ 3d$ и $O\ 2p$ орбиталей CuO_2-плоскости [20; с.770]. Заштрихованные области означают занятные состояния. σ^* и σ соответственно обозначают разрыхляющие (антисвязывающие AB) и связывающие (B), $d_{p\sigma^*}$ и $d_{p\sigma}$–состояния, Π обозначает несвязывающие (NB), $d_{p\pi}$-состояния, E-энергия

Причина неудачи одноэлектронной зонной теории в описании экспериментально наблюдаемых диэлектрического и АФ состояний нелегированных купратов

связана с пренебрежением сильного кулоновского отталкивания (т.е. сильные электронные корреляции) U_d между двумя дыркамина одном и том же ионе меди (в узлах кристаллической решетке), которое намного раз больше, чем ширина W наполовину заполненной $3d$ зоны [20; с.770].

§1.5. Сильные электронные корреляции

Как уже отмечалось выше, согласно одноэлектронной зонной теории валентная зона (т.е. AB и σ^* зона) нелегированных купратов наполовину заполнена и должна быть металлической. Однако, экспериментальные результаты свидетельствуют, о том, что эти материалы являются АФ диэлектриками и в одноэлектронном подходе не удалось описать особенности электронной структуры нелегированных купратов и ряда их физических свойств, обусловленных эффектами сильных электронных корреляций. Для учета сильных электронных корреляций применяется модель типа Хаббарда. Если Cud^9 состояние в этой модели соответствует энергетическому уровню $\varepsilon_{d,}$ занятой занятому единственной дыркой, то вторая дырка может появляться на этом же узле или ионе меди (т.е., в d^8 состояние) только на энергетическом уровне $\varepsilon_d + U_d$ (Рис. 1.9). Мотт [21; с. 416-422] и Хаббард [22; с.237-259, 23; с.401-419] доказали, что сильное кулоновское отталкивание между электронами на одном и том же узле кристаллической решетки может быть причиной происхождения диэлектрического поведения оксидов переходных металлов с частично заполненной d электронной зоной

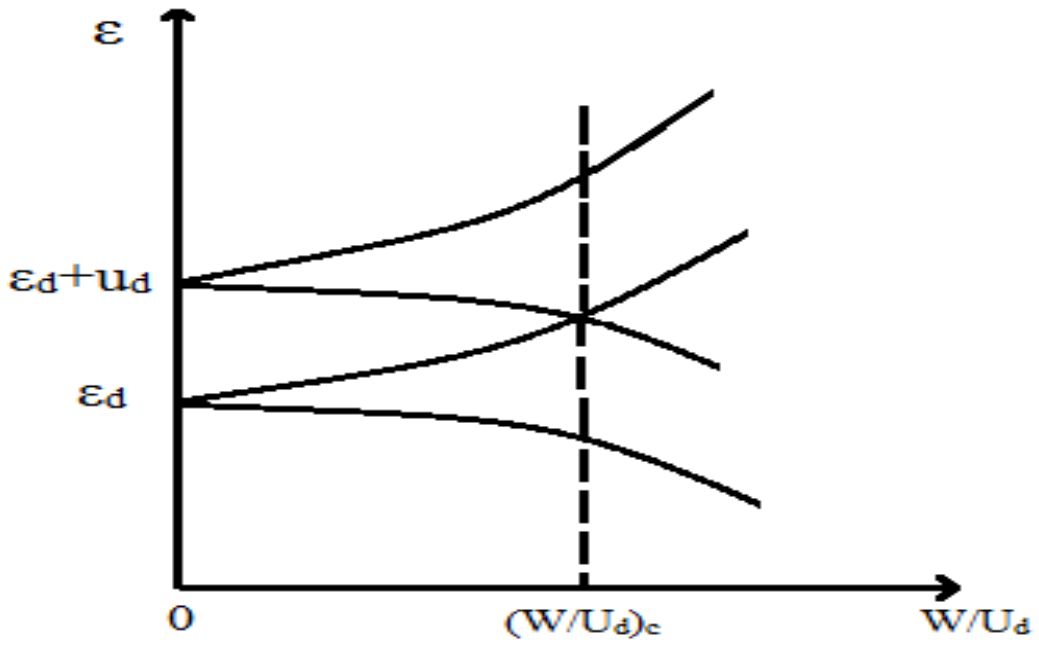

Рис. 1.9. Расщепление наполовину заполненной $d_{x^2-y^2}$ зоны в нелегированных купратах из-за сильной электронной корреляции (Кулоновское отталкивание на узле меди) в однозонной моделели Хаббарда, ε энергия электрона, ε_d энергия дырки на узлах Cu в $d_{x^2-y^2}$ состояния.

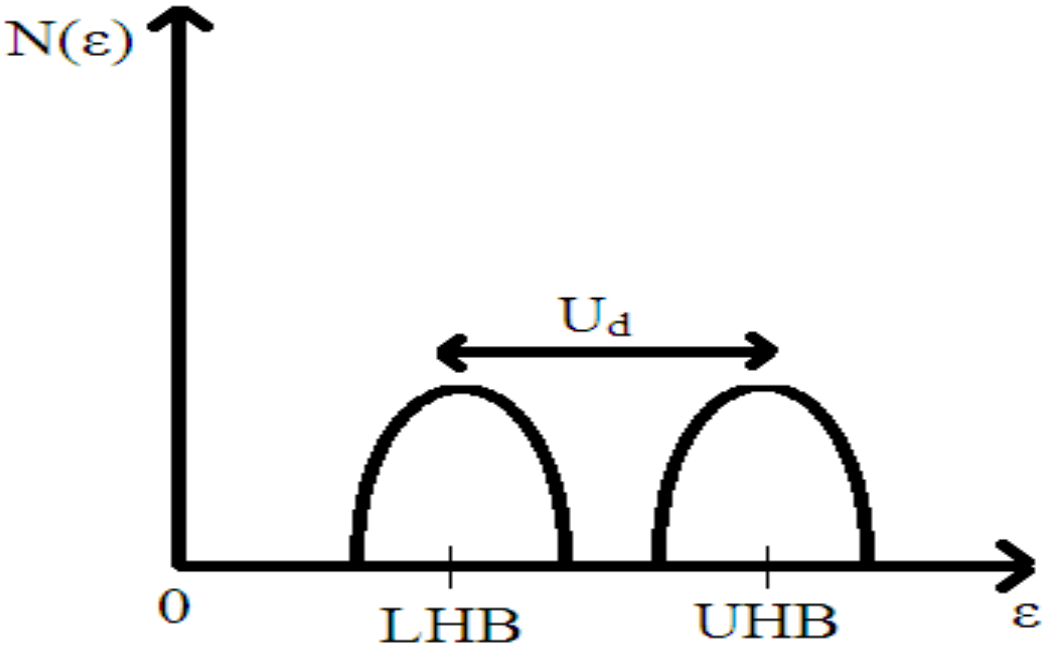

Рис. 1.10. Две зоны Хаббарда, образующиеся при расщеплении $3d_{x^2-y^2}$ зоны, U_d −обозначает энергию кулоновского отталкивания на узлах меди Cu^{2+}, $N(\varepsilon)$ −плотность состояний, LHB −нижняя зона Хаббарда, UHB −верхняя зона Хаббарда.

Аналогично, в случае нелегированных купратовдве дырки, расположенные на одном и том же узле Cu^{3+} будут чувствовать большое кулоновское отталкивание, которое будет расщеплять на половину заполненную АВ (или σ^*) зону, имеющую, в основном, $d_{x^2-y^2}$ характер, на так называемые нижнюю (LHB) и верхнюю (UHB) зоны Хаббарда (Рис. 1.10). Поэтому, нелегированные купраты должны быть диэлектриками Мотта-Хаббарда из-за сильного кулоновского отталкивания на узле Cu^{3+} или сильного корреляционного эффекта. Учет такого корреляционного эффекта в рамках однозоной модели Хаббарда приводит к следующему гамильтониану [24; с. 134, 25]

$$H = \sum_{i\sigma} \varepsilon_{di} a_{i\sigma}^{+} a_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma} + U_d \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i,-\sigma} \qquad (1.10)$$

где $a_{i\sigma}^{+}(a_{i\sigma})$ −оператор рождения (уничтожения) дырки на -ом узле меди Cu^{2+} со спином σ, $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^{+} a_{i\sigma}$ −оператор чисел, t_{ij} −интеграл перескока между ближайшими соседними узлами ионов меди, выражаемые как $W/2z$, zкоординационное число (в частности, $z = 4$ и для квадратной и простой кубической решетки) или число ионов Cu^{2+}, которые являются ближайшими соседями каждого иона меди.Хаббард продемонстрировал [22; с.237-259, 23; с.401-419], что применение гамильтониана (1.10) к цепочке одноэлектронных атомов дает две расщепленные зоны, ширины которых увеличиваются с увеличением параметра W/U_d и при некотором критическом значении $(W/U_d)_c = 1.155$ они начинают перекрываться (см. Рис. 1.9). Это означает, что при $W/U_d > 1.155$ корреляционный эффект является не существенным и простая одноэлектронная зонной картины восстанавливается. Однако, различные эксперименты (см. [26; с.1039]) указывают, что электронные корреляции в нелегированных купратах являются довольно сильными для образования диэлектрика Мотта при наполовину заполненном случае $d_{x^2-y^2}$ зоны. В этих материалах значения энергии внутри атомного кулоновского отталкивания составляют $U_d \simeq 6 - 10$ эВ [26; с.1039], а значения интеграла перескока $t = t_{ij}$ будут ~ 0.25-0.40 эВ [20; с.770]. Тогда приближенные значения

W будут равны $W = 8t \simeq 2.0 - 3.2$ эВ, которые намного меньше чем U_d, и нелегированные купраты являются АФ Моттовскими диэлектриками [20; с.770].

В упрощенной однозонной модели Мотта-Хаббарда не рассматриваются атомы (или точнее ионы O^{2-}) кислорода и взаимодействия ограничены только кулоновским отталкиванием на узлах меди Cu^{2+}. Естественно, такая модель является не очень соответствующей отправной точкой даже для описания нелегированных купратов [26; с.1039]. Кроме того, экспериментально наблюдаемые значения энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости купратов составляют около 1.5-2.0 эВ и интерпретируются как энергетические щели переноса заряда [26; с.1039]. Поэтому, трехзонная модель Хаббарда (называемая $\alpha - p$ модель) [26; с.1039] считается более подходящим приближением для изучения электронной структуры нелегированных купратов. В этой $\alpha - p$ моделирассматривается величина ε_p энергии дырки на $2p$ орбиталях кислорода, величины U_d и U_p, которые являются энергиями кулоновских отталкиваний соответственно на ионах меди и кислорода, величина t_{pd}-матричный элемент перескока между ближайшей соседней $3d$ орбиталью меди и $2p$ орбиталью кислорода и величина V_{pd}-энергия кулоновского отталкивания между ближайшими ионами меди и кислорода. При этом величина щели переноса заряда Δ_{CT} определяется разницей между энергиями $d_и p_$состояний меди кислорода, т.е., $\Delta_{CT} = \varepsilon_d - \varepsilon_p$. Предельный случай $U_d = U_p = U_{pd} = 0$ соответствует одноэлектронной зонной картине (Рис. 1.8), когда верхняя σ^* (или $d_{x^2-y^2}$) зона является дважды вырожденной (в терминах одно электронной зонной модели) и, следовательно, полузаполненой.

Однако, увеличение параметра Хаббардовского отталкивания U_d снимает вырождение $d_{x^2-y^2}$ зоны с образованием нижней (LHB) заполненной и верхней (UHB) вакантной Хаббардовских зон [27; с.418]. Согласно классификационной схеме Заамена-Савацкого-Аллена [27; с.418], конечная зонная структура оксидов переходных металлов зависит от величин W, U_d и Δ_{CT}. В случае, когда $U_d < \Delta_{CT}$, электронная структура нелегированных купратов соответствует Мотт-

Хаббардовскому диэлектрику (Рис. 1.11 а), для которого характерно, что верхней заполненной зонной является состояние $Cu3d$-типа, а когда $U_d > \Delta_{CT}$ - диэлектрика с переносом заряда. В последнем случае нижняя Хаббардовская зона становится ниже по энергии подзоны кислорода, что и приводит к переносу электронного заряда при минимальной энергии электронного возбуждения с подрешетки кислорода на медные центры (Рис. 1.11б). Электронная структура многих оксидов переходных металлов соответствует диэлектрику типа Мотта-Хаббарда ($W < U_d < \Delta_{CT}$). Однако, электронная структура нелегированных купратов соответствует диэлектрику другого типа ($W < U_d$ и $U_d > \Delta_{CT}$), который называется диэлектриком переноса заряда (Рис. 1.11б). Вышеизложенные однозонная и трехзонная модели Хаббарда, описывающие диэлектрические состояния (или высокоэнергетические электронные структуры) нелегированных купратов кажется будут неадекватными для изучения низкоэнергетической электронной структуры легированных купратов, где носители заряда, появляющиеся в процессе легирования, могут делокализоваться аналогично как в легированных полупроводниках (например Si и Ge).

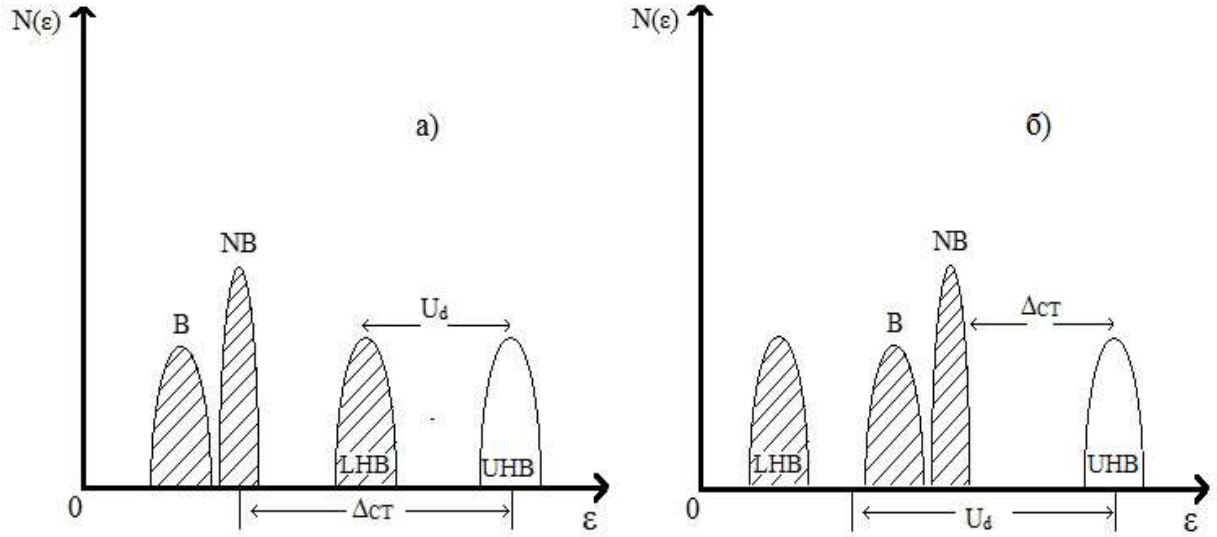

Рис. 1.11. Схематическая зонная структура нелегированных купратов, предсказанная трехзонной моделью Хаббарда [20; с.770] а) Зонная структура диэлектрика Мотта-Хаббарда ($W < U_d < \Delta_{CT}$) и б) Зонная структура диэлектрика переноса заряда ($W < U_d$ и $U_d > \Delta_{CT}$).

Именно легированные купраты становятся сверхпроводниками с высокой критической температурой сверхпроводящего перехода $T_c \simeq 40 - 150$ K [28; с.63-81]. Поэтому, адекватное описание низкоэнергетической электронной структуры легированных купратов требует более подходящего и реалистического теоретического подхода [28; с.63-81].

§1.6. Низкоэнергетическая электронная структура слабо легированных купратов

Описанное выше диэлектрическое поведение нелегированных купратов характеризуется высокоэнергетической щелью переноса заряда $\Delta_{CT} \simeq 1.5 - 2.0$эВ [29; с.90-91, 30; с.185-189]. Экспериментальные исследования показывают, что электронная структура легированных купратов является довольно сложной и новая диэлектрическая щель ε_g примернов десять раз меньше, чем энергетическая щель переноса заряда Δ_{CT} [10; с. 356, 26; с.1039]. При этом электронная структура купратов изменяется драматически с легированием, и спектральное возбуждение переноса заряда передается к низкоэнергетическим электронным возбуждениям [26; с.1039, 30; с.185-189]. Предполагается, что такая эволюция электронной структуры легированных купратов вызвана образованием электронных состояний внутри щели переноса заряда (т.е. внутри щелевых состояний) и низкоэнергетических щелей в спектрах возбуждения этих материалов. Новые энергетические щели в низкоэнергетическом спектре возбуждения в слабо легированных купратах почти не зависят от уровня легирования и являются ответственными за диэлектрическое поведение этих купратов. Характерно, что слабо легированные купраты имеют низкоэнергетическую электронную структуру (с диэлектрическими щелями $\varepsilon_g \simeq 0.1 - 0.2$ эВ), которая совершенно отличается от высокоэнергетической электронной структуры нелегированных купратов (с диэлектрическими щелями $\Delta_{CT} \simeq 1.5 - 2.0$ эВ). Такие новые щелевые особенности наблюдались

экспериментально и в недолегированных и оптимально легированных купратах, в которых эти щелевые особенности проявляются как псевдощели и их природа остается еще не ясной [10; с.356, 11; с.539-564, 26; с.1039,32; с.61-122, 33; с.17].

§1.7. Низкоэнергетические электронные структуры и псевдощелевые особенности недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных купратов

Инфракрасная, фотоэмиссионная и оптическая спектроскопия и другие экспериментальные методы были использованы для изучения характерных особенностей электронных состояний ВТСП-купратов в недолегированных, оптимально легированных и сверхлегированных режимах [26; с.1039, 29; с.90-91, 30; с. 185-189, 32; с.61-122, 34; с.721, 35; с.1719]. При этом фотоэмиссионная спектроскопия, особенно фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (angle-resolvedphotoemissionspectroscopy) (ARPES) и туннельная спектроскопия внесли значительный вклад в понимание внутрищелевых состояний и щелевых особенностей ВТСП-купратов (см. [26; с.1039,32; с.61-122]). Эти экспериментальные исследования показали (см. [26; с.1039, 36; с.473, 37; с.767-768]), что химический потенциал μ или энергия Ферми ε_F смещается до потолка валентной зоны при дырочном (т.е. -типе) легированных купратов, и присутствуют две внутрищелевые зоны с шириной каждой зоны $W \sim 0.1 - 0.2$ эВ, занимающие энергетический диапазон порядка ~ 0.5 эВ до μ в недолегированном режиме [26; с.1039, 36; с.473, 37; с.767-768]. Спектры возбуждения переноса заряда дают сильное доказательство, что свободные дырки в легированных купратах образуют большие поляроны и две внутрищелевые зоны имеют разное происхождение [38; с.897]. Однако, природа этих внутрищелевых зон еще плохо понята.

Одной из наиболее важных особенностей недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратов является энергетическая щель в нормальном состоянии или так называемая псевдощель,

наблюдаемая во многих экспериментах при температурах между некоторой характеристической температурой T^* и температурой сверхпроводящего перехода T_c [26; с.1039, 32; с.61-122, 33; с.17, 34; с.721, 35; с.1719, 36; с.473]. В частности, в недолегированных ВТСП-купратах энергетическая щель (т.е. псевдощель) $\Delta_{PG,}$ наблюдаемая в ARPES экспериментах [32; с.61-122, 36; с.473] постепенно исчезает при $T^* \gg T_c$ и сверхпроводящий параметр порядка Δ_{SC} и критическая температура T_c оказались не связанными с псевдощелью Δ_{PG} [32; с.61-122, 36; с.473]. Появление псевдощели Δ_{PG} в спектрах возбуждения оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратов также наблюдались выше T_c в ARPES и туннельных экспериментах [36; с.473, 39; с.353-419]. Туннельные спектры недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратов, измеренные при отрицательном напряжении имеют две щелевые особенности, такие как резкий пик при приложении низкого щелеподобного напряжения и широкий пик (горб) при высоком напряжении, который отделен от резкого пика провалом (спадом) [39; с.353-419]. Аналогичная пик-спад (провал)-горб структура также наблюдалась в ARPES спектрах [36; с.473]. Причина происхождения пик-провал-горб структуры в ARPES и туннельных спектрах ВТСП-купратов и температурная зависимость этой структуры до недавних пор оставались неясной и спорной [36; с.473, 39; с.353-419]. Только недавно стало довольно очевидным [40; с.427], пик и горб, наблюдаемые в ARPES и туннельных спектрах, связаны соответственно с малой и большой псевдощелями [40; с.427]. При этом замечено, что пик-провал-горб структура, обнаруженная экспериментально в ARPES и туннельных спектрах ВТСП-купратов, сохраняется выше T_c и не связана с критической температурой сверхпроводящего перехода T_c. В настоящее время существуют различные точки зрения относительно малой псевдощели [33; с.17, 40; с.427, 41; с.29-33, 42; с.15-19, 43; с.41-45], большой псевдощели [33; с.17, 40; с.427, 41; с.29-33, 42; с.15-19] и сверхпроводящего параметра порядка [33; с.17, 40; с.427]. В частности, некоторые эксперименты [44; с.51-54, 45; с.149] неверно

предполагают, что малая псевдощель является прекурсивной сверхпроводящей щелью [44; с.51-54, 45; с.149]. В действительности, сверхпроводящий параметр порядка (часто называемый как сверхпроводящая щель) является отличным от малой псевдощели, которая сосуществует с сверхпроводящей щелью ниже T_c, как было впервые предсказано теоретически в работах [46; с.47, 47; с.2269, 48; с.385]. Различные предложенные теоретические модели (см. [10; с.356, 17; с.454, 26; с.1039, 32; с.61-122, 33; с.17, 35; с.1719, 36; с.473, 49]) предсказывают возможности существования различных типов псевдощелей, которые связаны с куперовским спариванием носителей, АФ флуктуацией или корреляциейна близких расстояниях, спариванием так называемых спинонов [17; с.454], спариванием носителей в реальном пространстве (т.е. образованием биполяронов [10; с.356, 49]), образованием волны зарядовой плотности или металлических полос (называемых страйпами [51]) и неспаривательными корреляциями [52; с.14554]. Однако, природа и причины происхождения двух типов псевдощелей, обнаруженных экспериментально в ВТСП-купратах, и их необычные свойства (включая аномальные изотопические эффекты) остаются еще неясными, в нормальном состоянии еще адекватно не объяснены в рамках существующих и часто обсуждаемых теоретических моделей, таких как модель резонирующих валентных связей (РВС) Андерсона [17; с.454] и другие ее варианты, основанные на разделении заряда и спина [50; с.6120], модели сверхпроводящей флуктуации (см. [26; с.1039, 32; с.61-122, 33; с.17]), модели АФ Ферми жидкости Пайнса [53; с.535, 54; с.8576], модели Маргинамной Ферми жидкости Вармы [52; с.14554], модели больших (би)поляронов [55; с.212], малых (би)поляронов [49]. Большинство предложенных теоретических подходов основаны на сильных электронных корреляциях, описываемых в рамках различных моделей Хаббарда, которые хорошо применимы лишь для нелегированных купратов и рассматривают электронные системы слоистых ВТСП-купратов как двумерные (2*D*) системы, пренебрегают эффектами трехмерности этих материалов и наиболее важными электрон-фононными взаимодействиями, присущими легированным полярным ВТСП-купратам. Эти

подходы приводят к результатам, противоречащим друг другу, и поэтому возникают сомнения относительно адекватности и применимости этих теоретических моделей. В то время как теоретические модели малых (би)поляронов наталкиваются на принципиальные трудности описания псевдощелевых явлений и нормальных свойств ВТСП-купратов.

§1.8. Изотопические эффекты в легированных ВТСП-купратах

Хорошо известно, что наблюдение энергетической щели [56; с.225] в спектрах электронного возбуждения и открытие изотопического эффекта в обычных низкотемпературных сверхпроводниках [57; с.477, 58;с.487] обеспечили важные и решающие ключи для понимания микроскопического механизма сверхпроводимости [57; с.477, 58;с.487]. После этих открытий Бардеен-Купер-Шриффер (БКШ) развили их микроскопическую теорию сверхпроводимости, которая была в состоянии объяснить эти экспериментальные обнаружения (см. [4; с.574, 5; с.328]). Согласно теории БКШ температура сверхпроводящего перехода T_c оказалась равной температуре Куперовского спаривания электронов и пропорциональной дебаевской частоте колебания атомов в кристаллической решетке $\omega_D \sim M^{-1/2}$, где M масса атомов [4; с.574, 5; с.328].

После открытия легированных ВТСП-купратов начался новый этап интенсивных экспериментальных и теоретических исследований их нормальных и сверхпроводящих свойств. При этом к расшифровке тайны новых ВТСП-материалов были привлечены мощные арсеналы экспериментальных методов и различные теоретические подходы. Несмотря на то, что такие интенсивные исследования продолжаются вот уже три десятилетия, нет еще достаточной ясности в отношении понимания необычных псевдощелевых особенностей и новых изотопических эффектов на температуру образования псевдощели T^* и температуру сверхпроводящего перехода T_c и ключевые роли этих

изотопических эффектов в явлении высокотемпературной сверхпроводимости. Вышесказанная теория БКШ, которая была развита для простых ферми-жидкостных металлов и была весьма успешной в описании обыкновенных сверхпроводников, не имеет достаточного основания для описания псевдощелевых явлений, высокотемпературной сверхпроводимости и новых изотопических эффектов в недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных купратах [33; с.17, 36; с.473, 59; с.29]. В этих загадочных явлениях (т.е. образования псевдощели, высокотемпературной сверхпроводимости и аномальных изотопических эффектов) проявляются новые фундаментальные свойства твердых тел и здесь ожидаются очередные революционные открытия в области физики конденсированного состояния, коренным образом изменяющие существующие представления о металлах и сверхпроводниках. При этом понимание псевдощелевых явлений и необычных изотопических эффектов на температуры образования псевдощели T^* может явиться ключом для раскрытия необычных механизмов высокотемпературной сверхпроводимости в легированных купратах.

В последние годы предпринимались многочисленные попытки описать псевдощелевые явления и аномальные изотопические эффекты на T^* в ВТСП-купратах в рамках различных теоретических моделей [59; с.29, 60; с.393-396, 61; с.481. 62; с.013046]. Однако, эти попытки наталкиваются на серьезные трудности в количественном и даже качественном описании псевдощелевых явлений и изотопических эффектов на T^*. Например, как было сказано выше, различные теоретические модели, основанные на эффектах сильных электронных корреляций, применимы только к нелегированным купратам, но не применимы к описанию новой физики легированных ВТСП-купратов. В то время как теоретические модели локальных пар или малых (би)поляронов применимы лишь к описанию диэлектрического состояния слабо легированных купратов, но не применимы к описанию образования псевдощели ниже T^* и изотопических эффектов на T^* в недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных купратах.

Для понимания механизма образования псевдощели ниже T^* и возможных изотопических эффектов на T^* в ВТСП-купратах, прежде всего, необходимо выяснить природу характерных взаимодействий и возможных типов носителей заряда, механизмы спаривания необычныхносителей тока и определить характерную температуру куперовского спаривания таких носителей выше T_c. Различные эксперименты, обнаруживающие новые изотопические эффекты на T^* и на T_c показывают, что необычные электрон-фононные взаимодействия играют решающую роль в ВТСП купратах [59; с.29, 60; с.393-396, 61; с.481]. При этом изотопические эффекты на температуры образования псевдощели T^* являются весьма необычными. Как известно, в простых одноатомных металлических сверхпроводниках с атомной массой M температура сверхпроводящего перехода, предсказанная теорией БКШ $T_c \sim M^{-1/2}$ и коэффициент изотопического эффекта для непереходных металлов очень близки к 0.5. Однако, для полярных многоатомных ВТСП-материалов зависимость T^* от M, определяемая в рамках БКШ-подобной теории спаривания необычных носителей заряда, может быть довольно сложнойи наличие в них дальнодействующего взаимодействия этих носителей заряда с оптическими фононами и поляронных эффектов может приводить (в рамках необычного электрон-фононного механизма) к существенному изменению изотопического эффекта на T^*. Существующие экспериментальные данные по изотопическим эффектам на T^* являются довольно неоднозначными и спорными [59; с.29, 61; с.481, 63; с.236]. В частности, некоторые эксперименты свидетельствуют о том, что кислородные изотопические эффекты на T^* при замене изотопа кислорода ^{16}O на изотопа ^{18}O в ВТСП-купратах являются довольно малыми и положительными (т.е. $\alpha_{T^*}^{O} \ll 0.5$), тогда как в других экспериментах обнаружены очень большие отрицательные изотопические эффекты, т.е. T^* изменяется от 170 до 220 К и изотопический сдвиг T^* составляет $\Delta T^* \simeq 50$ К ($\alpha_{T^*}^{O} \lesssim -2.2$) [59; с.29, 61; с.481, 63; с.236]. Эти и другие необычные изотопические эффекты на температуры образования псевдощели, наблюдаемые в ВТСП-материалах не

могут быть объяснены как в рамках обычной теории БКШ, так и в рамках нефононных механизмов спаривания носителей заряда. Поэтому, развитие адекватной теории образования псевдощели и новых изотопических эффектов на T^* в недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратах является крайне необходимым, так как создание такой теории является одной из наиболее вызывающих проблем физики конденсированного состояния.

§1.9. Цель и задачи исследования

Анализ литературных данных показал, что несмотря на определенный прогресс, достигнутый в последние годы в понимании электронной структуры легированных ВТСП-материалов, псевдощелевые особенности и необычные изотопические эффекты на температуры образования псевдощели T^* в этих сложных оксидных материалах, основные проблемы остаются еще нерешенными, поскольку многие предложенные теоретические модели, во-первых, противоречивы, а во-вторых, недостаточно обоснованы. Поэтому, целью настоящей диссертационной работы является развита детальных микроскопических моделей образованиепсевдощелевых явлений и новых изотопических эффектов на T^* в ВТСП-купратах. Достижению этой главной цели подчинен круг задач, решаемых в настоящей работе:

1. Исследовать низкоэнергетическую электронную структуру легированных купратов и образование поляронных зон внутри энергетической щели переноса заряда Δ_{CT} и поляронной неспаривательной псевдощели на уровне Ферми квазисвободных дырочных носителей (которые появляются при p-типе легирования в валентной зоне кислорода).
2. Определить куперовское спаривание поляронных носителей и образование спаривательных псевдощелей при характеристической температуре T^* в рамках модифицированных БКШ-подобных моделей в нормальном состоянии недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных

ВТСП-купратов $LSCO$ и $Bi-2212$ разными (малыми и относительно большими) поверхностями Ферми;

3. Получить явные аналитические выражения для характеристической температуры образования БКШ-подобной псевдощели T^* и определить зависимость T^* от концентрации поляронных носителей (т.е. от уровня легирования) и от массы изотопов кислорода и меди в ВТСП-купратах.
4. Определить изотопические сдвиги температуры образования БКШ-подобных псевдощелей T^* при замещениях изотопов кислорода ($^{16}O \rightarrow {}^{18}O$) и меди ($^{63}Cu \rightarrow {}^{65}Cu$) в различных ВТСП-купратах при разных уровнях их легирования.
5. Получить явные аналитические выражения для коэффициентов кислородных ($\alpha_{T^*}^{O}$) и медных ($\alpha_{T^*}^{Cu}$) изотопических эффектов на T^* в ВТСП-купратах и вычислить эти коэффициенты как функции основных параметров ВТСП-материалов (таких, как массы атомов кислорода M_O и меди M_{Cu}, эффективной диэлектрической проницаемости $\tilde{\varepsilon}$, упругой постоянной решетки β, энергия оптических фононов $\hbar\omega_{LO}$ и концентрация носителей тока n).
6. Исследовать экспериментальные подтверждения полученных теоретических результатов для температуры образования псевдощели T^*, изотопических сдвигов ΔT_O^* и ΔT_{Cu}^*, и коэффициентов изотопических эффектов $\alpha_{T^*}^{O}$ и $\alpha_{T^*}^{Cu}$ путем сравнения этих физических величин с экспериментальными данными в различных ВТСП-купратах.

ГЛАВА II. ПСЕВДОЩЕЛЕВЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ЛЕГИРОВАННЫХ ВТСП-КУПРАТАХ $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ и $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$.

В последние три десятилетия теория твердого тела, основанная на квантомеханическом рассмотрении квазисвободных электронов, движущихся в периодическом потенциале решетки, встретилась со значительными трудности при описании электронных свойств различных новых веществ, в частности, окислов переходных металлов включая ВТСП-купратов. В первую очередь, это связано с аномальными поведениями различных свойств электронных подсистем как в относительно простых веществах, так и в сложных материалах (например, ВТСП-купратах). В частности, одним из аномальных поведений новых ВТСП-материалов является возникновение псевдощели на кривой плотности электронных состояний. По-видимому, в связи с тем, что псевдощель впервые была обнаружена в ВТСП-купратах, ее возникновение связывали с явлением сверхпроводимости. Псевдощелевые явления, наблюдаемые в недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных купратах означают подавление спектрального веса или плотности состояний на уровне Ферми ε_F выше T_c без появления какой-либо сверхпроводящего параметра порядка. Следует также отметить, что подобная аномалия плотности электронных состояний наблюдается не только в других необычных сверхпроводниках [10; с.356], но и в других веществах, например в магнетиках (т.е. в АФ, кроме легированного атомами ванадия), где плотность состояний при концентрации ванадия выше критической остается несколько пониженной, что указывает на наличие псевдощели [64; с.1058]. Кроме того, в [65; с.253-260] указывались некоторые случаи наличия псевдощели в сильно коррелированных несверхпроводящих системах.

Однако, вопросы возникновения псевдощели и необычной сверхпроводимости в ВТСП-материалах представляют наибольший интерес, так как изучение механизмов высокотемпературной сверхпроводимости в этих

системах, проявляющие псевдощелевые особенности остается одним из центральных направлений физики конденсированного состояния. Проведенные экспериментальные исследования показали, что псевдощелевые аномалии [10; с.356, 11; с.539-564, 26; с.1039, 32; с.61-122, 36; с.473] наблюдаются в области фазовой диаграммы ВТСП-купратов, соответствующей концентрации носителей тока меньше некоторой критической, которую обычно называют областью слегка или умеренно сверхлегированных составов. В этой области наблюдаются многочисленные аномалии электронных свойств как в нормальном, так и в сверхпроводящем состоянии, связанные с падением плотности одночастичных возбуждений. Из вышесказанного следует, что понимание природы и свойств псевдощелевого состояния является основной проблемой в любом подходе к описанию новой физики и сложной фазовой диаграммы ВТСП-материалов. Хотя этому вопросу посвящены довольно много экспериментальных и теоретических работ [11; с.539-564, 26; с.1039, 33; с.17, 36; с.473, 61; с.481, 64; с.1078], реальная картина о псевдощелевых явлениях и истинной фазовой диаграмме ВТСП-купратов даже в их нормальном состоянии остается еще неясной. ВТСП-купраты являютсяполярными материалами и образование в них больших поляронов и их спаривание в реальном и импульсном пространствах становятся возможным при сильных и необычных электрон-фононных взаимодействиях. Поэтому, истинными носителями заряда в недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных купратах могут быть большие поляроны и биполяроны и куперовские пары поляронов. В этих ВТСП-материалах необычные электрон-фононные взаимодействия в отличие от обычных электрон-фононных взаимодействий существующих в ранее известных металлических сверхпроводниках, будут ответственными за образование псевдощелей [65; с.253, 66; с.25-28, 67; с.87, 68; с.288], которые, в свою очередь, являются ответственными за многочисленные аномалии электронных свойств ВТСП-купратов в их нормальном состоянии. Данная глава диссертации посвящена теоретическому исследованию псевдощелевых явлений в ВТСП-материалах при

промежуточных уровнях легирования (т.е. при недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных режимах).

§2.1. Образование неспаривательной поляронной псевдощели при промежуточных уровнях легирования купратов

Как обсуждалось выше (Гл. 1), электронная структура нелегированных купратных соединений хорошо описывается трехзонной моделью Хаббарда и валентная зона кислорода лежит внутри энергетической щели Мотта-Хаббарда. В процессе дырочного (p-тип) легирования этих соединений свободные дырки сначала появляются в валентной зоне кислорода. В полярных купратных материалах дырочные носители тока, взаимодействующие как с акустическими, так и оптическими колебаниями решетки могут легко автолокализоваться в деформируемой решетке с образованием поляронных состояний, которые появляются внутри энергетической щели переноса заряда Δ_{CT} (т.е. запрещенной зоне) купратов. При этом образуются большие решеточные поляроны с энергией связи $E_p \geq 0.1$эВ [69; с.155-160]. В легированных ВТСП-купратах неоднородное пространственное распределение этих поляронных носителей приводит к их сегрегации в богатые и обедненные поляронными носителями. Когда уровень легирования купратов увеличивается до недолегированного режима, специфические упорядочения поляронных носителей в виде трехмерных ($3D$) пространственных структур происходят в недолегированных купратах, в которых различные сверхрешетки и энергетические зоны поляронов образуют при их определенных типах упорядочения. Дальнейшее увеличение уровня легирования приводит к увеличению ширины W_p поляронных зон (или к увеличению энергии Ферми поляронов ε_F) в оптимально легированных и сверхлегированных режимах.

Большая ионность ВТСП-купратов $\eta = \varepsilon_\infty/\varepsilon_0$ (где ε_∞ и ε_0 соответственно высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости) и необычные

электрон-фононные взаимодействия должны играть ключевую роль в образовании псевдощели в этих полярных системах. Легированные купраты являются неоднородными системами и в них образование больших поляронов является возможным в тех местах кристаллической решетки с $\eta > \eta_c$, тогда как спаривание таких поляронов в реальном пространстве и образование больших биполяронов становятся возможными в определенных местах кристаллической решетки с $\eta < \eta_c$, где η_c критическое значение η, ниже которого образование большого биполярона становится возможным. Для $\varepsilon_\infty = 3 - 5$ большие биполяроны могут существовать в объемном (т.е. $3D$) кристалле купратов при $\eta \leq \eta_c = 0.135 - 0.138$ (см. Рис. 2 в [69; с.155-160]). При $\eta > \eta_c$ в недолегированных купратах узкая энергетическая зона ($W_p \lesssim 0.1$ эВ) больших поляронов образуется внутри щели Δ_{CT} переноса заряда, тогда как квазисвободные состояния дырок в валентной зоне кислорода становятся возбужденными состояниями дырочных больших поляронов. При этом уровень Ферми ε_F больших поляронов лежит внутри запрещенной зоне купратов и пороговая энергия для фото возбуждения дырочного носителя из поляронного состояния в свободное состояние дырки определяется из выражения [70]

$$\Delta\varepsilon_F = \varepsilon_F^f - \varepsilon_F, \tag{2.1}$$

где $\varepsilon_F^f = \hbar^2(3\pi^2 n_h)^{2/3}/2m_h^* -$ энергия Ферми свободных дырок, появляющихся при легировании купратов в валентной зоне кислорода, $\varepsilon_F = \hbar^2(3\pi^2 n_p)^{2/3}/2m_p -$ энергия Ферми больших поляронов, m_h^*- эффективная масса квазисвободных дырок в валентной зоне кислорода, n_h- концентрация таких свободных дырок, n_pконцентрация дырочных поляронов, причем $n_p = n_h$ (при $\eta > \eta_c$).

Можно считать, что поляронный эффект постепенно ослабляется с увеличением уровня легирования купратов и исчезает в сверхлегированнной области. Это, в свою очередь, приводит к уменьшению эффектной массы

полярона и становится равным массе квазисвободной дырки в сверхлегированном режиме. Энергия оптического возбуждения $\Delta\varepsilon_F$ больших поляронов будет проявляться в одночастичном спектре недолегированных купратов как поляронная (неспаривательная) псевдощель, так как сильное дырочно-фононное взаимодействие приводит к понижению энергии дырок (т.е. уровень Ферми ε_F^f или химический потенциал $\mu = \varepsilon_F^f$ смещается) на величину $\Delta\varepsilon_F$ или поляронный сдвиг электронных состояний валентной зоны кислорода с образованием поляронной псевдощели на уровне Ферми свободных дырочных носителей. В результате этого большая Ферми поверхность свободных дырок превращается в малую Ферми поверхность дырочных поляронов. Когда легирование купратов увеличивается по направлению недолегированной области, внутрищелевая поляронная зона расширяется из-за взаимодействия больших поляронов и сливается с валентной зоной при более высоких уровнях легирования (т.е. сильно сверхлегированных режимах). В недолегированном режиме уровень Ферми дырочных поляронов лежит выше потолка валентной зоны кислорода и одночастичный спектр недолегированных купратов имеет температурно независящую поляронную псевдощель (т.е. падение плотности состояний на уровне Ферми ε_F^f свободных дырок), определяемую из уравнения (2.1). С увеличением уровня легирования $x = n_p/n_a$ (где $n_a = 1/V_a$-плотность или концентрация атомов кристаллической решетки купратов, V_a–объем, приходящийся на каждую формульную единицу CuO_2 вкупратах) кулоновское отталкивание между поляронными носителями увеличивается в металлическом состоянии и энергия связи больших поляронов E_p уменьшается. В результате этого диссоциация больших поляронов происходит при некотором критическом уровне легирования $x = x_p$. При $x < x_p$ пороговую энергию для термического возбуждения дырочного носителя из поляронного состояния в свободное состояние этого носителя или для термической диссоциации большого полярона можно приближенно определить как [70]

$$\Delta_p = E_p - E_c, \tag{2.2}$$

где E_p –энергия связи большого полярона, $E_c = e^2/\varepsilon_0 a_p$ – энергия кулоновского отталкивания между двумя большими поляронами, $a_p = (3/4\pi n_p)^{1/3}$ – среднее расстояние между этими поляронами. Таким образом, в зависимости от способов возбуждения ВТСП-купратов, величины поляронной псевдощели могут быть определены либо из уравнения (2.1), либо из уравнения (2.2). Ясно, что оба $\Delta\varepsilon_F$ и Δ_p уменьшаются с увеличением уровня легирования купратов и их энергетические шкалы являются слегка различными. При этом определение поляронной псевдощели из уравнения (2.2) является более разумным приближением для изучения ее поведения при различных уровнях легирования и для сравнения такой псевдощели с аналогичной псевдощелью, наблюдаемой в различных ВТСП-материалах. Поэтому, температуры перехода из обычного металлического состояния в псевдощелевое металлическое состояние можно определить из соотношения

$$T_p = \Delta_p / k_B \tag{2.3}$$

Теперь определим соответствующие температурные шкалы поляронной псевдошели Δ_p путем вычисления T_c согласно формулы (2.3) как функции x и сравним вычисленную зависимость $T_p(x)$ с экспериментальными результатами для $T_{PG} \simeq E_g/k_B$ (где E_g- энергетическая шкала псевдощели определенная экспериментально в [71; с.53-68]) в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ $(LSCO)$, $YBCO$ и $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ $(Bi-2212)$. Температура перехода в псевдощелевое состояние T_p уменьшается с увеличением уровня легирования x и квантовой критичности, (т.е. квантовый фазовый переход при температуре $T = 0$) происходит при некотором критическом уровне легирования $x = x_p$, при котором T_p становится равным нулю. Различные значения поляронной псевдощели Δ_p в $LSCO$, $YBCO$ и $Bi-2212$ системах, найденные из уравнения

$\Delta_p(x) = 0$ определяют положение такой квантовой критической точки (ККТ) в этих ВТСП-купратах. Непригодность обычной теории Ферми жидкости и превращение большой Ферми поверхности в малую Ферми поверхность происходит при $x = x_p$, выше которой Ферми поверхность находится в ее прежнем большом состоянии. Экспериментально, ККТ в $Nd - LSCO$ лежит в интервале $0.20 \lesssim x_p \lesssim 0.24$ [71; с.53-68, 72; с.180505]. Выбирая следующие значения параметров $E_p \simeq (0.095 - 0.10)$ эВ, $\varepsilon_0 = 30$ и $n_a = 5.3 \cdot 10^{21}\mathrm{cm}^{-3}$ (при $V_a = 190$ Å) для $Nd - LSCO$, находим $x_p \simeq 0.20 - 0.24$ в соответствии с вышеприведенными экспериментальными результатами [71; с.53-68, 72; с.180505]. Поляронная псевдещель в $Bi - 2212$ также, как в $LSCO$, исчезает в ККТ, положение которой в фазовой диаграмме $Bi - 2212$определено нами при следующих значениях параметров $E_p \simeq 0.13$ эВ, $\varepsilon_0 = 25$ и $n_a = 1.3 \cdot 10^{22}\mathrm{cm}^{-3}$. При этом нами показано, что $x_p \simeq 0.22$. Как показано на Рис. 2.1 и 2.2, теоретически предсказанные поведения температуры переходов $T_p(x)$ в псевдощелевыесостояния довольно хорошо согласуются с экспериментальными результатами, полученными для аналогичных температур, характеризующих фазовые переходы из обычного металлического состояния в псевдощелевые состояния в ВТСП-купратах

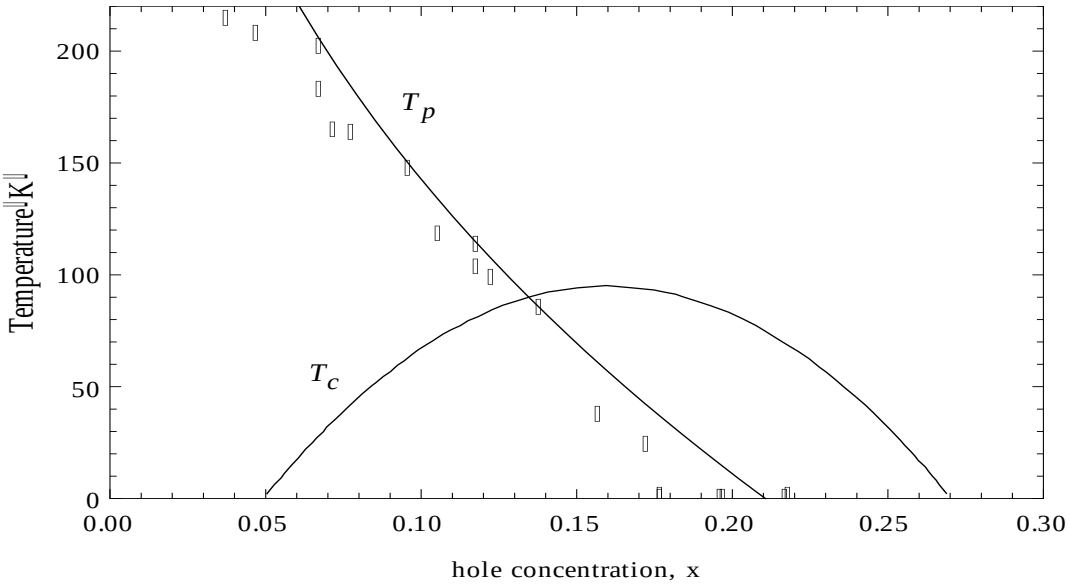

Рис. 2.1. Зависимость температуры образования псевдощелевого состояния $T_p(x)$ в $LSCO$, вычисленная с использованием выражений (2.2) и (2.3)при следующих значениях параметров: $E_p \simeq 0.10$ эВ, $\varepsilon_0 = 30$ и $n_a = 5.3 \times 10^{21}\mathrm{cm}^{-3}$. Для сравнения показаны также экспериментальные данные (белые кружки), соответствующие появлению псевдощели и привиденные в [71; с.53-68] для $LSCO$

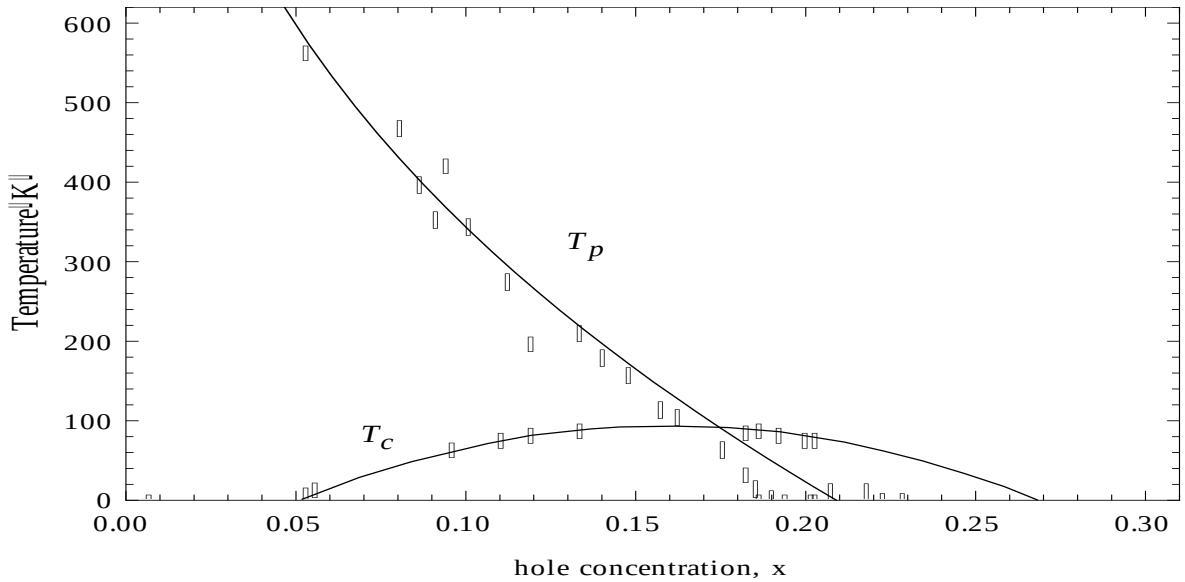

Рис. 2.2. Зависимость температуры образования псевдощелевого состояния $T_p(x)$ от концентрации дырок или от уровня легирования x (сплошная кривая) при значениях параметров $\varepsilon_p \simeq 0.133$ эВ, $\varepsilon_0 \simeq 25 n_a = 1.3 \cdot 10^{22}\mathrm{cm}^{-3}$, в $\mathrm{Bi-2212}$, вычисленная с использованием выражений (2.2) и (2.3). Для сравнения показаны также экспериментальные результаты (незакрашенные кружки и крестики), соответствующие появление псевдощели и приведенные в [71; с.53-68] для $\mathrm{Bi-2212}$.

§2.2. Прекурсивное БКШ-подобное спаривание больших поляронов и образование температурно зависящей спаривательной псевдощели в купратных соединениях на основе лантана и висмута

Механизмы куперовского спаривания носителей тока в обычных металлах и легированных ВТСП-купратах являются совершенно различными. Теория обычных металлов основана на приближении Мигдала $\hbar\omega_D/\varepsilon_F \ll 1$ [73; с.1428], где ω_D – характеристическая дебаевская частота фононов, $\varepsilon_F \gg 1$ эВ- энергия Ферми металлов.Далее Элиашберг распространил теории Мигдала для описания БКШ спаривания электронов в различных металлах при сильных электрон-фононных связях [74; с.1437]. При этом теория Мигдала-Елиашберга, основанная на адиабатическом приближении $\hbar\omega_D/\varepsilon_F \ll 1$ оказалась асимптотически корректной только для обычных металлов, где $\hbar\omega_D/\varepsilon_F \lesssim 10^{-2}$ и куперовское спаривание электронов и БКШ конденсация слабо связанных (фермионных) куперовских пар в сверхтекучее ферми-жидкостное состояние происходят одновременно при $T = T_c$ из-за слабой электрон-фононной связи (т.е. из-за отсутствия каких-либо поляронных эффектов). Поэтому применение теории БКШ для описания явления сверхпроводимости хорошо оправдано в обычных металлических сверхпроводниках. Однако, ВТСП-купраты с низкой энергией Ферми $\varepsilon_F \simeq (0.1 - 0.3)$эВ [37; с.767-768, 75, 76; с.10516] и высокочастотными оптическими фононами ($\hbar\omega_0 = (0.04 - 0.08)$ эВ [36; с.473, 38; с.897, 76; с.10516]) находятся в неадиабатическом режиме [70; с.2173, 76; с.10516] и характеризуются необычными электрон-фононными связями (которыми будут вызваны поляронные эффекты в полярных материалах). В этих ВТСП-материалах (в которых адиабатическое отношение $\hbar\omega_0/\varepsilon_F$ не является малым), теория Мигдала-Элиашберга становится неприменимой.

Предполагается, что легированные ВТСП-купраты будут находиться в сильных и промежуточных электрон-фононных режимах, где поляронные эффекты кажется будут важными и определяющими факторами,

ответственными за куперовское спаривание поляронных носителей в нормальном состоянии выше T_c и образование БКШ-подобной спаривательной псевдощели. В этом случае стандартная теория БКШ спаривания квазисвободных носителей тока, описывающая образование куперовских пар при температуре сверхпроводящего перехода, уже не работает. В режиме сильной электрон-фононной связи спаривание автолокализованных дырок (больших поляронов) посредством обмена статическими фононами происходит в реальном пространстве и приводит к образованию локализованных (т.е. неподвижных) больших биполяронов в слабо легированных купратах, которые являются (би)поляронными диэлектриками при $x \lesssim 0.05$. В то время как куперовское спаривание больших поляронов посредством комбинированного обмена статическими и динамическими фононами ожидается в промежуточном режиме БКШ-подобной электрон (или дырочно)-фононной связи. В результате этого необычного механизма спаривания поляронных носителей, образование некогерентных куперовских пар поляронов становится возможным при некоторой характеристической температуре $T^* > T_c$ в нормальном состоянии недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратов [40; с.17]. При этом необычные электрон-фононные взаимодействия(т.е. комбинированные и более эффективные БКШ и Фрёлиховское типы притягательных взаимодействий) будут ответственными за куперовские парные корреляции между автолокализованными носителями (т.е. носители, одетые в деформационные шубы, называемые также поляризационные шубы) выше T_c в этих ВТСП-системах. Однако, в пределе слабой электрон-фононной связиБКШ-типа, куперовское спаривание квазисвободных носителей тока путем обмена динамическими фононами происходит при $T^* = T_c$ в обычных металлах и сильно сверхлегированных купратах (поведения которых напоминают обычные металлы выше T_c и БКШ сверхпроводники ниже T_c) из-за отсутствия поляронных эффектов. В отличие от таких простых металлов, недолегированные, оптимально легированные и умеренно сверхлегированные купратные соединения являются необычными металлами и имеют хорошо

определенные Ферми поверхности, как это следует из ARPES данных [32; с.61-122, 75, 77; с.47-183]. В этих ВТСП-системах возникает новая ситуация, когда существуют поляронные эффекты и механизм притягательного спаривательного взаимодействия (например, из-за обмена статическим и динамическим фононами) между носителями тока, действующий в энергетическом диапазоне $\{-(E_p + \hbar\omega_{LO}), (E_p + \hbar\omega_{LO})\}$ является более эффективным, чем в простой БКШ картине, где ω_{LO} частота продольного оптического фонона. Предполагается, что распространение теории БКШ к таким необычным ситуациям может описать естественно прекурсивное (несверхпроводящее) куперовское спаривание поляронных носителей выше T_c и появление энергетической щели на поверхности Ферми при температуре $T^* > T_c$ или даже при $T^* >> T_c$ в ВТСП-купратах [40; с.17, 70]. Такая БКШ-подобная энергетическая щель, появляющаяся в температурном интервале $T_c < T < T^*$, называется как спаривательной псевдощелью.

Многие экспериментальные данные свидетельствуют о необычном нормальном состоянии ВТСП-купратов [32; с.61-122, 33; с.17, 34; с.721, 35; с.1719, 36; с.473], характеризуемым открыванием щели в спектре электронного возбуждения при температуре T^* выше T_c. Эти экспериментальные факты вызвали интенсивные споры о происхождении такой энергетической щели в нормальном состоянии ВТСП-материалов, так как ответ на этот вопрос может оказаться существенным для понимания не только нормального состояния, но и сверхпроводящего состояния ВТСП-систем. В настоящее время определенный и ясный ответ на вопрос о природе такого псевдощелевого состояния в ВТСП-купратах еще отсутствует (см. например, фазовые диаграммы, приведенные в [32; с.61-122, 35; с.1719, 39; с.353-419]). При этом понимание псевдощелевого состояния ВТСП-купратов не представляется возможным без удовлетворительного ответа на следующие фундаментальные вопросы: как изменяется спаривательная псевдошель с увеличением или уменьшением уровня легирования? Есть ли связь между этой псевдощелью и сверхпроводящей щелью

или температурой сверхпроводящего перехода T_c? Какова истинная фазовая диаграмма ВТСП-купратов в их нормальном состоянии?

Далее симметрия спаривательной псевдощели является одним из наиболее спорных вопросов в физике ВТСП-систем. Хотя некоторые экспериментальные наблюдения дают свидетельство в пользу -волновой симметрии [78; с.969], многие другие эксперименты [79; с.2267, 80; с.1621-1623, 81; с.214535, 82; с.109] говорят в пользу s-волновой спаривательный псевдощели. В частности, d-волновое псевдощелевое состояние несовместимо с экспериментами по туннелированию вдоль c-оси и закрученным контактам [80; с.1621-1623], по андреевским отражениям [82; с.109], джосефсонским переходам [79; с.2267], ARPES [81; с.214535] и другими экспериментами. Исследования вихрей в ВТСП-купратах с помощью сканирующего туннельного микроскопа (как обсуждено в [83; с.466-469]) показали также низкоэнергетическую электронную структуру отличную от электронной структуры, предсказанной -волной моделью БКШ спаривания, тогда как эксперименты по c-осевым бикристальным закрученным джозефсонским контактам и естественным поперечным нитевидным кристаллическим контактам [84; с.4160] обеспечивают убедительное доказательство в пользу s-волнового параметра порядка в ВТСП-материалах. Мюллер утверждал [85; с.3-6] что d-волновое состояние куперовских пар может, на самом деле, существовать в объеме (т.е. в $3D$ случае). Поэтому, можно ожидать, что -волновое куперовское спаривание является благоприятным в объеме ВТСП-купратов и s-волновое псевдощелевое состояние может происходить от необычных электрон-фононных взаимодействий. Очевидно, что теория БКШ должна быть модифицирована, чтобы включить поляронные эффекты. Применяя модифицированный БКШ формализм к взаимодействующему Ферми газу поляронов, можно написать гамильтониан этой системы с парным взаимодействием между фермионами в виде

$$H_F = \sum_{k\sigma} \varepsilon(\vec{k}) a^+_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} V_p(\vec{k},\vec{k}') a^+_{\vec{k}\uparrow} a^+_{-\vec{k}\downarrow} a_{-\vec{k}'\downarrow} a_{\vec{k}'\uparrow}, \qquad (2.4)$$

где $\varepsilon(\vec{k}) = \hbar^2 k^2/2m_p$ – энергия полярона измеряемый от уровня Ферми ε_F, $\vec{k}$ и m_p – соответственно волновой вектор и масса полярона, $a^+_{\vec{k}\sigma}$ ($a_{\vec{k}\sigma}$) - оператор рождения (уничтожения) полярона с проекцией спина σ (=↑ или ↓), $V_p(\vec{k},\vec{k}')$ – парный потенциал взаимодействия между большими поляронами. Гамильтониан (2.4) диагонализируется с помощью стандартного боголюбовского преобразования Ферми операторов

$$a_{\vec{k}\uparrow} = u_{\vec{k}} b_{\vec{k}\uparrow} + v_{\vec{k}} b^+_{\vec{k}}, \qquad a_{-\vec{k}\downarrow} = u_{\vec{k}} b_{-\vec{k}\downarrow} - v_{\vec{k}} b_{\vec{k}\uparrow}$$
$$a^+_{\vec{k}\uparrow} = u_{\vec{k}} b^+_{\vec{k}\uparrow} + v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}\downarrow}, \qquad a^+_{-\vec{k}\downarrow} = u_{\vec{k}} b_{-\vec{k}\downarrow} - v_{\vec{k}} b_{\vec{k}\uparrow}, \tag{2.5}$$

где $u_{\vec{k}}$ и $v_{\vec{k}}$ –вещественные функции, симметричные относительно преобразования $\vec{k} \to -\vec{k}$ и удовлетворяющие условию

$$u^2_{\vec{k}} + v^2_{\vec{k}} = 1 \tag{2.6}$$

новые операторы $b_{\vec{k}\sigma}$ и $b^+_{\vec{k}\sigma}$ также как и старые операторы $a_{\vec{k}\sigma}$ и $a^+_{\vec{k}\sigma}$ удовлетворяют антикоммутационным соотношениям Ферми операторов

$$\left[b_{\vec{k}\sigma}, b_{\vec{k}'\sigma'}\right] = \left[b^+_{\vec{k}\sigma}, b^+_{\vec{k}'\sigma'}\right] = 0, \ \left[b_{\vec{k}\sigma}, b^+_{\vec{k}'\sigma'}\right] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\sigma\sigma'} \tag{2.7}$$

Подставив (2.5) в (2.4) с учетом (2.6) и (2.7), преобразуем гамильтониан (2.4) к виду

$$H_F = E_0 + \sum_k E(\vec{k})(b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + b^+_{-\vec{k}} b_{-\vec{k}}), \tag{2.8}$$

где $E_0 = \sum_k [2\varepsilon(\vec{k}) v^2_{\vec{k}} - 2\Delta(\vec{k}) u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}]$ –постоянное слагаемое, не зависящее от ферми-оператора и соответствующая энергии основного состояния,

$$u_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left[1 + \frac{\varepsilon(\vec{k})}{E(\vec{k})}\right], \quad v_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left[1 - \frac{\varepsilon(\vec{k})}{E(\vec{k})}\right], \tag{2.9}$$

$$E(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k})(u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2) + 2\Delta_F(\vec{k})u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} = \sqrt{\varepsilon^2(\vec{k}) + \Delta_F^2(\vec{k})} \qquad (2.10)$$

Как видно, второй член в (2.8) описывает спектр энергии возбуждения системы (т.е., спектр возбуждения квазичастиц), причем $E(\vec{k})$ –энергия одной квазичастицы и величина энергетической щели (т.е. БКШ-подобной псевдощели) $\Delta(\vec{k})$ в спектрах возбуждения квазичастиц определяется из выражения (при $T = 0$)

$$\Delta_F(\vec{k}) = -\sum_k V_p\,(\vec{k},\vec{k}')\frac{\Delta_F(\vec{k}')}{2E(\vec{k})} \qquad (2.11)$$

Таким образом, возбужденное состояние поляронных куперовских пар в ВТСП-купратах будет отделено от их основного состояния БКШ-подобной энергетической щели (или псевдощели), которая определяется при $T = 0$ из (2.11). При конечной температуре $T \neq 0$ эта псевдощель определяется из уравнения [86; с.43-50]

$$\Delta_F(\vec{k},T) = -\sum_{\vec{k}'} V_p(\vec{k},\vec{k}')\frac{\Delta_F(\vec{k}',T)}{E(\vec{k}',T)}\,tanh\frac{E(\vec{k}',T)}{2k_BT} \qquad (2.12)$$

Теперь для определения температуры образования БКШ-подобной псевдощели T^* и величины этой псевдощели, используем модельный потенциал боголюбовского типа, который можно выбрать как

$$V_p(\vec{k},\vec{k}') = \begin{cases} V_c - V_{ph} & \text{для } |\varepsilon(\vec{k})|,\ |\varepsilon(\vec{k}')| \le \varepsilon_A = E_p + \hbar\omega_{LO} \\ V_c & \text{для } \varepsilon_A \le |\varepsilon(\vec{k}')|,\ |\varepsilon(\vec{k}')| < \varepsilon_c, \\ 0 & \text{для остальных случаях} \end{cases} \qquad (2.13)$$

где V_c –отталкивательный кулоновский потенциал взаимодействия между поляронными носителями, V_{ph} –притягательный потенциал эффективного взаимодействия между этими носителями путем обмена статическим и динамическим фононами, ε_A –энергия обрезания для такой притягательной

части потенциала $V_p(\vec{k},\vec{k}')$, ε_c –энергия обрезания для кулоновской отталкивательной части потенциала $V_p(\vec{k},\vec{k}')$.

Используя модельный потенциал (2.13) и заменяя суммирование по $\vec{k}$ интегралом по ε в уравнении (2.12), получаем следующее БКШ-подобное уравнение для определения энергетической щели Δ_F и температуры образования поляронных куперовских пар T^* (Приложение А) [87; с.1131]:

$$\frac{1}{\lambda^*} = \int_0^{\varepsilon_A} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta_F^2(T)}} tanh \frac{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta_F^2(T)}}{2k_B T}, \tag{2.14}$$

где $\lambda^* = D_p(\varepsilon_F)\tilde{V}_p$-БКШ-подобная константа связи, $D_p(\varepsilon_F)$-плотность состояний на уровне Ферми ε_F,

$$\tilde{V}_p = V_{ph} - \frac{V_c}{1+D_p(\varepsilon_F)V_c \ln(\varepsilon_c/\,\varepsilon_A)} \tag{2.15}$$

эффективный спаривательный потенциал взаимодействия между поляронными носителями, $\varepsilon_c \gg \varepsilon_A$.

При $T = 0$ решая уравнение (2.14) для $\Delta_F(0)$, находим

$$\Delta_F(0) = \frac{\varepsilon_A}{\sinh(1/\lambda^*)}, \tag{2.16}$$

численное решение уравнения (2.14) определяет температурную зависимость БКШ-подобной псевдощели $\Delta_F(T)$, которая показана на рис. 2.3, а в пределе слабой связи ($\lambda^* \ll 1$) имеем

$$\Delta_F(0) \simeq 2\varepsilon_A \exp\left[-\frac{1}{\lambda^*}\right] \tag{2.17}$$

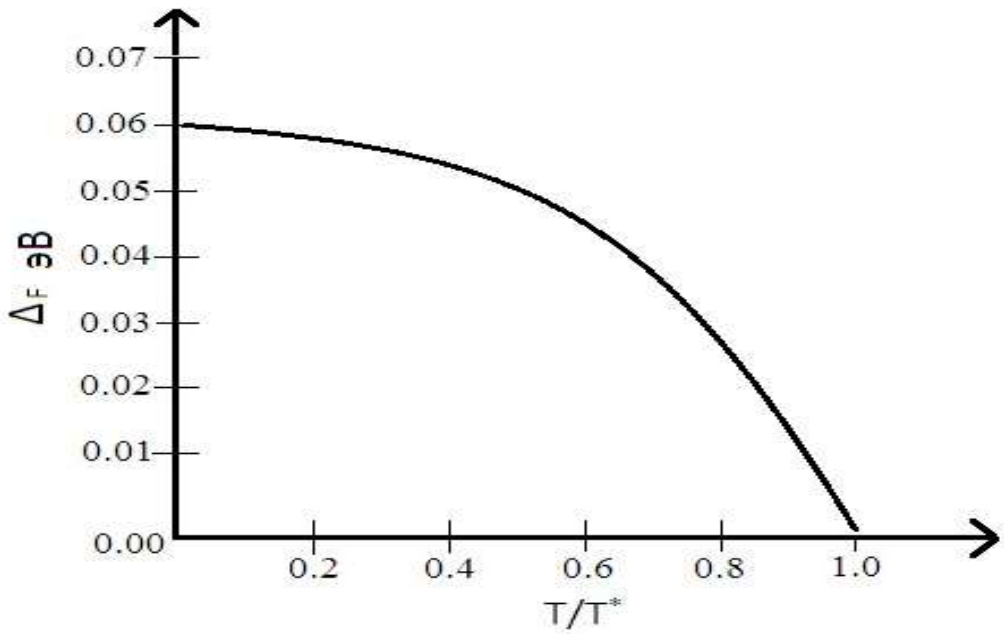

Рис. 2.3. Температурная зависимость БКШ-подобной спаривательной псевдощели Δ_F, вычесленная с использованием уравнения (2.14) при $\boldsymbol{\varepsilon_A = 0.12}$eV и $\boldsymbol{\lambda^* = 0.65}$.

Величину $2\Delta_F$ можно рассматривать как энергию связи поляронных куперовских пар, которую надо затратить для ее разрыва. Из (2.17) видно, что образование куперовских пар тесно связано с существованием поляронной Ферми поверхности (где плотность числа состояний отлична от нуля) и эта связь проявляется в величине энергетической щели (т.е. псевдощели) Δ_F, обращающейся в нуль при $D_p(\varepsilon_F) \to 0$ или $\varepsilon_F \to 0$ (см. ниже). Из рис. 2.3 видно, что энергетической щель Δ_F постепенноуменьшается с увеличением температуры и стремится к нулю при $T \to T^*$. Поэтому уравнение (2.14) при $T = T^*$ можно написать как

$$\frac{1}{\lambda^*} = \int_0^{\varepsilon_A} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} tanh \frac{\varepsilon}{2k_B T^*} \tag{2.18}$$

Вводя новую переменную

$$y = \frac{\varepsilon}{2k_B T^*} \tag{2.19}$$

интеграл в уравнении (2.18) можно преобразовать к виду

$$\frac{1}{\lambda^*} = \int_0^{\varepsilon_A/2k_BT^*} \frac{dy}{y} tanhy \tag{2.20}$$

Теперь выполняя сначала интегрирование по частям, а затем заменяя верхний предел быстро сходящегося интеграла на бесконечность получаем

$$\frac{1}{\lambda^*} = lny \cdot tanhy \int_0^{\varepsilon_A/2k_BT^*} - \int_0^{\infty} \frac{lny}{cosh^2 y} dy \simeq \ln\frac{\varepsilon_A}{2k_BT} - ln\frac{\pi}{4\gamma} \tag{2.21}$$

где нами учтено, что $\varepsilon_A = E_p + \hbar\omega_{LO} \gg 2k_BT^*$ и $tanh(\varepsilon_A/2k_BT^*) \approx 1$. Далее учитывая, что константа Эйлера $C = ln\gamma = 0.5772$, из уравнения (2.21) находим

$$k_BT^* = \frac{2\varepsilon_A}{\pi}\gamma\exp[-\frac{1}{\lambda^*}] \approx 1.134\varepsilon_A\exp[-\frac{1}{\lambda^*}] \tag{2.22}$$

Это выражение для T^* хорошо применимо как при слабой ($\lambda^* < 0.3$), так и при промежуточной ($0.3 \lesssim \lambda^* \lesssim 0.6$) БКШ-подобной электрон-фононной связи. При этом соотношение (2.22) является довольно корректным при $\varepsilon_A/k_BT^* \gtrsim 5$ и становится уже приближенным при $\varepsilon_A/k_BT^* < 5$. Поэтому, воспользовавшись соотношениями (2.16) и (2.22), находим

$$\frac{2\Delta_F(0)}{k_BT^*} = \frac{4\cdot e^{1/\lambda^*}}{1.135(e^{\frac{1}{\lambda^*}} - e^{-\frac{1}{\lambda^*}})} \simeq \frac{3.61}{1-e^{-\frac{2}{\lambda^*}}} \tag{2.23}$$

это отношение является характерной величиной, которая измеряется в экспериментах.

Здесь необходимо отметить, что куперовское спаривание поляронных носителей в ВТСП-купратах является необходимым, но недостаточным условием для появления сверхпроводимости в этих полярных материалах. В действительности, прекурсивное (не сверхпроводящие) куперовское спаривание носителей тока в нормальном состоянии недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных купратов может быть вызвано поляронными эффектами, и псевдощелевая область ($T_c < T < T^*$) поведет себя как необычный металл, а не как сверхпроводник. Необычно большие значения отношения $2\Delta_F(0)/k_BT_c \simeq 7 - 22$, которые наблюдались в $Bi - 2212$ [39; с.353-419] и $2\Delta_F(0)/k_BT_c \simeq$ 6-9 - в $LSCO$ [38; с.897, 39; с.353-419] по сравнению с его БКШ значением $2\Delta_F(0)/k_BT_c \simeq 3.52$ свидетельствуют о том, что БКШ-подобная энергетическая щель, определенная с помощью туннельных и ARPES измерений не обращается в нуль при T_c и эта щель не связана с сверхпроводящим переходом при $T = T_c$ в ВТСП-купратах. При этом отношение $2\Delta_F(0)/k_BT_c$ не является постоянным и сильно меняется (т.е. быстро растет) с уменьшением уровня легирования ВТСП-купратов [39; с.353-419]. В отличие от отношения $2\Delta_F(0)/k_BT_c$, экспериментально измеренные значения отношения $2\Delta_F(0)/k_BT^*$ в ВТСП-материалах остаются почти постоянными и близкими предсказанным нами значениям в уравнении (2.23). Это означает, что БКШ-подобная энергетическая щель, определяемая из уравнений (2.14) и (2.16) является температурно зависящей спаривательной псевдощелью, причем экспериментальные данные указывают на то, что связь между этой псевдощелью Δ_F и характеристической температурой куперовского спаривания носителей выше T_c является удивительно хорошей, чем связь между Δ_F и T_c [39; с.353-419]. Далее вышеизложенная теория образования спаривательной псевдощели Δ_F предсказывает очень важную закономерность изменения двух типов отношений $2\Delta_F(0)/k_BT^*$ и $2\Delta_F(0)/k_BT_c$ с увеличением уровня легирования ВТСП-материалов в полном согласии с экспериментальными наблюдениями, т.е., развитая нами теория БКШ-подобного спаривания поляронов предсказывает,

что значение отношения $2\Delta_F(0)/k_BT_c$ приближается к значению отношения $2\Delta_F(0)/k_BT^* \simeq 3.52 - 3.6$ с увеличением уровня легирования до сверхлегированного режима, при котором восстанавливается обычная БКШ картина куперовского спаривания квазисвободных носителей при $T^* = T_c$ или при $2\Delta_F(0)/k_BT^* = 2\Delta_F(0)/k_BT_c$, как это наблюдалось во многих экспериментах [32; с.61-122, 41; с.29-33, 45; с.149, 89; с.157].

Для иллюстрации существования вышесказанных корреляций между теоретическими предсказаниями и экспериментальными обнаружениями, приведем некоторые количественные оценки величины БКШ-подобной псевдощели $\Delta_F(0)$, $2\Delta_F(0)/k_BT_c$, $2\Delta_F(0)/k_BT^*$ и температуры образования псевдощели и сопоставим полученные результаты с имеющимися экспериментальными данными для $LSCO$ и $Bi-2212$. Используя значение $\varepsilon_A = 0.12$ эВ и значения БКШ-подобной константы связи $\lambda^* = 0.6$ и $\lambda^* = 0.45$ соответственно для недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратов, находим из (2.16) $\Delta_F(0) \simeq 0.44$ мэВ и $\Delta_F(0) \simeq 0.25$ мэВ, которые хорошо согласуются экспериментальными значениями энергетической щели $\Delta = 42$ мэВи $\Delta = 25$ мэВ, наблюдаемых в нормальном состоянии ВТСП-купратов $Bi-2212$ [32; с.61-122]. Вычисленные значения $\Delta_F(0)$ и других параметров и экспериментально найденные их значения приведены в таблице 2.1.

Таблица 2.1. Теоретические и экспериментальные значения БКШ-подобной спаривательной псевдощели $\Delta_F(0)$ и характеристическая температура появления этой псевдощели T^* на поверхности Ферми в различных классах купратных соединений.

Купратные соединения	Теория					Эксперимент [32,39,43]		
	ε_A эВ	$\Delta_F(0)$ эВ	λ^*	T^* K	$\frac{\varepsilon_A}{k_B T}$	T_c K	Δ_0 эВ	T^* K
LSCO UD	0.11	0.013	0.350	83	15.34	40	0.016	82
LSCO OD	0.10	0.010	0.312	53	21.73	40	0.010	53
Bi-2212 UD	0.13	0.034	0.485	217	6.93	60	0.036	217
Bi-2212 UD	0.13	0.028	0.444	180	8.39	82	0.027	180
Bi-2212 UP	0.14	0.022	0.391	142	11.37	88	0.025	142
Bi-2212 OP	0.14	0.017	0.355	110	14.74	90	0.020	110
Bi-2212 OD	0.15	0.019	0.358	120	14.40	82	0.020	120
Bi-2212 OD	0.12	0.011	0.319	68	20.25	10	0.012	68
Hg$Ba_2Ca_2Cu_3O_{8+\delta}$	0.13	0.039	0.520	250	6.04	115	-	250
$Pb_2Sr_2(Y,Ca)Cu_3O_{8+\delta}$	0.13	0.022	0.400	140	10.74	80	-	140

UD- (underdoped) недолегированный

OP- (optimallydoped) оптимальнолегированный

OD- (overdoped) сверхлегированный

Таблица 2.2. Теоретические и экспериментальные значения БКШ-подобных отношений $2\Delta_F(0)/k_BT_c$, $2\Delta_F(0)/k_BT^*$, $2\Delta_F(0)/k_BT_c$ и $2\Delta_F(0)/k_BT^*$ в ВТСП-купратах

Купратные соединения	Теория		Эксперимент	
	$\frac{2\Delta_F(0)}{k_BT_c}$	$\frac{2\Delta_F(0)}{k_BT^*}$	$\frac{2\Delta_0}{k_BT_c}$	$\frac{2\Delta_0}{k_BT^*}$
LSCO UD	7.54	3.67	9.27	4.52
LSCO OD	5.80	4.37	5.80	4.37
Bi-2212 UD	13.13	3.63	13.91	3.85
Bi-2212 UD	7.92	3.61	7.63	3.48
Bi-2212 OP	5.79	3.59	6.58	4.08
Bi-2212 OP	4.38	3.58	5.15	4.21
Bi-2212 OD	5.37	3.67	5.65	3.86
Bi-2201 OD	25.49	3.75	27.81	4.09
Hg$Ba_2Ca_2Cu_3O_{8+\delta}$	7.86	3.62	-	-
$Pb_2Sr_2(Y,Ca)Cu_3O_{8+\delta}$	6.37	3.64	-	-

Приведенные в таблицах 2.1 и 2.2 теоретические значения БКШ-подобной щели $\Delta_F(0)$, температуры ее появления T^* в нормальном состоянии (т.е. выше T_c), БКШ-подобных отношений $2\Delta_F(0)/k_BT_c$ и $2\Delta_F(0)/k_BT^*$ находятся в разумном согласии с экспериментально измеренными значениями спаривательной энергетической щели Δ_0, температуры перехода T^* в псевдощелевое состояние, отношений $2\Delta_F(0)/k_BT_c$ и $2\Delta_F(0)/k_BT^*$ в различных купратных ВТСП.

§2.3. Концентрационные зависимости БКШ-подобной псевдощели и температуры ее образования в лантановых и висмутовых ВТСП-купратах

Сверхпроводящий переход в легированных ВТСП-купратах все еще рассматривается многими авторами как БКШ переход. Однако, БКШ-подобная щель Δ_F тесно связана с температурой перехода T^* в псевдощелевое состояние, а не с температурой перехода T_c купратных ВТСП в сверхпроводящее состояние. Это однозначно свидетельствует о том, что энергетическая щель (или псевдощель) Δ_F, появляющаяся в спектрах возбуждения недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратов выше T_c не является сверхпроводящей щелью (т.е. сверхпроводящим параметром порядка) ниже T_c вопреки существующим противоречивым предположениям, согласно которым БКШ-подобная псевдощель выше T_c как прекурсивная становится сверхпроводящей щелью ниже T_c. Из нового и более общего выражения (2.22), содержащего предэкспоненциальный множитель $\varepsilon_A = E_p + \hbar\omega_{LO}$ следует, что поляронные эффекты контролируют существенно физику ВТСП-купратов при промежуточных уровнях их легирования начиная от недолегированного до сильно сверхлегированного режима. Поэтому, БКШ-подобный переход в нормальном состоянии при температуре $T^* > T_c$ будет несверхпроводящим переходом в этих ВТСП-материалах, где поляронные эффекты играют решающую роль в прекурсивном (несверхпроводящим) куперовском спаривании носителей тока n, характеристическая температура T^*,

определяемая из БКШ-подобного уравнения (2.18) не является уже критической температурой сверхпроводящего перехода T_c. Теперь, для того чтобы определить зависимости БКШ-подобной спаривательной псевдощели Δ_F от уровней легирования и аналогичной зависимости характеристической температуры T^* для появления такой псевдощели на поверхности Ферми ε_F, можно аппроксимировать плотности состояния поляронов в простой форме [86; с.29-37]

$$D_p(\varepsilon_F) = \begin{cases} 1/\varepsilon_F & \text{для } \varepsilon \leq \varepsilon_F = \hbar^2(3\pi^2 n_p)^{2/3}/2m_p \\ 0 & \text{в других случая} \end{cases} \tag{2.24}$$

Используя это приближение, получаем из (2.16) и (2.22) следующие выражения для Δ_F и T^*:

$$\Delta_F(x) = \frac{\varepsilon_A}{\sinh[\hbar^2(3\pi n_a x)^{\frac{2}{3}}/2m_p\tilde{V}_p]} \tag{2.25}$$

и

$$k_B T^* \simeq 1.134\varepsilon_A \exp\left[-\frac{\hbar^2(3\pi n_a x)^{\frac{2}{3}}}{2m_p\tilde{V}_p}\right]. \tag{2.26}$$

Из этих выражений (2.25) и (2.26) следуют, что как БКШ-подобная псевдощель $\Delta_F(x)$, так и температура открывания такой псевдощели $T^*(x)$ на Ферми поверхности больших поляронов ε_F в нормальном состоянии ВТСП-купратов $LSCO$ и $Bi-2212$ увеличивается экспоненциально с уменьшением уровня их легирования x от умеренно сверхлегированного ($x \approx 0.2$) до недолегированного ($x \simeq 0.05$) режима. Такие зависимости Δ_F и T^* от уровня легирования xнаблюдались экспериментально в вышеупомянутых ВТСП-материалах [89; с.157, 90; с.2622, 91; с.1535, 92; с.062501]. Для иллюстрации вышесказанного поведения $T^*(x)$ в $LSCO$, вычислим зависимость $T^*(x)$ при заданных значениях $\varepsilon_A \simeq 0.10$ эВ, $m_p = 2m_e$ и $\tilde{V}_p = 0.07$ эВ. Экспериментальные значения $T^*(x)$ для $LSCO$ показаны на Рис. 2.4, где вычисленные значения $T^*(x)$ сравнены с экспериментальными данными. Как видно из Рис. 2.4 теоретическая кривая $T^*(x)$ разумно согласуется с экспериментальными результатами для $T^*(x)$. БКШ-подобная псевдощель $\Delta_F(x)$ проявляет очень похожую экспоненциальную

зависимость (сплошная кривая на Рис. 2.5), и она увеличивается с уменьшением x в недолегированной области. Согласие между вычисленной зависимостью $\Delta_F(x)$ и экспериментальными точками для псевдощели $\Delta^*(x)$ в $Bi-2212$ (как показано на Рис. 2.5) является довольно хорошим.

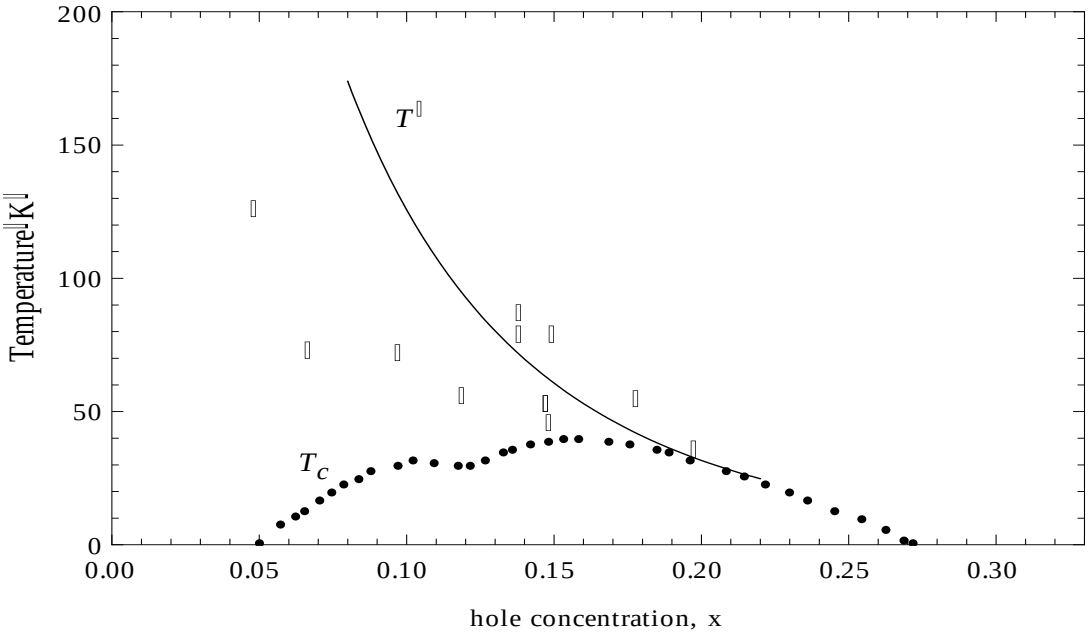

Рис. 2.4. Вычисленная зависимость температуры образования БКШ-подобной псевдощели T^* от концентрации дырок или от уровня легирования x (сплошная кривая) при значениях параметров $\varepsilon_A \simeq 0.10$ эВ, $n_a = 5.3 \cdot 10^{21} cm^{-3}$, $\widetilde{V}_p = 0.07$ эВ, $m_p = 2m_e$. Экспериментальные точки для T^* взяты из ARPES (белые кружки) и туннельные (черные треугольники) данные для $LSCO$ [93; с.094504].

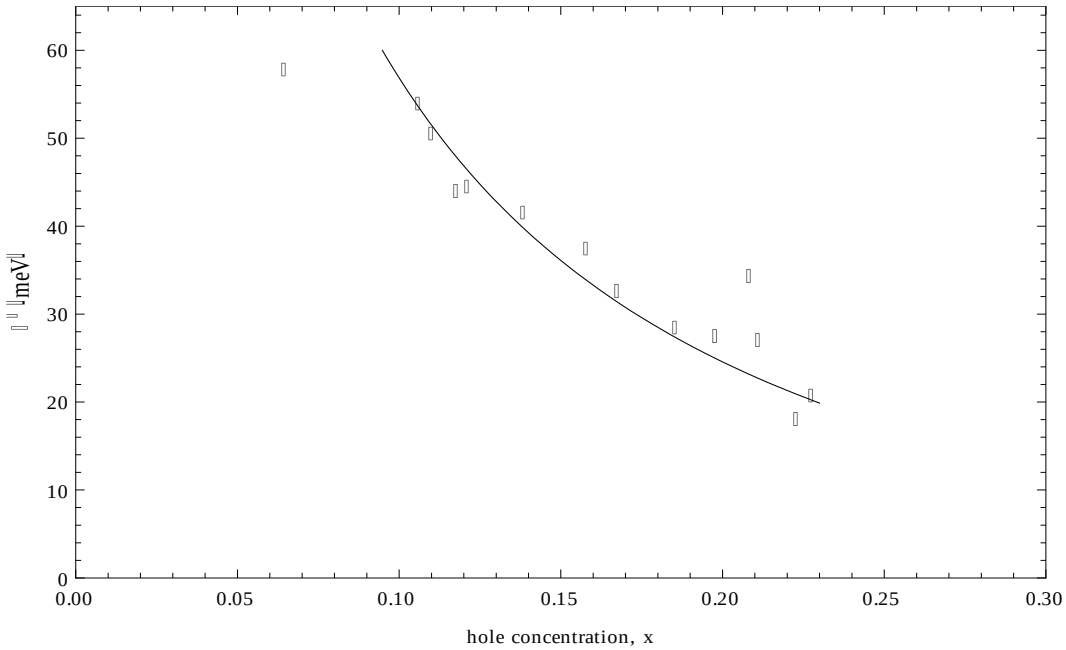

Рис. 2.5. Вычисленная зависимость БКШ-подобной псевдощели Δ_F от уровня легированияx (сплошная кривая) при заданных значениях параметров $\varepsilon_A \simeq 0.107$ эВ, $n_a = 1 \cdot 10^{22}\mathrm{cm}^{-3}$, $\widetilde{V}_p = 0.125$ эВ, $m_p = 2m_e$ и сравниваемая с экспериментальными значениями псевдощели Δ^* в $Bi-2212$ (белые кружки, квадраты и звездочки) [94; с.087003].

§2.4. Фазовая диаграмма нормальных состояний ВТСП-купратов и псевдощелевая квантовая критическая точка

Вышеприведенные результаты по неспаривательной (поляронной) и БКШ-подобной спаривательной псевдощелям позволяют установить истинную фазовую диаграммы ВТСП-материалов в их нормальном состоянии. Понимание же фазовой диаграммы нормального состояния этих материалов от слабо легированного до сверхлегированного режима, в свою очередь, может дать подходящие ключи для раскрытия механизмов высокотемпературной сверхпроводимости. Как описано выше, два типа псевдощелей, имеющих различную природу могут существовать в недолегированных, оптимально легированных и умеренных сверхлегированных ВТСП-купратах. В спектрах возбуждения этих ВТСП-систем (в частности, $LSCO$ и $Bi-2212$ системах), поляронная и БКШ-подобная псевдощели появляются соответственно при

характеристических температурах T_p и T^* выше T_c. Поляронная псевдощель Δ_p являетсятемпературно независящей и характеризуется энергетической шкалой порядка $k_B T_p$. В то время как БКШ-подобная псевдощель $2\Delta_F$ является температурно зависящей и характеризуется другой энергетической шкалой порядка $3.52 k_B T^*$ (при слабой электрон-фононной связи, $\lambda^* \ll 1$) или $3.62\ k_B T^*$ (при промежуточных и необычных электрон-фононных связах, $\lambda^* \simeq 0.3 \div 0.8$). Отличительная особенность поляронной псевдощели состоит в том, что она постепенно уменьшается с увеличением уровня легирования x и исчезает при некоторой критической концентрации дырочных носителей (т.е. при некотором критическом легировании $x_c = x_p$ которой соответствует ККТ). Характеристическая температура появления такой псевдощели T_c в легированных ВТСП-системах ($LSCO$ и $Bi-2212$) также уменьшается с увеличением xи приближается к нулю при ККТ, x_p. При $\varepsilon_\infty = 3.5 - 4.0$ и $\eta = 0.02 - 0.10$, энергия связи больших биполяронов в ВТСП-купратах ($E_{bp} \simeq 0.01 - 0.04$ эВ) намного меньше, чем энергия связи больших поляронов ($E_p \simeq 0.07 - 0.10$ эВ) [69; с.484] и, поэтому диссоциация таких биполяронов происходит при низких уровнях легирования $x \lesssim 0.05$. Тогда как диссоциация больших поляронов происходит при высоких уровнях легирования $x = x_p \gg 0.05$. Положение поляронной (или псевдощелевой) ККТ в этих материалах можно найти при $\Delta_p = 0$ из уравнения (2.2). При этом выбирая значения параметров $E_p = 0.09$ эВ и $n_a = 5.3 \cdot 10^{21}\mathrm{cm}^{-3}$, находим положение ККТ, $x_c = x_p \simeq 0.22$ в $LSCO$ в соответствии с экспериментальными результатами [71; с.53-68]. Многие экспериментальные исследования [41; с.29-33, 42; с.15-19, 93; с.094504, 95; с.880-881] убедительно свидетельствуют о существовании конечной псевдощели в сверхлегированных $LSCO$ (где $x \simeq 0.21 - 0.22$). Кроме того, измерения транспортных характеристик сверхлегированных $LSCO$ показали, что температура образования T^* намного больше, чем T_c для $x = 0.22$ [96; с.2636] и становится равным T_c в сильно сверхлегированной области. Эти экспериментальные результаты указывают на то, что большая псевдощель,

наблюдаемая в *LSCO*, остается даже при высоких уровнях легирования $x > 0.22$. Такая псевдощелевая особенность в *LSCO* скорее всего связана с поляронной псевдощелью, которая исчезает при $x_c = x_{KKT} = x_p \simeq 0.21 - 0.24$ [95; с.880-881, 96; с.2636, 97; с.11077], а не с другой неспаривательной псевдощелью, предложенной некоторыми авторами (см. например, [50; с.61-20, 98; с.1694-1698, 99; с.667]). Действительно, используя уравнение (2.2) и значения параметров $E_p \simeq 0.10$ эВ, $\varepsilon_0 = 25$и $n_a = 5.3 \cdot 10^{21}\mathrm{cm}^{-3}$, получаем $x_{KKT} = x_p \simeq 0.24$, так, что температура T_p в *LSCO* стремится к нулю для $x_p \simeq 0.21 - 0{,}24$. Большая псевдощель также была обнаружена экспериментально в $Bi - 2212$ [32; с.61-122, 42; с.15-19], где температура образования псевдощели исчезает также при $x_p \simeq 0.22$. Можно ожидать, что энергия связи больших поляронов E_p становится больше, чем 0,10 эВ при $\varepsilon_\infty < 3.5$ и $\eta \simeq 0{,}02$. Если выбрать $E_p \simeq 0.132$ эВ, $\varepsilon_0 = 25$и $n_a = 1.3 \cdot 10^{22}\mathrm{cm}^{-3}$ для $Bi - 2212$, тогда находим $x_{KKT} = x_p \simeq 0.22$ в соответствии с экспериментальными данными.

БКШ-подобная спаривательная псевдощель Δ_F также уменьшается с увеличением x, но эта псевдощель в отличие от неспаривательной поляронной псевдощели Δ_p не исчезает при $T = 0$ и $x = x_p \simeq 0.21 - 0.24$. Характеристическая температура T^* такой псевдощели сливается с температурой T_c в сверхлегированной области ($x_p \simeq 0.21 - 0.22$) фазовой диаграммы ВТСП-купратов. На Рис. 2.6. приведена фазовая диаграмма $Bi - 2212$ и эта фазовая диаграмма является общей для*LSCO*.

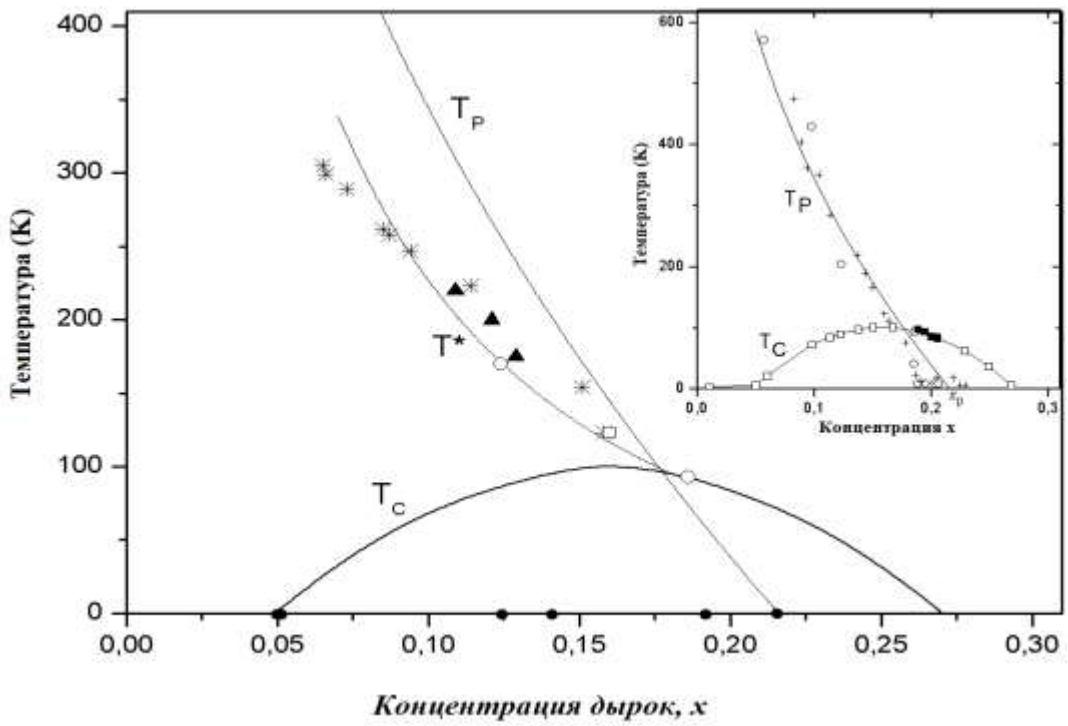

Рис. 2.6. Фазовая диаграмма нормального состояния *LSCO* ва *Bi-2212*, поляронная и БКШ-подобная псевдощели показывающая соответственно две различные характеристические температуры псевдощели T_p и T^*.

Сплошная линия $T_p(x)$ соответствующая температуре перехода в поляронное псевдощелевое состояние и заканчивающаяся в ККТ при $x = 0{,}22$ вычислены с использованием уравнения (2.2) и значения параметров $E_p = 0.132$ эВ, $\varepsilon_0 = 25$ и $n_a = 1.3 \cdot 10^{22} cm^{-3}$. Другая сплошная линия $T^*(x)$соответствующая БКШ-подобному переходу (т.е. переходу к БКШ-подобному псевдощелевому состоянию) вычислены с использованием уравнения (2.26) и значения параметров $m_p = 2m_e$, $\varepsilon_A = 0.098$ эВ, $n_a = 1.3 \cdot 10^{22} cm^{-3}, \tilde{V}_p = 0.125$ эВ. Эта линия сливается с критической линией сверхпроводящего перехода $T_c(x)$ в сверхлегированной области. Экспериментальные точки для T^* в $Bi - 2212$ были взяты из [44; с.51-54] (белые кружки), [100; с.5960] (белые квадраты), [101; с.5848] (черные треугольники), [102; с.207003-207006] (черные звездочки) и также показаны для сравнения с теоретическими результатами. Белые треугольники являются экспериментальными данными для T_c [103; с.248]. Для сравнения с фазовой диаграммой $Bi - 2212$, показанной здесь на основной

панели, приведена также на вставке другая фазовая диаграмма, предложенная в [104; с.184] в которой псевдощелевая и странная металлическая фазы в нормальном состоянии ВТСП-купратов еще не идентифицированы.

Выводы

Таким образом, на основе приведенных выше результатов можно сделать следующие выводы:

1. Определены возможности существования двух псевдощелевых режимов в недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратах $LSCO$ и $Bi-2212$ в рамках модели больших поляронов и модифицированной БКШ-подобной модели прекурсивного спаривания поляронных носителей в нормальном состоянии этих материалов.
2. Показано, что неспаривательная поляронная псевдощель в спектрах возбуждения недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных купратных соединений $LSCO$ и $Bi-2212$ образуется при необычных электрон-фононных взаимодействиях и не зависит от температуры. Определены характеристические температуры T_p переходов этих ВТСП-материалов в поляронное псевдощелевое состояние и зависимость T_p от уровней легирования купратов.
3. В рамках модифицированной БКШ-подобной теории показана возможность куперовского спаривания поляронов в нормальном состоянии недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратах $LSCO$ и $Bi-2212$ выше T_c при необычных электрон-фононных взаимодействиях и образования БКШ-подобной спаривательной псевдощели, зависящий от температуры. Получены новые аналитические выражения для БКШ-подобной псевдощели Δ_F и температуры ее образования $T^* > T_c$, а также определены характерные зависимости Δ_F и T^* от уровней легирования купратов.

4. Впервые получена корректная и более реалистическая фазовая диаграмма нормальных состояний ВТСП-купратов $LSCO$ и $Bi-2212$ от слабо легированного до сильно сверхлегированного режима и четко установлена возможность существования двух различных типов псевдощелевых состояний выше T_c в температурном интервале $T_c < T^* < T_p$.

ГЛАВА III. Аномальные изотопические эффекты в нормальном состоянии купратных высокотемпературных сверхпроводников

§3.1. Изотопический эффект на критическую температуру сверхпроводящего перехода в обычных металлических сверхпроводниках

Как известно открытие изотопического эффекта на критическую температуру сверхпроводящего перехода T_c в обычных металлических соединениях указало правильное направление в построении так называемой микроскопической теории сверхпроводимости БКШ [105; с.1175] в этих системах. Начиная с 1950 г. в понимании многих ключевых особенностей обычных сверхпроводников были большие прогрессы. В частности, теоретические исследования, проведенные Фрёлихом в 1950 году привели к теоретическому предсказанию важной роли электрон-фононного взаимодействия в сверхпроводимости. При этом Фрёлих предсказал [106; с.845] очень важные свойства сверхпроводников, а именно, зависимости T_c от массы изотопов M атомного ядра в кристаллической решетке сверхпроводника. Одновременно такой изотопический эффект был обнаружен экспериментально в 1950 г. Максвелом [57; с.477], Рейнолдсом и др. [58; с.487]. Обнаружено, что масса изотопов связана с критической температурой сверхпроводящего перохода следующимобразом:

$$M^{\alpha}T_c = const, \tag{3.1}$$

где α коэффициент изотопического эффекта.

Масса изотопа атомного ядра в твердых телах определяет частоту колебаний решетки, $\omega \sim M^{-1/2}$. Согласно теории БКШ температура образования куперовских пар в металлах совпадает с T_c, которая при слабой электрон-фононной связи определяется из выражения [105; с.1175]

$$k_B T_c \simeq 1.133\hbar\omega_D \exp\left[-\frac{1}{N(0)V}\right], \qquad (3.2)$$

где $\omega_D \sim M^{-1/2}$ –дебаевская частота колебаний кристаллической решетки, $N(0)$ –плотность электронных состояний на уровне Ферми, V –потенциал электрон-фононного взаимодействия. В обычных металлах отсутствует поляронный эффект, и поэтому, $N(0)$ и V независят от массы изотопов. Тогда изотопический эффект на T_c в обычных сверхпроводниках (характеризуемых константой электрон-фононной связи $\lambda_{\text{БКШ}} = N(0)V \ll 1$), определяемый из выражения (3.2), зависит только от дебаевской частоты колебаний решетки, и коэффициент изотопического эффекта $\alpha = \alpha_{T_c}$ равен 0.5. Экспериментально также было обнаружено, что для большинства простых металлов, $\alpha_{T_c} \sim 0.5$. Отсюда следует, что сверхпроводимость в металлах вызвана обычным электрон-фононным взаимодействием и связана с куперовским спариванием квазисвободных электронов путем обмена динамических фононов, энергия которых равна $\hbar\omega_D \ll E_F$ (где $E_F \gg 1$ эВ энергия Ферми в металлах). Как видно из вышесказанного, теория БКШ дает превосходный результат для коэффициента изотопического эффекта $\alpha_{T_c} \simeq 0.5$ в обычных сверхпроводниках в полном соответствии с наблюдаемыми экспериментальными данными для α_{T_c}. Однако, последующие экспериментальные исследования по изотопическим эффектам показали, что наблюдаемые значения коэффициента изотопического эффекта на T_c в переходных металлах (Ru, Os, Zr, U) составляют $\alpha_{T_c} \simeq 0.0 - 0.1$ [1; с.714, 8; с.262] и намного меньше, чем значение $\alpha_{T_c} \simeq 0.5$ или даже α_{T_c} становится отрицательным (например, $\alpha_{T_c} = -0.015$ для Ir [107; с.2358] и $\alpha_{T_c} = -5$ для U [108]). Эти особенности изотопического эффекта в таких металлических сверхпроводниках не могут быть объяснены на основе стандартной теории БКШ. Как нами показано в Гл. 2 данной работы, куперовское спаривание носителей тока в ВТСП-купратах происходит выше T_c и температура такого куперовского спаривания $T^* > T_c$ соответствует также как и в обычных металлах фазовому переходу БКШ. Поскольку изотопический эффект

существует на температуру БКШ перехода (который соответствует температуре образования куперовских пар T_c в обычных металлах), аналогичный изотопической эффект должен существовать также на температуре БКШ-подобного перехода (который соответствует уже температуре образования псевдощели или необычных куперовских пар) в ВТСП-купратах. Настоящая глава диссертации посвящена обсуждению аномальных изотопических эффектов на температуру образования псевдощели, появляющейся при БКШ-подобном фазовом переходе выше T_c в ВТСП-купратах.

§3.2. Аномальные изотопический эффект на температуру образования БКШ-подобной спаривательной псевдощели в ВТСП-купратах

В обычных металлических сверхпроводниках (которые являются БКШ сверхпроводниками) электрон-фононное взаимодействие является очень слабым ($\lambda_{\text{БКШ}} \ll 1$), и носителями тока являются квазисвободные электроны. Обычная стандартная теория БКШ хорошо применима к таким системам (включая сильно сверхлегированные купраты) из-за отсутствия в них поляронных эффектов. В этих обычных сверхпроводниках куперовское спаривание носителей заряда (электрон и дырки) и БКШ конденсация слабо связанных куперовских пар в сверхтекучем ферми-жидкостном состоянии происходят одновременно при критической температуре сверхпроводящего состояния T_c. Однако, в зависимости от силы притягательного взаимодействия между носителями тока физическая картина их куперовского спаривания существенно изменяется и, поэтому ситуация в полярных ВТСП-купратах при промежуточных и сильных электрон-фононных связях будет другой. Когда парные взаимодействия между дырочными носителями в легированных купратах становятся достаточно сильными, их куперовское спаривание происходит при температурах $T^* > T_c$ и сильно коррелированные куперовские пары ведут себя как бозе частицы [70]. Такие бозонные куперовские пары конденсируются в сверхтекучее бозе-жидкостное состояние при $T = T_c < T^*$, которое отличается от сверхтекучего

состояния БКШ конденсата слабосвязанных куперовских пар. Носители заряды (т.е. дырки, появляющиеся при легировании) в купратных соединениях, одетые на статические деформационные щубы являются поляронами (автолокализованными квазичастицами) [38; с.897, 60; с.393-396, 61; с.481, 69; с.155]. Наиболее важная и отличительная особенность купратов состоит в том, что они являются типичными полярными материалами, где электрон (дырочно)-решеточные взаимодействия являются достаточно сильными и необычными (по сравнению с электрон-фононными взаимодействиями в обычных металлах). Большая ионность купратов ($\eta = \varepsilon_\infty/\varepsilon_0 \ll 1$) усиливает полярные электрон-фононные взаимодействия и тенденции образования поляронов. Поэтому, естественно ожидать, что необычные электрон-фононные взаимодействия вовлечены в необычное куперовское спаривание поляронов, приводящее к образованию БКШ-подобной псевдощели в нормальном состоянии ВТСП-купратов и в существовании новых (т.е. необычных) изотопических эффектов на характеристическую температуру T^* появления такой псевдощели при БКШ-подобном фазовом переходе выше T_c [65; с.25, 67; с.87,86; с.29-37, 109; с.43-50]. Действительно, было показано, например, через эксперименты по замещению изотопов, что необычные электрон-фононные взаимодействия имеют особенно важное значение в легированных ВТСП-купратах (см. [63; с.236, 110; с.066501]). При этом различные эксперименты [59; с.569, 60; с.393-396, 61; с.481, 63; с.236, 110; с.066501, 111; с.377, 112; с.5912, 113; с.1990, 114; с.5-8, 115; с.184506, 116; с.237002, 117; с.541], обнаруживающие своеобразные и странные изотопические эффекты на температуры образования псевдощели и другие физические величины показали, что необычные электрон-фононные взаимодействия играют решающую роль в ВТСП-купратах. В частности, некоторые эксперименты показали, что кислородные и медные изотопические эффекты на температуры образования псевдощели T^* в иттриевых Y и лантановых La купратах отсутствуют или очень малы [111; с.377, 115; с.184506, 116; с.237002], и заметны [112; с.5912, 115; с.184506]. Тогда, как другие эксперименты обнаружили огромный кислородный изотопический эффект на температуры упорядочения

зарядов T_{CO} в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ [117; с.541] (где температура образования псевдощели T^* идентифицируется как T_{CO}) и большой отрицательный кислородный и медный изотопические эффекты на T^* в купратных соединениях на основе гольмийHo[113; с.1990, 115; с.184506]. Здесь кислородный изотопический эффект является необычным, и наиболее интересно изменяет знаки, в то время как медный изотопический эффект в $HoBa_2Cu_4O_8$ системе является намного больше чем кислородного изотопического эффекта. Эти и другие экспериментальные наблюдения [60; с.393-396] свидетельствуют о том, что электрон-фононные взаимодействия являются ответственными за образование псевдощелевой фазы в лантановых и гольмиевых купратах. Причины происхождения аномального кислородного изотопического эффекта на T^* в ВТСП-купратах особенно были предметом спора [111; с.377, 112; с.5912, 113; с.1990, 116; с.237002]. Хотя несколько теоретических моделей (см. например, [61; с.481, 62; с.013046, 112; с.5912, 115; с.184506, 118; с.064519] для обзора) были предложены для объяснения наблюдаемого изотопического эффекта этого рода, тем не менее немного известно, в частности, о загадочных особенностях кислородного изотопического эффекта на T^* в различных ВТСП-купратах. Отсюда следует, что физические причины происхождения псевдощелевого состояния и кислородного изотопического эффекта на T^* в ВТСП-купратах ясно не были определены. Кроме того, причины происхождения наблюдаемого медного изотопического эффекта в ВТСП-купратах оставались без объяснения. Поэтому, есть значительная необходимость в изучении возможности появления псевдощели при определенных характеристических температурах T^* выше T_c и возможных необычных изотопических эффектов на T^* в различных ВТСП-купратах от недолегированного до сверхлегированного режима.

Как известно, носители тока (электроны и дырки) могут изменять их массы в твердом теле из-за взаимодействия колебаний кристаллической решетки и между собой. При определенных условиях (например, при промежуточных и

сильных электрон-фононных взаимодействиях), многие твердые тела (в том числе и легированные купратные соединения) могут быть необычными металлами с одетыми на статические деформации носителями зарядов скорее чем со свободными электронами или дырками. В обычных металлах эффективные массы электронов из-за их слабого взаимодействия с колебаниями решетки не зависят от массы атомов решетки M. В противоположность этому, в полярных материалах, в частности, ВТСП-купратах эффективная масса поляронных носителей будет зависеть от массы ионов кислорода M_O и от массы ионов меди M_{Cu}. Поэтому, любая теория, предложенная для описания электронных свойств ВТСП-купратов должна объяснить не только образование псевдощели, но и другие аномалии, такие как различные неожиданные изотопические эффекты, наблюдаемые в этих материалах. Для лучшего понимания псевдощелевых явлений и высокотемпературной сверхпроводимости, куперовское спаривание поляронов выше T_c и кислородный и медный изотопические эффекты на температуры образования T^* БКШ-подобной псевдощели в ВТСП-купратах должны быть детально исследованы и сравнены с существующими экспериментальными данными, подтверждающими существование поляронных эффектов и некогерентных (т.е. несверхпроводящих) куперовских пар выше T_c. Ниже нами будут обсуждены эти вопросы. При этом рассмотрим реальные физические ситуации, возникающие в различных уровнях легирования купратных соединений и будем различать случаи относительно больших Ферми поверхностей (с $\varepsilon_F > E_p + \hbar\omega_0$) и относительно малых Ферми поверхностей (с $\varepsilon_F < E_p + \hbar\omega_0$) [86; с.29-37, 109; с.43-50]. Здесь $\hbar\omega_0$ представляет собой энергию продольного оптического фонона, обозначаемую как $\hbar\omega_{LO}$. Отметим, что большие Ферми поверхности в ВТСП-купратах являются не такими большими, как в обычных металлах, в которых $E_F \simeq 5 - 10$ эВ.

Вышеприведенная обобщенная БКШ-подобная модель будет использована для демонстрации возможности существования характеристической

температуры T^* образования псевдощели выше T_c и для извлечения важной информации о псевдощелевом состоянии и новых поляронных изотопических эффектах на T^* в различных ВТСП-купратах с большими и малыми Ферми поверхностями. При этом нами будет показано, что поляронные эффекты могут изменять существенно простую БКШ картину и приводить к необычным изотопическим эффектам на T^* в ВТСП-купратах. В теории больших поляронов эффективная масса m_p, энергия связи E_p и энергия Ферми ε_F больших поляронов зависят от Фрёлиховского-типа константы электрон-фононной связи α_F, которая, в свою очередь, зависит от массы ионов $M(= M_O$ или $M_{Cu})$ и $M'(= M_{Cu}$ или $M_O)$ кислорода O и меди Cu в купратах следующими образом:

$$\alpha_F = \frac{e^2}{2\hbar\omega_{LO}}\left[\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right](\frac{2m\omega_{LO}}{\hbar})^{1/2}, \tag{3.3}$$

где $\omega_{LO} \simeq [2\beta(\frac{1}{M} + \frac{1}{M'})]^{1/2}, \beta$-силовая константа решетки, m-масса неодетого носителя тока в жесткой (недеформируемой) решетке, т.е. в отсутствии электрон-фононного взаимодействия. В режиме промежуточной электрон-фононной связи масса и энергия связи большого полярона соответственно определяются как

$$m_p = m[1 + \frac{\alpha_F}{6}] \tag{3.4}$$

и

$$E_p = \alpha_F \hbar\omega_{LO} \tag{3.5}$$

Сначала определим температуру образования псевдощели T^* и ее изотопическое смешение в ВТСП-купратах. Как показано в Гл. 2 данной работы (см. выражение (2.24)), плотность состояний поляронов на уровне Ферми аппроксимируется в простой форме $D_p(\varepsilon_F) = 1/\varepsilon_F$. Далее уравнение (2.22) для определения изотопического эффекта запишем в виде [86; с.29-37, 109; с.43-50]

$$k_B T^* \simeq 1.134\left(E_p + \hbar\omega_{LO}\right)\exp\left[-\frac{1}{\lambda^*}\right], \tag{3.6}$$

где $\lambda^* = \frac{\widetilde{V}_p}{\varepsilon_F}$ зависит от m_p(которая, в свою очередь, зависит от α_F или ω_{LO}) и $E_p + \hbar\omega_{LO}$ через $\widetilde{V}_p$, который теперь можно записать как

$$\widetilde{V}_p = V_{ph} - \frac{V_c}{1 + (V_c/\varepsilon_F)\ln[\frac{\varepsilon_c}{E_F + \hbar\omega_{LO}}]} \tag{3.7}$$

тогда коэффициент изотопического эффекта на T^* определяется из уравнения (3.6) как

$$\alpha_{T^*} = -\frac{dlnT^*}{dlnM} \tag{3.8}$$

Используя (3.4) и (3.5), находим, что уравнения (2.22) и (3.6) будут принимать следующие виды (см. Приложения B и C):

$$k_B T^* \simeq 1.134 A\mu^{-1/4}[1 + a\mu^{-\frac{1}{4}}]\exp[-\frac{1}{\lambda^*(\mu)}] \tag{3.9}$$

и

$$\alpha_{T^*} = \frac{1}{4\left[1+\frac{M}{M'}\right]}\left\{1 + \frac{a\mu^{-\frac{1}{4}}}{1+a\mu^{-\frac{1}{4}}} - \frac{1}{\left(\lambda^*(\mu)\right)^2}\left(\lambda_{ph} b\mu^{\frac{1}{4}} - \frac{\lambda_c b\mu^{\frac{1}{4}}}{U_c(\mu)} + \frac{\lambda_c^2\left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)}{U_c^2(\mu)}[b\mu^{\frac{1}{4}} lnB_c(\mu) + \left(1 + b\mu^{\frac{1}{4}}\right)(1 + \frac{a\mu^{-\frac{1}{4}}}{1+a\mu^{-\frac{1}{4}}})]\right)\right\}, \tag{3.10}$$

где $\lambda^*(\mu) = \left[\lambda_{ph}\left(1 + b\mu^{\frac{1}{4}}\right) - \frac{\lambda_c\left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)}{U_c(\mu)}\right]$, $U_c(\mu) = 1 + \lambda_c\left(1 + b\mu^{\frac{1}{4}}\right) lnB_c(\mu)$, $\lambda_{ph} = \left[\frac{2m}{\hbar^2(3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}}\right]V_{ph,}$ $\lambda_c = \left[\frac{2m}{\hbar^2(3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}}\right]V_{c,}$ $B_c(\mu) = \frac{\varepsilon_F\mu^{\frac{1}{4}}}{A(1+a\mu^{-\frac{1}{4}})}$, $A = \frac{e^2}{\tilde{\varepsilon}}\sqrt{\frac{m}{2\hbar}}(2\beta)^{1/4}$, $a = \hbar\tilde{\varepsilon}\sqrt{\frac{2\hbar}{m}}\frac{(2\beta)^{\frac{1}{4}}}{e^2}$, $b = \frac{1}{6a}$, $\tilde{\varepsilon} = \frac{\varepsilon_\infty}{1-\eta}$ – эффективная диэлектрическая постоянная, $\mu = \frac{MM'}{(M+M')}$ – привиденная масса ионов решетки.

Таким образом, нами получены новые уравнения (3.9) и (3.10), определяющие новые поляронные изотопические эффекты в ВТСП-купратах.

Здесь отметим, что выражение (3.10) для коэффициента изотопического эффекта α_{T^*} содержит не только константу электрон-фононной связи λ_{ph} и параметр кулоновского взаимодействия λ_c, но и БКШ-подобную константу эффективной электрон-фононной связи $\lambda^*(\mu)$, концентрацию носителей тока n и параметры ($\tilde{\varepsilon}$, β, M, M' и μ) кристалла купратов. С помощью уравнений (3.9) и (3.10) можно объяснить специфические особенности как кислородного изотопического эффекта на T^* (подставляя в уравнение (3.10) соответствующие массы изотопов $M = M_O$ и $M' = M_{Cu}$), так и медного изотопического эффекта на T^* (подставляя теперь в уравнение (3.10) соответствующие массы изотопов $M = M_{Cu}$ и $M' = M_O$) в ВТСП-купратах, обсуждаемых ниже. Эти уравнения позволяют нам вычислить температуры образования псевдощели T^*, изотопическое смещение температуры T^* на величину ΔT^*, и коэффициенты кислородного $\alpha_{T^*}^{O}$ и медного $\alpha_{T^*}^{Cu}$ изотопических эффектов на T^*. Для купратов, мы можем использовать экспериментальные значения диэлектрических констант $\varepsilon_\infty = 3 - 5$ и $\varepsilon_0 = 22 - 50$, приведенных в [38; с.897, 119; с.6575, 120; с.2048], для определения возможных значений$\tilde{\varepsilon}$. В частности, используя хорошо установленные экспериментальные значения $\varepsilon_\infty = 3 - 5$ и $\varepsilon_0 = 22 - 50$ [38; с.897, 119; с.6575], находим $\tilde{\varepsilon} = 3.33 - 6.47$. После этого подставляя более подходящие значения $\tilde{\varepsilon}$ в уравнения (3.9) и (3.10), вычисляемм температуры образования псевдощели T^* и ΔT^*, коэффициенты кислородных и медных изотопических эффектов $\alpha_{T^*}^{O}$ и $\alpha_{T^*}^{Cu}$, которые затем сравниваются с их измеренными значениями в различных ВТСП-купратах. В наших теоретических расчетах, также выбраны $m = m_e$ [38; с.897] и $\hbar\omega_{LO} = 0.04 - 0.07$ эВ [36; с.473, 38; с.897]. Тогда получаем $\alpha_F = 2.15 - 5.54$ [86; с.29-37, 109; с.43-50] (которые соответствуют режиму промежуточной электрон-фононной связи). Величина $lnB_c(\mu)$, входящая в выражение для T^* и α_{T^*} будет мала, так что экранированный кулоновский псевдопотенциал $\tilde{V}_c = \frac{V_c}{\left[1+D_p(\varepsilon_F)V_c \ln\left(\frac{\varepsilon_C}{\varepsilon_A}\right)\right]}$ будет порядка неэкранированного кулоновского псевдопотенциала V_c. Хотя выражения (3.9) и

(3.10) содержат многие параметры, но большинство этих параметров ($m,\ M,\ M'$, $\mu,\ \tilde{\varepsilon}$ и β) были определены раньше экспериментально и они не являются свободными (т.е. подгоночными) параметрами теории для рассматриваемых ВТСП-купратов (например, β фиксировано при значении оцененной незамещенными кислородом и медью купратного соединения, используя значение $\hbar\omega_{LO} = 0.05$ эВ). Ясно, что минимальная модель, которая использует мало параметров ВТСП-купратов, не описывает реальной физической картины в этих системах и не в состоянии воспроизводить многие важные псевдощелевые особенности и специфические особенности изотопических эффектов на T^*. Поэтому, некоторые параметры $\tilde{\varepsilon}, n,\ \lambda_{ph}$ и λ_c должны иметь различные значения в различных образцах ВТСП-купратов. В этих образцах ВТСП-купратов параметр n входит в выражении для λ_{ph} и λ_c, так что мы имеем в действительности три подгоничных (свободных) параметра $\tilde{\varepsilon}$, λ_{ph} и λ_c, которые могут быть использованы для расчета T^* и α_{T^*}.

§3.3. Аномальные изотопические эффекты на температуру образования псевдощели в ВТСП-купратах с большими энергиями Ферми

Теперь обсудим выполнение условия $\varepsilon_F > E_p + \hbar\omega_{LO}$ (т.е. условия существования относительно большой Ферми поверхности) в ВТСП-купратах и существование необычных кислородных и медных изотопических эффектов на T^* в этих системах. Наши количественные расчеты показывают, что при $n \gtrsim 0.86 \cdot 10^{21}\text{см}^{-3}$, $\tilde{\varepsilon} \gtrsim 4.9$ и $\hbar\omega_{LO} = 0.05$ эВ условие $\varepsilon_F > E_p + \hbar\omega_{LO}$ хорошо выполняется (см. Таблица 1).

Для того, чтобы определить T^* и изотопический эффект на T^* для заданных масс ионов в ВТСП-купратах, уравнения (3.9) и (3.10) должны быть решены одновременно и самосогласованно. Заменяя в этих уравнениях массу изотопа кислорода ^{16}O массой его изотопа ^{18}O и сохраняя все другие параметры идентичными случаю ^{16}O, величина T^* вычисляется снова и изотопическое

смешение $\Delta T_O^* = T^*(^{18}O)$-$T^*(^{16}O)$ вычисляется для изотопного замещения $^{16}O \rightarrow ^{18}O$. Изотопическое смещение $\Delta T_{Cu}^* = T^*(^{65}Cu) - T^*(^{63}Cu)$ вычисляется таким же образом для изотопного замещения $^{63}Cu \rightarrow ^{65}Cu$.

Таблица 1. Вычисленные значения параметров ε_F и $E_p + \hbar\omega_{LO}$ при $n \simeq 0.9 \cdot 10^{21}$см$^{-3}$ и различных значениях $\tilde{\varepsilon}$ [86; с.29-37, 109; с.43-50]

$\tilde{\varepsilon}$	ε_F(eV)	$E_p + \hbar\omega_{LO}$ (eV)
4.9	0.218361	0.218126
5.0	0.219941	0.214763
5.1	0.221481	0.211532
5.2	0.222982	0.208426
5.3	0.224445	0.205437
5.4	0.225873	0.202558
5.5	0.227266	0.199785
5.6	0.228625	0.197110
5.7	0.229953	0.194529
5.8	0.231249	0.192037
5.9	0.232515	0.189630
6.0	0.233753	0.187303
6.1	0.234962	0.185052
6.2	0.236144	0.182874
6.3	0.237300	0.180764
6.4	0.238431	0.178721
6.5	0.239538	0.176741

При этом нами проводились численные расчеты T^*, $\alpha_{T^*}^O$, $\alpha_{T^*}^{Cu}$, ΔT_O^* и ΔT_{Cu}^* при различных значениях $\tilde{\varepsilon}$, n, λ_{ph} и λ_c.

Полученные результаты дают согласованные картины о существовании температуры перехода T^* в БКШ-подобное псевдощелевое состояние выше T_c и о различных изотопических эффектах на T^* в ВТСП-купратах [86; с.29-37, 109; с.43-50]. Они объясняют, почему малые положительные или даже противоположные знаки (см. Рис.3.1) и очень большие отрицательные кислородные изотопические эффекты на T^* (см. Рис. 3.2 и Рис. 3.3) в ВТСП-материалах наблюдались в различных экспериментах

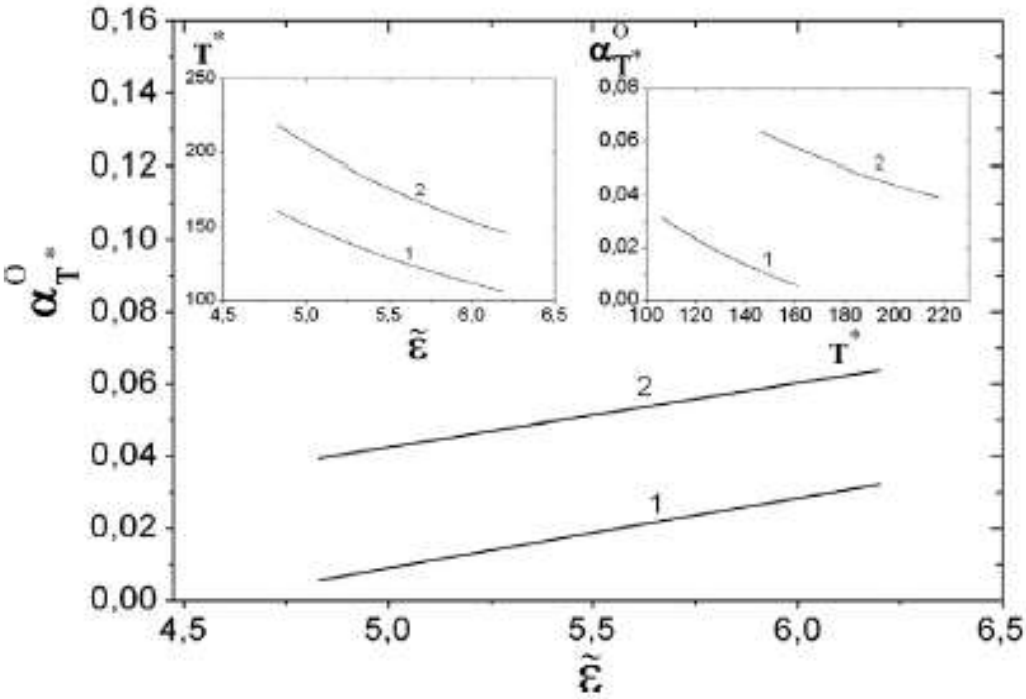

Рис. 3.1. Изменение $\alpha^{O}_{T^*}$ как функции $\tilde{\varepsilon}$ для двух наборов параметров: (1) $\lambda_{ph} = 0.303$, $\lambda_c = 0.091$, $n = 0.9 \cdot 10^{21}$ cm^{-3} и (2) $\lambda_{ph} = 0.350$, $\lambda_c = 0.095$, $n = 0.94 \cdot 10^{21}$ cm^{-3}. Во вставках показаны зависимости $T^*(\tilde{\varepsilon})$ и $\alpha^{O}_{T^*}(T^*)$ для тех же самых значений λ_{ph}, λ_c и n.

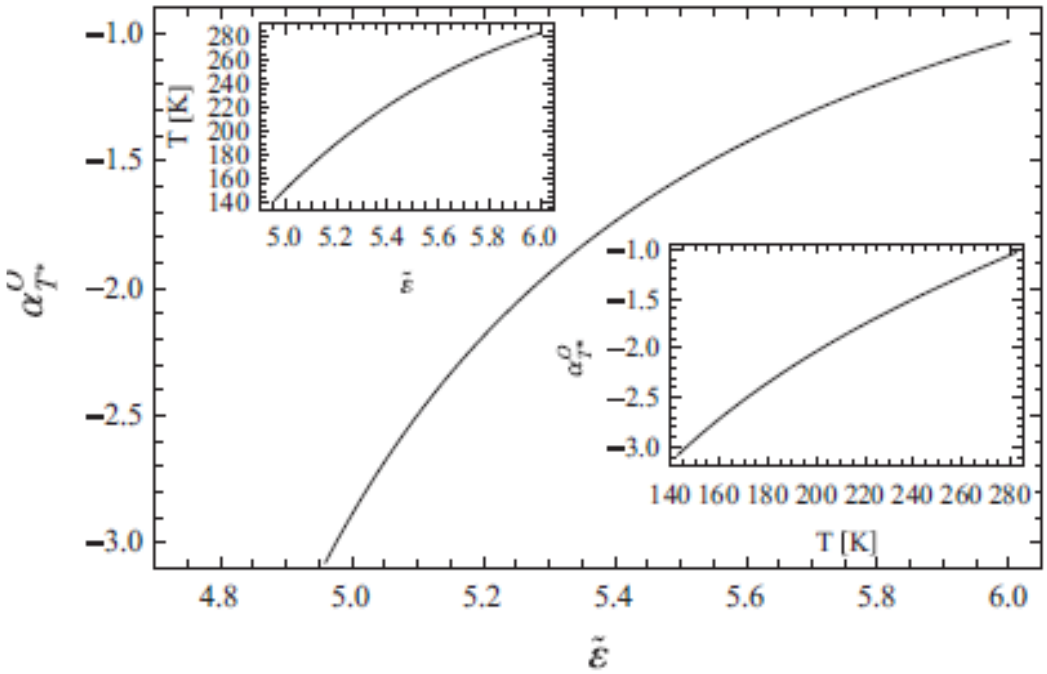

Рис. 3.2. Зависимость $\alpha^{O}_{T^*}$ от $\tilde{\varepsilon}$ для значений параметров $\lambda_{ph} = 0.975$, $\lambda_c = 0.820$ и $n = 0.88 \cdot 10^{21}$ cm^{-3}. Во вставках показаны зависимости $T^*(\tilde{\varepsilon})$ и $\alpha^{O}_{T^*}(T^*)$ для тех же самых значений λ_{ph}, λ_c и n.

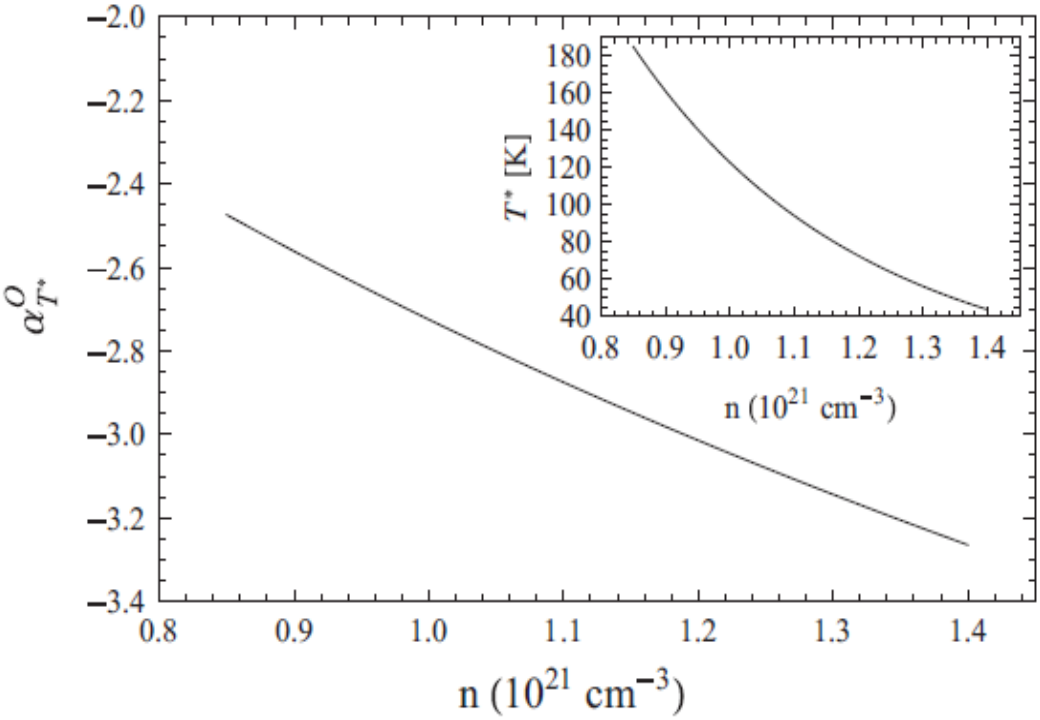

Рис. 3.3. Зависимость $\alpha^{O}_{T^*}$ (основная панель) и T^* (вставка) от уровней легирования для $\lambda_{ph} = 0.975$, $\lambda_c = 0.820$ и $\tilde{\varepsilon} = 5.092$.

Найденные значения температуры образования псевдощели T^* как функции $\tilde{\varepsilon}$ и n показаны на рисунках 3.1-3.3 и рисунках 3.4 и 3.5 в ставках для различных значений λ_{ph} и λ_c. Значения БКШ-подобной эффективной электрон-фононной связи λ^* изменяются от 0.3 до 0.5 и значение T^* увеличивается с уменьшением n. Нами обнаружено, что зависимость $T^*(\tilde{\varepsilon})$является довольно сложной, причем было обнаружено, что T^* уменьшается с увеличением $\tilde{\varepsilon}$ для $\lambda_{ph} \lesssim 0.35$ и $\lambda_c \lesssim 0.1$ (Рис. 3.1). В противоположность этому, T^* увеличивается с увеличением $\tilde{\varepsilon}$ для $\lambda_{ph} > 0.9$ и $\lambda_c > 0.8$ (Рис. 3.2).

Другой интересный аспект результатов наших расчетов, показанных на Рис. 3.4 и Рис. 3.5, состоит в том, что для некоторых промежуточных значений параметров λ_{ph} иλ_c, зависимость T^* от $\tilde{\varepsilon}$ становится немонотонной с увеличением разностей между λ_{ph} и λ_c. Такое немонотонное поведение T^* связано с разными и противоположными эффектами $\tilde{\varepsilon}$ на параметры A и λ^* в уравнение (3.9). Существующие экспериментальные данные по T^*, ΔT^* и $\alpha^{O}_{T^*}$ для $YBa_2Cu_4O_8$, $HoBa_2Cu_4O_8$ и $La_{1.96-x}Sr_xHo_{0.04}CuO_4$могут быть приведены в

превосходное соответствие с теоретическими результатами (полученными при использовании уравнений (3.9) и (3.10)) и подгоняя параметры $\tilde{\varepsilon}$, n, λ_{ph} и λ_c к экспериментальным результатам для каждого купратного сверхпроводника. Можно предполагать, что в $YBa_2Cu_4O_8$ и $HoBa_2Cu_4O_8$ оптимально легирований уровень соответствует значению $n \gtrsim 0.9 \cdot 10^{21}$cm^{-3}. Если $n = 0.925 \cdot 10^{21}$cm^{-3}, $\tilde{\varepsilon} = 4.827 - 5.030$, $\lambda_{ph} \simeq 0.297$, $\lambda_c \simeq 0.077$, то можно видеть, что $T^* = 150 - 161$ K и $\alpha_{T^*}^O$ очень малы (т.е., $\alpha_{T^*}^O = 0.0052 - 0.0096$)<0.01 (ср. [118; с.064519]), которые согласуются с экспериментальными данными, приведенными в [111; с.377, 116; с.237002] для $YBa_2Cu_4O_8$. Далее, используя другие наборы параметров $n = 0.94 \cdot 10^{21}$cm^{-3} $\tilde{\varepsilon} = 5.904 - 6.119, \lambda_{ph} = 0.311 - 0.313$, $\lambda_c = 0.067 - 0.070$, получаем $T^* \approx 150$ K и $\alpha_{T^*}^O \simeq 0.052 - 0.062$, которые находятся в хорошем согласии с измеренными значениями: $T^* = 150$ K и $\alpha_{T^*}^O = 0.052 - 0.061$ для $YBa_2Cu_4O_8$ (с $T_c = 81$ K) [112; с.5912]. Рис. 3.1 иллюстрирует предсказанные поведения T^* и $\alpha_{T^*}^O$ как функцию $\tilde{\varepsilon}$ для $\lambda_{ph} < 0.4$ и $\lambda_c < 0.1$. Видно, что $\alpha_{T^*}^O$ медленно уменьшается с увеличением $\tilde{\varepsilon}$. Относительно сильные электрон-фононные и кулоновские взаимодействия (т.е., $\lambda_{ph} > 0.5$ и $\lambda_c > 0.5$) существенно изменяют картину и вызывают быстрое уменьшение $\alpha_{T^*}^O$ с уменьшением $\tilde{\varepsilon}$. В этом случае значение $\alpha_{T^*}^O$ является отрицательным и становится очень большим отрицательным с уменьшением $\tilde{\varepsilon}$ и T^*. Картины, показанные на рис. 3.2 и рис. 3.3, вероятно реализуется в некоторых ВТСП-купратах (которые проявляют большой отрицательный коэффициент кислородного изотопического эффекта $\alpha_{T^*}^O$) и объясняют другую важную загадку ВТСП-купратов [113; с.1990]: огромный кислородный изотопический эффект на T^*, обнаруженный в $HoBa_2Cu_4O_8$(в котором электрон-фононный и кулоновские взаимодействия кажется будут намного сильнее, чем в $YBa_2Cu_4O_8$), чьи характеристические температуры образования псевдощели T^* увеличиваются значительно при замене ^{16}O и ^{18}O. Действительно, с использованием подгоночных параметров $n = 0.88 \cdot 10^{21}$cm^{-3}, $\tilde{\varepsilon} = 5.092$, $\lambda_{ph} = 0.975$, $\lambda_c = 0.82$

можно объяснить экспериментальные данные, приведенные в [113; с.1990]. В этом случае получаем $T^*(^{16}O)$ ≃170 K,$T^*(^{18}O)$ ≃220 K, ΔT_O^*=$T^*(^{18}O)$-$T^*(^{16}O)$ ≃50 K и $\alpha_{T^*}^O \simeq -2.53$, которые находятся в удивительно хорошем согласии с экспериментальными данными $T^*(^{16}O)$ ≃170 K, $T^*(^{18}O)$ ≃220 K, $\Delta T_O^* \simeq 50$ K и $\alpha_{T^*}^O \simeq -2.2 \pm 0.6$ [113; с.1990]. Нами проведены также аналогичные расчеты медного изотопического эффекта на T^* в слегка недолегированном $HoBa_2Cu_4O_8$ и кислородного и медного изотопических эффектов на T^* в оптимально легированном $La_{1.81}Ho_{0.04}Sr_{0.15}CuO_4$. На Рисунке 3.6 показаны предсказанные поведения $\alpha_{T^*}^{Cu}$ как функции $\tilde{\varepsilon}$ и n для $\lambda_{ph} = 2.196$, $\lambda_c = 2.064$.

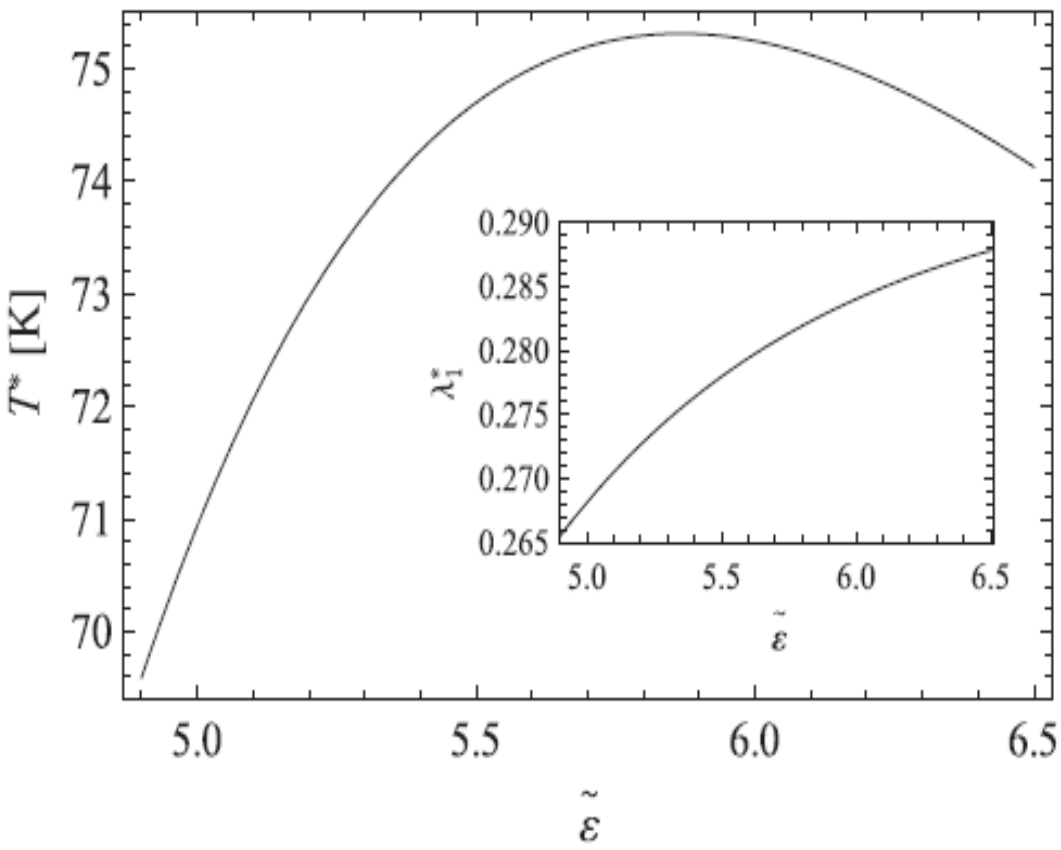

Рис. 3.4. Графики T^* и λ^* (вставка) как функции $\tilde{\varepsilon}$ для $n = 0.92 \cdot 10^{21}$ cm^{-3}, $\lambda_{ph} = 0.460$ и $\lambda_c = 0.290$.

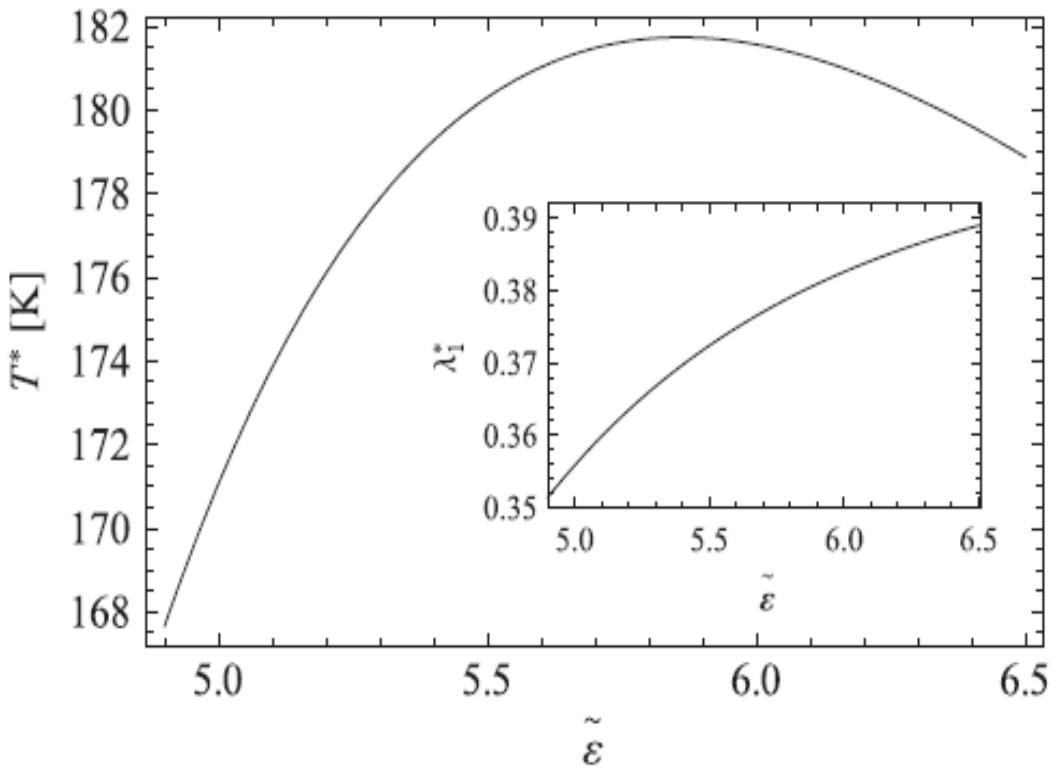

Рис. 3.5. Графики T^* и λ^* (вставка) как функции $\tilde{\varepsilon}$ для $n = 0.90 \cdot 10^{21}$ cm^{-3}, $\lambda_{ph} = 0.585$ и $\lambda_c = 0.360$.

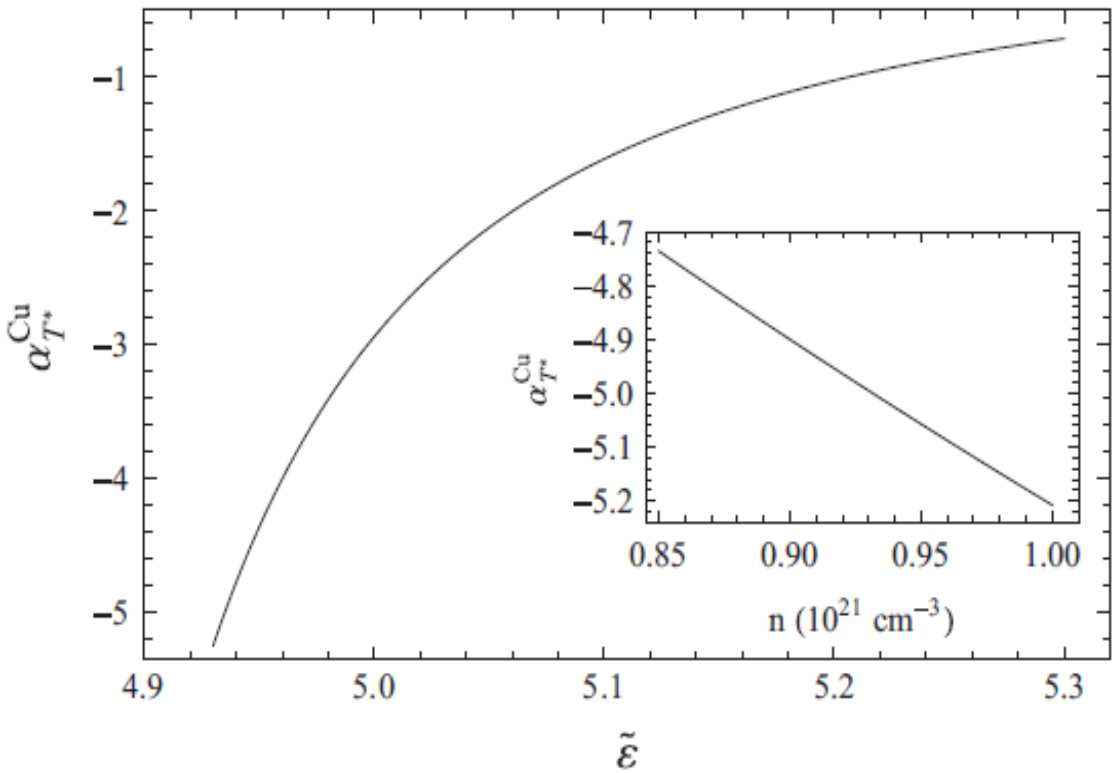

Рис. 3.6. Зависимость $\alpha_{T^*}^{Cu}$ от $\tilde{\varepsilon}$ для $n = 0.9 \cdot 10^{21}$ cm^{-3} $\lambda_{ph} = 2.196$ и $\lambda_c = 2.064$. Во вставке показана зависимость $\alpha_{T^*}^{Cu}$ от n для $\tilde{\varepsilon} = 4.9371$, $\lambda_{ph} = 2.196$ и $\lambda_c = 2.064$.

Для того, чтобы получить значения T^* ≃160 K и T^* ≃185 K, наблюдаемые соответственно без изотопного замещения меди и при изотопном замещении меди ^{63}Cu на ^{65}Cu в $HoBa_2Cu_4O_8$, используем следующие значения параметров $n = 0.9 \cdot 10^{21}$cm^{-3}, $\tilde{\varepsilon} = 4.9371$ $\lambda_{ph} = 2.199$ и $\lambda_c = 2.064$. Тогда находим $T^*(^{63}Cu)$ ≃160 K, $T^*(^{65}Cu)$ ≃184,8 K, $\Delta T^*_{Cu} = T^*(^{65}Cu) - T^*(^{63}Cu) \approx 25$ K и $\alpha^{Cu}_{T^*} \simeq -4.9$ в соответствии с экспериментальными результатами $T^*(^{63}Cu)$ ≃160 K, $T^*(^{65}Cu)$ ≃185 K, и $\alpha^{Cu}_{T^*} \simeq -4.9$ [114; с.5-8]. В орторомбическом $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ оптимально легированный уровень ($x = 0.15$) соответствует значению $n = 0.8 \cdot 10^{21}$cm^{-3}. Выбирая $\tilde{\varepsilon} = 5.367$ (удовлетворяющий условию большой Ферми поверхности $\varepsilon_F > E_p + \hbar\omega_{LO}$), $\lambda_{ph} = 0.647$ и $\lambda_c = 0.481$ для $La_{1.81}Ho_{0.04}Sr_{0.15}CuO_4$, получаем $T^*(^{16}O)$=$T^*(^{63}Cu)$ ≃60 K, $T^*(^{18}O)$ ≃69.6 K, $\Delta T^*_O \simeq 9.6$ K, $T^*(^{65}Cu)$ ≃60.6 K, $\Delta T^*_{Cu} \simeq 0.6$ K, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными, приведеннымив [115; с.184506]. Теперь, используя другие подгоночные параметры $n = 0.62 \cdot 10^{21}$cm^{-3}, $\tilde{\varepsilon} = 6.240$, $\lambda_{ph} = 0.885$, $\lambda_c = 0.690$ и $n = 1 \cdot 10^{21}$cm^{-3}, $\tilde{\varepsilon} = 4.794$, $\lambda_{ph} = 0.490$, $\lambda_c = 0.342$ для умеренно недолегированнной и сверхлегированной системы $La_{1.96-x}Sr_xHo_{0.04}CuO_4$ (с $x = 0.11$ и $x = 0.20$), соответственно находим $T^*(^{16}O)$ ≃80 K, $T^*(^{18}O)$ ≃100 K, $\Delta T^*_O \simeq 20$ K и $T^*(^{16}O)$ ≃50 K, $T^*(^{18}O)$ ≃55 K, $\Delta T^*_O \simeq 5$ K для этих ВТСП-купратов с $x = 0.11$ и $x = 0.20$. Эти результаты находятся в количественном согласии с экспериментальными данными, приведенными в [121; с.773-774] для $La_{1.96-x}Sr_xHo_{0.04}CuO_4$, в которой по замещению кислорода ($^{16}O \rightarrow {}^{18}O$), T^* смещается вверх на 20 и 5 K соответственно для$x = 0.11$ и $x = 0.20$. Таким образом, результаты, приведенные на рисунках 3.1-3.3, демонстрируют, что изотопические эффекты на T^* в ВТСП-купратах изменяются постепенно от малых положительных до больших отрицательных величин с уменьшением $\tilde{\varepsilon}$, а также с увеличением силы электрон-фононных и кулоновских взаимодействий. Физически это является вполне разумным и естественным. По-видимому, положительные изотопические эффекты на температуры куперовского спаривания электронов в обычных металлах и

купратах (с относительно большой $\tilde{\varepsilon}$ и слабой ионностью, определяемой отношением $\eta = \varepsilon_\infty/\varepsilon_0$) являются тесно взаимосвязанными.

§3.4. Характерные кислородные и медные изотопические эффекты на температуры образования псевдощели в сильно недолегированных ВТСП-купратах с малыми Ферми поверхностями

Для взаимодействующих поляронных Ферми газов в сильно недолегированных купратах с малыми Ферми поверхностями ($\varepsilon_F < E_p$), будет уместным другой предложенный нами ниже БКШ-подобный подход. Теперь рассмотрим куперовское спаривание поляронов выше T_c и характерные изотопические эффекты на T^* в таких недолегированных системах, в этом случае условие $\varepsilon_F < E_p$ выполняется (см. Табл. 3.2) и предэкспоненциальный множитель в модифицированном БКШ-подобном выражении для T^* подобно как предэкспоненциальный множитель в БКШ-подобном выражении для T_c, полученный в [122; с.79-93, 123; с.10516] при $\hbar\omega_0 > \varepsilon_F$ становится по существу равнымε_F. Следовательно, $E_p + \hbar\omega_{LO}$ и λ^* в (3.6) должны быть соответственно заменены на $\varepsilon_F = \varepsilon_F^f/(1 + b\mu^{1/4})$ и $\lambda_S^* = \left(V_{ph} - V_c\right)D_p(\varepsilon_F)$, где λ_S^* БКШ-подобная константа электрон-фононной связи в сильно недолегированных купратах с малыми Ферми поверхностями.

Таблица 3.2. Вычисленные значения параметров ε_F и E_p при $n = 0.3 \cdot 10^{21}$cm^{-3} и различных значениях $\tilde{\varepsilon}$ [86; с.29-37, 109; с.43-50]

$\tilde{\varepsilon}$	ε_F(eV)	E_p(eV)
5.0	0.105737	0.164763
5.1	0.106477	0.161532
5.2	0.107198	0.158426
5.3	0.107902	0.155437
5.4	0.108588	0.152558
5.5	0.109258	0.149785
5.6	0.109912	0.147110
5.7	0.110550	0.144529
5.8	0.111173	0.142037
5.9	0.111782	0.139630
6.0	0.112377	0.137303
6.1	0.112958	0.135052
6.2	0.113526	0.132874
6.3	0.114082	0.130764
6.4	0.114626	0.128721
6.5	0.115158	0.126741

При $\varepsilon_F < E_p$, температуру образования псевдощели в сильно недолегированных ВТСП-купратах можно определить из следующего уравнения:

$$\frac{1}{\lambda_S^*} = \int_0^{\varepsilon_F} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} tanh \frac{\varepsilon}{2k_B T^*} = \int_0^1 \frac{dy}{y} tanhy + \int_1^{y^*} \frac{dy}{y} tanhy, \qquad (3.11)$$

где $y^* = \varepsilon_F / 2k_B T^*$.

Для того, чтобы оценить второй интеграл в (3.11), его можно написать в виде

$$\int_1^{y^*} \frac{dy}{y} tanhy = c_1 + \int_1^{y^*} \frac{dy}{y} = c_1 + lny^*, \qquad (3.12)$$

из которого c_1 определяется для данного значения y^*.Тогда уравнение (3.11) можно переписать как

$$\frac{1}{\lambda_S^*} = c_2 + lny^* = \ln(c \frac{\varepsilon}{2k_B T^*}), \qquad (3.13)$$

где $c_2 = c_1 + \int_0^1 \frac{dy}{y} tanhy = c_1 + 0.909675$, с $\simeq 0.5\exp[c_1 + 0.909675]$

таким образом, T^* можно определить из соотношения [86; с.29-37, 109; с.43-50]

$$k_B T^* \simeq c \frac{\varepsilon_F^f}{1+b\mu^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{\lambda_S^*(\mu)}\right], \tag{3.14}$$

где $\lambda_S^*(\mu) = (\lambda_{ph} - \lambda_c)(1 + b\mu^{1/4})$.

Вычисленные значения λ_S^* и C для различных значений $\varepsilon_F/k_B T^*$ приведены в таблице 3.3.

Таблица 3.3. Вычисленные значения предэкспоненциального множителя и БКШ-подобной константы связи в уравнении (3.14) при различных значениях $\varepsilon_F/k_B T^*$ [86; с.29-37, 109; с.43-50].

$\varepsilon_F/k_B T^*$	C	λ_S^*
3.00	1.16303	0.80022
4.00	1.14238	0.65815
5.00	1.13646	0.57558
6.00	1.13468	0.52134
7.00	1.13413	0.48268
8.00	1.13395	0.45348
9.00	1.13389	0.43050
10.00	1.13387	0.41182

Количественные особенности изотопических эффектов на T^* в сильно недолегированных купратах с малыми Ферми поверхностями могут быть существенно отличными от таких особенностей изотопического эффекта в умеренно недолегированных купратах с большими Ферми поверхностями, так как ситуация будет отличной для сильно недолегированных систем. Используя (3.8) и (3.14), получаем следующее выражение для коэффициента изотопического эффекта на T^* в сильно недолегированных купратах:

$$\alpha_{T^*} = \frac{b\mu^{1/4}}{4\left(1+\frac{M}{M'}\right)(1+b\mu^{1/4})}\left[1 - \frac{1}{\lambda_S^*(\mu)}\right] \tag{3.15}$$

Из (3.15) видно, что α_{T^*} является отрицательным при $\lambda_S^*(\mu) < 1$ и зависит от отношения M/M' и константы связи $\lambda_S^*(\mu)$, а также от других параметров, характеризующих купратные соединения.

Для $n = 0.3 \cdot 10^{21}$см$^{-3}$ и$\tilde{\varepsilon} = 5.0 - 6.5$, условие $\varepsilon_F < E_p$ выполняется (таблица 3.2). Зависимости $\alpha_{T^*}^{O}(\tilde{\varepsilon})$, $\alpha_{T^*}^{Cu}(\tilde{\varepsilon})$и $T^*(\tilde{\varepsilon})$ для $n = 0.3 \cdot 10^{21}$см$^{-3}$ и $\lambda_{ph} - \lambda_c = 0.3$ приведены на Рис. 3.7. Как видно, хотя $\alpha_{T^*}^{O}$ является довольно малым и отрицательным, но является заметным (см. основную панель на Рис. 3.7). Тогда как коэффициент медного изотопического эффекта приблизительно в четыре раза меньше по величине, т.е. $\alpha_{T^*}^{Cu} \approx 0.25\ \alpha_{T^*}^{O}$ (см. вставку на Рис. 3.7). Изменение $\alpha_{T^*}^{O}$ как функции $\lambda_{ph} - \lambda_c$ при заданных значениях параметров $\tilde{\varepsilon} = 6$ и $n = 0.3 \cdot 10^{21}$см$^{-3}$ показаны на Рис.3.8. При этом нами обнаружено, что $\alpha_{T^*}^{O}$ увеличивается с увеличением разности $\lambda_{ph} - \lambda_c$. Аналогично, $\alpha_{T^*}^{Cu}$ увеличивается с увеличением разности $\lambda_{ph} - \lambda_c$ как показано в вставке на Рис. 3.8.

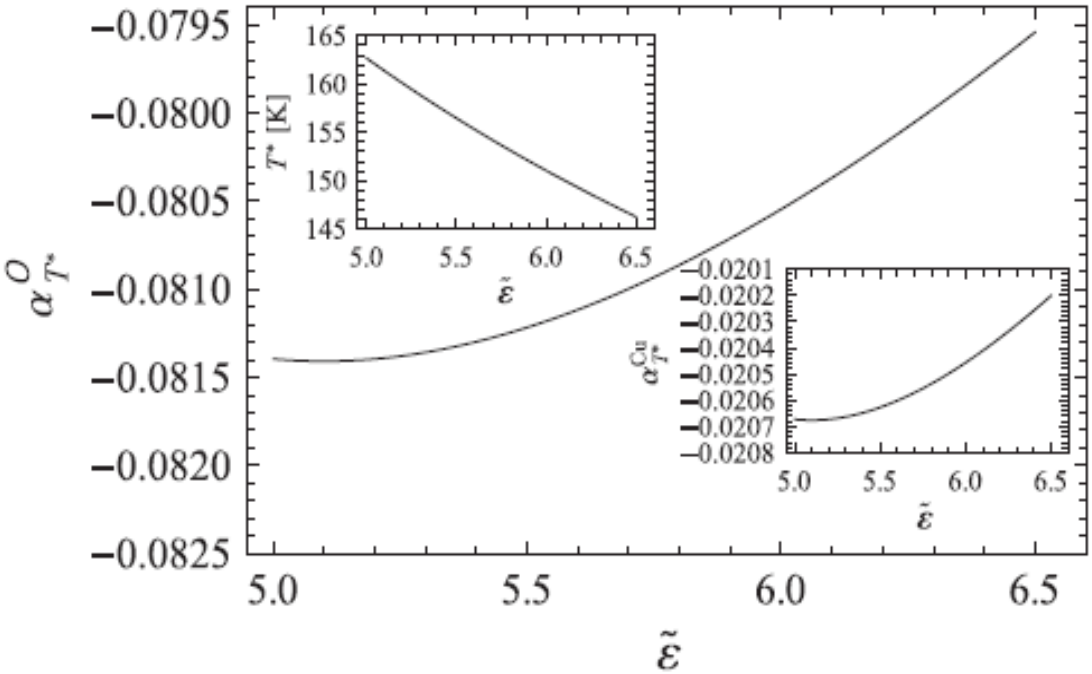

Рис. 3.7. Изменение $\alpha_{T^*}^{O}$ (основная панель), $\alpha_{T^*}^{Cu}$ (нижняя вставка) и T^* (верняя вставка) как функции $\tilde{\varepsilon}$ для $\lambda_{ph} - \lambda_c = 0.3$ и $n = 0.3 \cdot 10^{21}$ см$^{-3}$.

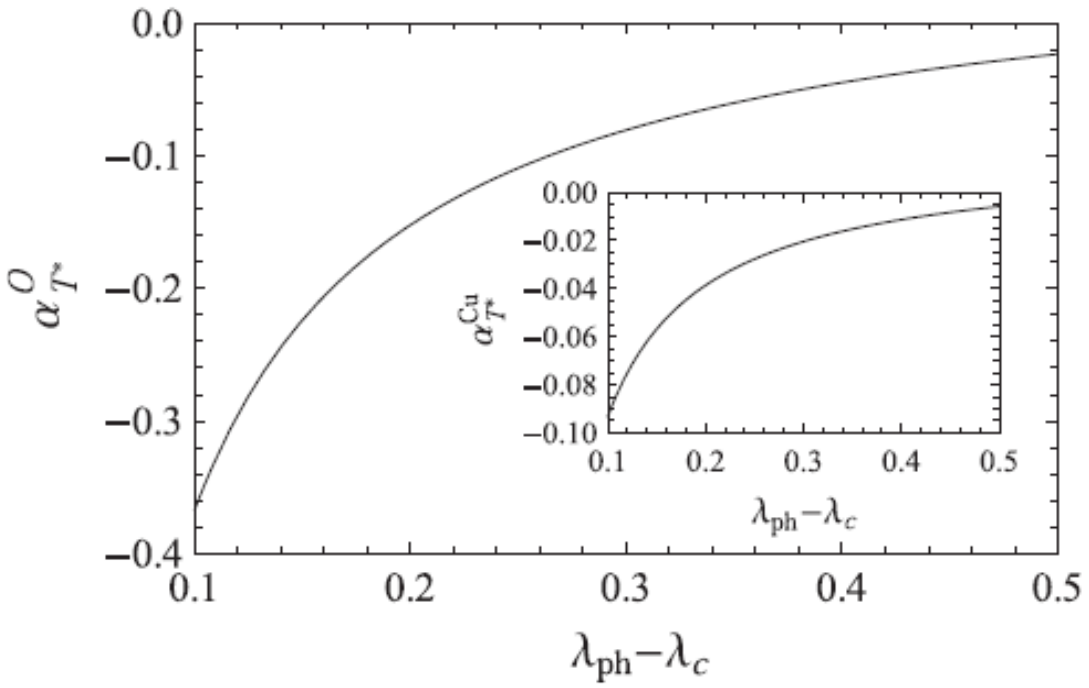

Рис. 3.8. Изменение $\alpha^{O}_{T^*}$ (основная панель) и $\alpha^{Cu}_{T^*}$ (вставка) как функции $\lambda_{ph}-\lambda_c$ для $\tilde{\varepsilon}=6$ и $n=0.3\cdot 10^{21}$см$^{-3}$.

Как нами показано в Гл. 2 (см. Рис.2.6), температура образования поляронных куперовских и БКШ-подобной псевдощели T^* в недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратах гораздо выше, чем T_c, но с увеличением уровня легирования T^* становится равным T_c и является температурой сверхпроводящего перехода в сильно сверхлегированных купратах. Поэтому, изотопические эффекты на T^* в этих купратных соединениях проявляются как изотопические эффекты на T^*. Ниже нами исследован этот вопрос.

§3.5. Изотопические эффекты на критические температуры сверхпроводящего перехода в сильно сверхлегированнных купратах

Из вышеизложенного следует, что в недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных купратах температура куперовского спаривания поляронных носителей тока T^* не совпадает с температурой сверхпроводящего перехода T_c поляронных куперовских пар из-за существования поляронных эффектов в этих ВТСП-материалах. Однако,

поляронные эффекты ослабеваютс увеличением уровня легирования купратов и исчезают $(E_p = 0)$ в сильно сверхлегированных купратах, в которых характеристическая температура T^* будет совпадать с T_c [109; с.43-50]. Такие сверхлегированные купраты с большими энергиями Ферми $\varepsilon_F = \varepsilon_F^f \gg \hbar\omega_{LO}$ становятся БКШ сверхпроводниками с константой электрон-фононной связи $\lambda^* = \lambda_{BCS}$, где $T^* = T_c$ и куперовские пары квазисвободных носителей тока являются Фермионами точно также, как в обычной теории БКШ.

При $E_p = 0$ и $T = T^* = T_c$, $\varepsilon_A = E_p + \hbar\omega_{LO} = \hbar\omega_{LO} \gg k_B T_c$ и $\varepsilon_c = \varepsilon_F^f \gg \hbar\omega_{LO}$, БКШ-подобное уравнение (2.14) для определения T_c можно написать в виде [109; с.43-50]

$$\frac{1}{\lambda_{BCS}} = \int_0^{\hbar\omega_{LO}} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} tanh \frac{\varepsilon}{2k_B T^*(=T_c)} \tag{3.16}$$

из которого следует, что

$$k_B T^*(= T_c) \simeq 1.134\hbar\omega_{LO} \exp\left[-\frac{1}{\lambda_{BCS}}\right], \tag{3.17}$$

где $\lambda_{BCS} = D(\varepsilon_F^f)\tilde{V}$,$D\left(\varepsilon_F^f\right)$ – плотность состояний на уровне Ферми ε_F^f, $\tilde{V} = (V_{ph} - \tilde{V}_c)$ – эффективный притягательный потенциал взаимодействия между спаривающими носителями тока, $\tilde{V}_c = V_c/[1 + D\left(\varepsilon_F^f\right)V_c \ln(\varepsilon_F^f/\hbar\omega_{LO})]$- экранированный кулоновский потенциал взаимодействия между двумя носителями. Можно полагать, что энергия Ферми квазисвободных дырок (или электронов) в сильно сверхлегированных купратах будет порядка $\varepsilon_F^f \gtrsim 0.3$ эВ. Поэтому, плотность состояний $D(\varepsilon_F^f)$ можно также приближенно аппроксимировать как $D\left(\varepsilon_F^f\right) = 1/\varepsilon_F^f$, где $\varepsilon_F^f = \hbar^2(3\pi^2 n)^{2/3}/2m_e$.

Коэффициент изотопического эффекта на $T^*(= T_c)$ определяется из соотношения

$$\alpha_{T_c} = -\frac{dlnT_c}{dlnM} \tag{3.18}$$

Для изучения изотопических эффектов на T_c в сильно сверхлегированных купратах, выражение (3.17) можно записать в виде [109; с.43-50]

$$k_B T_c \simeq 1.134\hbar\omega_{LO} \exp\left[-\frac{1}{\lambda_{BCS}(\mu)}\right] \qquad (3.19)$$

где $\omega_{LO}(\mu) = (2\beta/\mu)^{1/2}$, $\lambda_{BCS}(\mu) = \lambda_{ph} - \tilde{\lambda}_c(\mu)$, $\tilde{\lambda}_c(\mu) = \lambda_c/[1 + \lambda_c \ln(\varepsilon_F^f/\hbar\omega_{LO})]$, $\lambda_{ph} = [2m_e/\hbar^2(3\pi^2 n)^{2/3}]V_{ph}$, $\lambda_c = [2m_e/\hbar^2(3\pi^2 n)^{2/3}]V_c$.
Используя уравнения (3.18) и (3.19), получаем (см. Приложение D)

$$\alpha_{T_c} = \frac{1}{2(1+M/M')}[1 - (\frac{\tilde{\lambda}_c}{\lambda_{BCS}})^2] \qquad (3.20)$$

Согласно уравнению (3.17), значение T_c в сильно сверхлегированных купратах также как в обычных металлических сверхпроводниках становится довольно маленьким и равным 9,5 K при $\hbar\omega_{LO} = 0.05$ эВ и $\lambda_{BCS} = 0.236$. Это значение T_c согласуется с ее экспериментальным значением $T_c = 9.4$ K,наблюдаемым в сильно сверхлегированном купратном соединении $Bi_{1.74}Sr_{1.88}Pb_{0.38}CuO_{6+\delta}$ [125; с.067002].

Сильно сверхлегированные купратные сверхпроводника и $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ($x \gtrsim 0.2$) имеют меньшую T_c, чем недолегированные и умеренно сверхлегированные купратные соединения на основе лантана, которые имеют $T_c \simeq 40$ K [39; с.353-419]. Поэтому, можно ожидать, что сильно сверхлегированные купратные сверхпроводники на основе лантана имеют приблизительно $T_c \lesssim 30$ K. Используя уравнение (3.17), получаем $T_c \lesssim 30$ K при $\hbar\omega_{LO} \simeq 0.047$ эВ [38; с.897] и $\lambda_{BCS} = 0.333$ для этих систем. Из уравнения (3.20) следует, что коэффициент кислородного изотопического эффекта на T_c в таких лантановых соединениях является положительным для $\lambda_{BCS} > \tilde{\lambda}_c$ и

меньше, чем 0.5. Выбирая $\lambda_{BCS} \simeq 0.333$ и $\tilde{\lambda}_c = 0.067$ для этих систем, находим

$$\alpha_{T_c}^{O} \simeq \frac{1}{2(1+M_O/M_{Cu})}[1-0.04] = 0.38 \qquad (3.21)$$

В сильно сверхлегированных купратах, коэффициент как кислородного $\alpha_{T_c}^{O}$, так и медного $\alpha_{T_c}^{Cu}$ изотопического эффектов будет меньше, чем 0.5 и становится равным нулю при $\lambda_{ph} = 2\tilde{\lambda}_c$. При этом $\alpha_{T_c}^{O}$ и $\alpha_{T_c}^{Cu}$ являются положительными при $\lambda_{ph} > 2\tilde{\lambda}_c$ и становятся отрицательными для $\lambda_{ph} < 2\tilde{\lambda}_c$. При этом $\alpha_{T_c}^{O}$ и $\alpha_{T_c}^{Cu}$ являются положительным при $\lambda_{ph} > 2\tilde{\lambda}_c$ и становятся отрицательными для $\lambda_{ph} < 2\tilde{\lambda}_c$. Таким образом, изотопические эффекты на T_c в сильно сверхлегированных купратах также как в обычных металлах [126; с.2358-2364] являются положительными или могут стать даже отрицательными.

Выводы

1. Используя развитую нами БКШ-подобную теорию куперовского спаривания поляронных носителей при характеристической температуре T^* выше T_c, получены новые выражения для температуры образования псевдощели T^* и для коэффициентов изотопических эффектов,рассчитаны температуры образования БКШ-подобной псевдощели T^* при изотопических замещениях ($^{16}O \rightarrow {}^{18}O$) и ($^{63}Cu \rightarrow {}^{65}Cu$), изотопические смещения ΔT^*, коэффициенты кислородных $\alpha_{T_c}^{O}$ и медных $\alpha_{T_c}^{Cu}$ изотопических эффектов на T^* в различных ВТСП-купратах.

2. Объяснены кислородного и медного изотопических эффектов на T^*, которые наблюдались экспериментально в различных ВТСП-купратах с учетом поляронных эффектов в них, также разности в концентрациях носителей n, силах электрон-фононных связей $\lambda_{ph,}$ параметрах кулоновского взаимодействия λ_c и эффективных диэлектрических проницаемостях $\tilde{\varepsilon}$ в различных образцах недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратов, которые были использованы в разных экспериментах. В частности, объяснено существование малых положительных и противоположных знаков кислородного изотопического эффекта, ощутимых и очень больших отрицательных кислородных и медных изотопических эффектов на T^* в ВТСП-купратах с большими Ферми поверхностями $\varepsilon_F > E_p + \hbar\omega_{LO}$ в разумном согласии с экспериментальными данными.

3. Предложена модифицированная БКШ-подобная модель, описывающая куперовское спаривание поляронов и образование псевдощели в сильно недолегированных ВТСП-купратах с малыми Ферми поверхностями $\varepsilon_F < E_p$. Обнаружено, что количественные особенности кислородных и медных изотопических эффектов на T^* в этих материалах существенно отличаются от умеренно недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратов, имеющих сравнительно большие Ферми поверхности.

4. Показано, что сильно сверхлегированные купраты являются БКШ-подобными сверхпроводниками с $T^* = T_c$, и характерные изотопические эффекты на T_c являются аналогичными как в обычных металлических сверхпроводниках. При этом получены новые и соответствующие сильно сверхлегированным купратным сверхпроводникам выражения для критической температуры сверхпроводящего перехода T_c и коэффициента изотопического эффекта на T_c.

Заключение

На основе проведенных исследований по диссертации на соискание ученой степени доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам на тему «Псевдощелевые явления и разработка моделей влияния изотопических эффектов на температуру образования псевдощели в купратных высокотемпературных сверхпроводниках» можно сделать следующие выводы:

1. Показана возможности образования двух различных типов (неспаривательной и спаривательной) псевдощелей в недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных купратах *LSCO*и *Bi-2212* на основе модели больших поляронов и модифицированной БКШ-подобной модели прекурсивного спаривания поляронных носителей выше T_c в этих необычных ВТСП-материалах.
2. Определены возможности образования неспаривательной поляронной псевдощели Δ_p в спектрах возбуждения в ВТСП-купратах $LSCO$ и $Bi-2212$ при необычных электрон-фононных взаимодействиях и промежуточных уровнях легирования (т.е. от недолегированного до сильно сверхлегированного режима). Эта псевдощель зависящая от уровня легирования (но не от температуры) купратов проявляется ниже характерной температуры диссоциации больших поляронов T_p, которая обращается в нуль при некотором уровне легирования слегка превышающей оптимальную и соответствует к переходу ВТСП-купратов $LSCO$ и $Bi-2212$ из псевдощелевого металлического состояния в обычное металлическое состояние.
3. Показана, что БКШ-подобная спаривательная псевдощель Δ^* образуется в спектрах возбуждения недолегированных, оптимально легированных и умеренно сверхлегированных ВТСП-купратов $LSCO$ и $Bi-2212$ при куперовском спаривании больших поляронов соответственно гораздо выше T_c, и несколько выше T_c, причем эта спаривательная псевдощель

зависящая от температуры и уровня легирования появляется ниже другой характерной температуры T^* в этих ВТСП-материалах.

4. Получены характерные фазовые диаграммы нормальных состояний ВТСП-купратов $LSCO$ и $Bi-2212$ и показаны возможности существования двух различных характеристических температур T_p и T^* выше T_c, которые соответствуют переходам от обычного металлического состояния в псевдощелевое состояние (при $T = T_p$) и от поляронного псевдощелевого состояния в БКШ-подобное псевдощелевое состояние (при $T = T^*$).
5. Получены аналитические выражения для температуры образования БКШ-подобной псевдощели T^* в ВТСП-купратах с большими и малыми поверхностями Ферми, а также получены явные аналитические выражения для T^* зависящие от концентрации поляронных носителей (т.е. от уровня легирования) и от массы изотопов кислорода и меди для изучения изотопических эффектов на T^*.
6. Предсказаны и количественно объяснены экспериментально наблюденные температуры образования псевдощели T^*, изотопические сдвиги этой характеристической температуры ΔT_O^* и ΔT_{Cu}^*, коэффициенты новых изотопических эффектов $\alpha_{T^*}^{O}$ и $\alpha_{T^*}^{Cu}$ в различных ВТСП-купратах, причем объяснены существования малых положительных и противоположных знаков кислородного изотопического эффекта на T^*, заметных и очень больших отрицательных кислородных и медных изотопических эффектов на T^* в различных ВТСП-купратах которые находятся в разумном согласии с экспериментальными данными.

БЛАГОДАРНОСТИ

Считаю своим приятным долгом выразить искреннюю и глубокую признательность своему научному консультанту доктору физико-математических наук, профессору Б.Л. Оксенгендлеру за постоянную поддержку и помощь, своевременные консультации и плодотворное обсуждение результатов.

Я признателен д.ф.-м.н. У.Т. Курбанову, к.ф.-м.н. П.Ж. Байматову за дискуссии и полезные советы при выполнении данной работы.

Также я выражаю благодарность директору ИЯФ АН РУз И.И. Садикову за постоянное внимание к моей работе и коллективу лаборатории отдела радиационной физики твердого тела и физики наноматериалов, всему коллективу и дирекции ИЯФ АН РУз за поддержку и постоянную помощь в завершении данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела.-М.: Наука,Москва. 1978.–714 с.
2. Вонсовский С.В., Кацнельсон М.И. Квантовая физика твердого тела.- М.: Наука, Москва. 1983.-454 с.
3. Павлов П.В., Хохлов А.Ф., Физика твердого тела. - М.: Высшая школа, Москва. 1985.-494с.
4. Анималу А., Квантовая теория кристаллических твердых тел. – М.: Мир,Москва. 1981.-574 с.
5. Косевич А. М., Физическая механика реальных кристаллов. – Киев: Наукова Думка, 1981.-328 с.
6. Maksimov E.G. High-temperature superconductivity: the current state// Physics-Uspekhi. –Moscow, 2000.-№10–Vol.43.-p.965-990.
7. Smith R.A., Semiconductors// Secondedition. – Cambridge: Cambridge Universitypress, Great Britain. 1978.-p.540.
8. Линтон Э.А., Сверхпроводимость. - М.: Мир, Москва. 1971.-262 с.
9. Жилич А.Г., В кн. Физика на пороге новых открытий. Под Ред. Л. Н. Лабзовского, Гл. 5. – Л.: Издательство Ленинградского Университета, 1990.
10. Dzhumanov S., Theory of Conventional and Unconventional Superconductivity in the High-T_c cuprates and other systems. – New York: Nova Science Publishers, 2013.-p.356.
11. Садовский М.В. Псевдощель в высокотемпературных сверхпроводниках// Успехи физических наук. – Москва, 2001.-№5.-С.539-564.
12. Прокофьев Д.Д., Волков М.П., Бойков Ю.А. Величина и температурная зависимость псевдощели в YBCO, полученные из резистивных измерений// Физика твердого тела. – Москва, 2003. – т.45. №7. С.1168-1176.
13. Давидов А.С., Теория твердого тела. – М.: Наука, Москва. 1976.-640 с.
14. Абрикосов А.А., Основы теории металлов. – М.: Наука, Москва. 1987.-520 с.
15. Балкаузен Ч., Введение в теория поля Лигандов. – М.: Мир, Москва. 1964.-360 с.

16. И.Б. Берсукер, Эффект Яна-Теллера и вибранные взаимодействия в современной химии. –М.: Наука, Москва. 1987.
17. Anderson P.W., The theory of superconductivity in the high- T_c cuprates. – Princeton: Princeton University Press. New Jersey, USA. 1997.-p.454.
18. Pickett W.E., Electronic structure of the high-temperature oxide superconductors// Reviews of Modern Physics. USA. 1989.-Vol.61,-p.433.
19. Horsh P, Stephan W., Electronic properties of high- T_c superconductors. – Berlin: Springer, 1993.-p.351.
20. Аврамов П. В., Овчинников С.Г. Эффекты сильных электронных корреляций в рентгеновских и электронных спектрах ВТСП (обзор)// Красноярск: Москва. Физика Твердого Тела. 2000 т.42,-770 с.
21. Mott N. F. The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals// Proceedings of the Physical Society. London, 1949.-A62,-p.416-422.
22. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands// Proceedings of the Royal Society. London, 1964.-A277,-p.237-259.
23. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands III. An improved solution// Proceedings of the Physical Society. London, 1949.-A281,- p.401-419.
24. Маделунг О. Локализованные состояния. Физика твердого тела. – М.: Наука, Москва. 1985.-586с.
25. Böttger H, Bryksin V.V., Hopping Conduction in Solids. – Berlin: Akademie – Verlag, 1985.
26. Imada M., Fujimori A., Tokura Y. Metall-insulator transitions// Reviews of Modern Physics. USA. 1998.-Vol.70,-p.1039.
27. Zaanen J., Sawatzky G.A., Allen J.W. Band gaps and electronic structure of transition-metal compounds// Physical Review of Letters. USA. 1985.-Vol.55,-p.418.
28. Ford P.J., Saunders G.A. High-temperature superconductivity-ten years on// Contemporary Physics. Armenian. 1997.-Vol.38,-p.63-81.

29. Tachiki M., Matsumoto H., Journal of Magnetism and Magnetic Materials. Netherlands. 1990.-Vol.597,-p.90-91.
30. Uchida S. Proceedings of Internatinal Conference on Materials and Mechanisms of High Temperature Superconductivity M^2S-HTSC-III, Kanazawa, Physica C. Netherlands 1991.-Vol. 28.-p.185-189.
31. Ino A., Mizokawa T., Kobayashi K., Fujimori A., Sasagawa T., Kimura T., Kishio K., Tamasaki K., Eisaki H., Uchida S. Doping Dependent Density of States and Pseudo-Gap Behavior in $La_{2-x}Sr_xCuO_4$// Physica. Review. Letters. USA. 1998.-Vol.81.-p.2124.
32. Timusk T., Statt B. The pseudogap in high temperature superconductors: An experimental survey// Reports on Progress in Physics. Gordon Baym, USA 1999.-Vol.62,- p.61-122.
33. Lee P.A., Nagaosa N., Wen X.-G. Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity// Reviews of Modern Physics. USA. 2006.-Vol.78.-p.17.
34. Basov D.N., Timusk T. Electrodynamics of high-T_c superconductors// Reviews of Modern Physics. USA. 2005.-Vol.77,-p.721.
35. Phillips Ph. Mottness: identifying the propagating charge modes in Doped Mott insulators// Reviews of Modern Physics. USA. 2010.-Vol.82.-p.1719.
36. Damascelli A., Hussain Z., Shen Z.-X. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors// Reviews of Modern Physics. USA. 2003.-Vol.75.-p.473.
37. Ashkenazi J., Kuper C.G. The cuprate superconductors: Narrow correlated-electron bands and interlayer pairing via plane-chain charge transfer// Physica C. Netherlands 1989.-Vol.162-164.-p.767-768.
38. Kastner M. A., Birgeneau R. J., Shirane G., Endoh Y. Magnetic, transport, and optical properties of monolayer copper oxides// Reviews of Modern Physics. USA. 1998.-Vol.70.-p.897.

39. Fischer O., Kugler M., Maggio-Aprile I., Berthod Ch. Scanning tunneling spectroscopy of high-temperature superconductors// Reviews of Modern Physics. USA. 2007.-Vol.79,-p.353-419.
40. Dzhumanov S., Ganiev O.K., Djumanov Sh.S. Pseudogap formation and unusual quasiparticle tunneling in cuprate superconductors: Polaronic and multiple-gap effects on the tunneling spectra// Physica B. USA. 2013.-Vol.427.-p.17.
41. Matsuzaki T., Ido M., Momono N., Dipasupil R.M., Nagata T., Sakai A., Oda M. Superconducting Gap and Pseudogap Behavior in High-T_c cuprates// Journal of Physics and Chemistry of Solids. Amsterdam, Netherlands. 2001.-Vol.62,-p.29-33.
42. Fujimori A., Ido A., Yoshida T., Mizokawa T., Nakamura M., Kin C., Shen Z.-X., Kishio K., Kakeshita T., Eisaki H., Uchida S.. Pseudogaps and dynamical stripes in $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ from fhotoemission spectroscopy// Journal of Physics and Chemistry of Solids. Amsterdam, Netherlands. 2001. –Vol.62.-p.15-19.
43. Takahashi T., Sato T., Yokoya T., Kamiyama T., Naitoh Y., Mochiku T., Yomada K., Endoh Y., Kadowaki K. Two different types of pseudogaps in high-T_c superconductors// Journal of Physics and Chemistry of Solids. Amsterdam, Netherlands. 2001.-Vol.62.-p.41-45.
44. Ding H., Yokoya T., Campuzano J.C., Takahashi T., Randeria M., Norman M.R., Mochiku T., Kadowaki K., Giapintzakis J. Spectroscopic evidence for a pseudogap in the normal state of underdoped high-T_c superconductors// Nature. Great Britan. 1996.-Vol.382,-p.51-54.
45. Renner Ch., Revaz B., Genoud J.-Y., Kadowaki K., Fisher O. Pseudogap Precursor of the Superconductinf Gap in Under- and Overdoped $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$// Physica. Review. Letters.USA. 1998.-Vol.80.-p.149.
46. Джуманов С., Хабибуллаев П. К., Изв. Ан УзССР, сер. Физ-мат. Наук 1, 47 (1990).
47. Dzhumanov S. A unified theory of a new two-stage Fermi-Bose-liquid scenarios of superconductivity// Physica C. Amsterdam, Netherlands. 1994.-Vol.235-240,-p.2269-2270.

48. Dzhumanov S., Khabibullayev P. K. Microscopic theory of single particle and pair condensation of an attracting Bose gas as the basis for superfluidity and superconductivity// Pramana Journal of physics. India. 1995.-Vol.45,-p.385-418.
49. Alexandrov A.S., Theory of superconductivity: from weak to strong coupling. – Bristol: IoP Publishing, (2003).
50. Emery V.J., Kivelson S.A., Zachar O. Spin-gap proximity effect mechanism of high-temperature superconductivity// Physical Review B. American Physical Society. 1997.-Vol.56,-p.6120.
51. Caprara S., Castellani C., Di Kastro C., Grilli M., Perali A. Charge and spin inhomogeneity as a key to the physics of the high T_c cuprates// cond-mat/9907265. 1999.
52. Varma C.M. Non-Fermi-liquid states and pairing instability of a general model of copper oxides metals// Physical Review B. American Physical Society. 1997. – Vol.55,-p.14554.
53. Pines D., Turkish Journal of Physics. 1996.-Vol.20,-p.535.
54. Stojkovic B.P., Pines D. Theory of the longitudinal and Hall conductivities of the cuprate superconductors// Physical Review B. American Physical Society. 1997.-Vol.55,-p.8576.
55. Emin D., Polarons// – Cambridge: Cambridge University Press, (2013).-p.212.
56. Daunt J.G., Mendelssohn K., Proceedings of the Royal Society London. 1946.-A.185,-p.225.
57. Maxwell E. Isotope Effect in the Superconductivity of Mercury// Physical Review. USA. 1950.-Vol.78,-p.477.
58. Reynolds C.A., Serin B., Wright W.H., Nesbitt L.B. Superconductivity of Isotopes of Mercury// Physical Review. USA. 1950.-Vol.78,-p.487.
59. Zhao G.M., Keller H., Conder K. Unconventional isotope effects in the high-temperature cuprate superconductors// Journal of Physics: Condensed Matter. United Kingdom. 2001.Vol.13,-p.29.
60. Bishop A.R., Bussmann-Holder A., Dolgov O.V., Furrer A., Kamimura H., Keller H., Khasanov R., Kremer R. K., Manske D., Müller K. A., Simon A. Real and

Marginal Isotope Effects in Cuprate Superconductors// Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. Springer US. 2007.-Vol.20,-p.393-396.

61. Kresin V.Z., Wolf S.A. Electron-lattice interaction and its impact on high-T_c superconductivity// Reviews of Modern Physics. USA. 2009.-Vol.81,-p.481.
62. Alexandrov A.S., Zhao G.M. Isotope effects in high-T_c cuprate superconductors as support for the bipolaron theory of superconductivity// New Journal of Physics . Great Britain. 2012.-Vol-14,-p.013046.
63. Zhao G.–M., Hunt M.B., Keller H., Müller M.A. Evidence for polaronic supercarriers in the copper oxide superconductors $La_{2-x}Sr_xCuO_4$// Nature USA. 1997.-Vol.385,-p.236.
64. Боярский Л.А. Псевдощелевые эффекты в сыльно коррелированных электронных системах// ФНТ Москва. 2006. Т-32, с.1078.
65. Dzhumanov S., Karimboev E.X, Djumanov Sh.S, Kurbanov U.T., Unusual oxygen-isotope effects on the pseudogap formation temperature in high-T_c cuprate superconductors// Uzbek Journal of Physics.Tashkent, 2013.- №4.-c.253.
66. Dzhumanov S., Gafforov N., Djumanov Sh.S. Modified BCS-like pairing theory of polaronic carriers// Доклады Академии Наук Респулики Узбекистан. Ташкент. 2014.-Vol.4,-p.25-28.
67. Dzhumanov S., Baimatov P. J., Djumanov Sh. S. Unusual Conduction mechanisms of cuprate superconductors in the normal state and pseudogap effects// ВестникНЯЦ РК. Kazahstan. 2016. Vol.1,-p.87.
68. Djumanov Sh.S, Yavidov B.Ya., Dzhumanov S. The in-plane normal state conductivity of underdoped to overdoped cuprate superconductors// Nuclear Science and its application: Book of abstracts of the International Conference, September. 22-28 Samarkand, Uzbekistan. 2012.-p.288.
69. Dzhumanov S. Possible insulating, metallic and superconducting states in doped high-T_c superconductors// Solid State Communications. Amsterdam, Netherlands. 2000.-Vol.115,-p.155-160.
70. Dzhumanov S., Salikhbaev U.S., Djumanov Sh.S. Pseudogap states in doped high-T_c cuprate superconductors and nuclear matter: Book of abstracts of the seventh

international conference. Modern problems of nuclear physics. 22-25 September, 2009. Tashkent, Uzbekistan.

71. Tallon J.L., Loram J.M. The doping dependence of T^*-what is the real high-T_c phase diagram?// Physica C. Netherlands. 2001. Vol-349,-p.53-68.
72. Daou R., Olivier Cyr-Choiniere, Francis Laliberte, David LeBoeuf, Nicolas Doiron-Leyraud, Yan J.-Q., Zhou J.-S., Goodenough J.B. Taillefer L, Thermopower across the stripe critical point of $La_{1.6-x}Nd_{0.4}Sr_xCuO_4$: Evidence for a quantum critical point in a hole-doped high-T_c superconductor// Physical Review B. USA. 2009. Vol.79,-p.180505.
73. Мигдал А.Б., Журнала експериментальной и теоретический физики. Москва. 1958.-т.34,-с.1428.
74. Элиашберг Г.М., Журнала експериментальной и теоретический физики. Москва. 1960.т.38, с.966 (1960); т.39, с.1437.
75. Kresin V.Z., Morawitz H., Wolf S.A., Mechanisms of Conventional and high-T_c Superconductivity. – Oxford: Oxford University press 1993.
76. Pietronero L., Strässler S., Grimaldi C. Nonadiabatic superconductivity. Vertex corrections for the electron-phonon interactions// Physical Review B. USA. 1995 Vol.52,-p.10516.
77. Eschrig M. The effect of collective spin-1 excitations on electronic spectra in high-T_c superconductors// Advances in Physics. USA. 2006. Vol.55,-p.47-183.
78. Tsuei C.C., Kirtley J.R. Pairing symmetry in cuprate superconductors// Reviews of Modern Physics. USA. 2000. Vol.72,-p.969.
79. Sun A.G., Gajewski D.A., Maple M.B., Dynes R.C. Observation of Josephson pair tunneling between a high-T_c cuprate ($YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$) and a conventional superconductor (Pb)// Physica. Review. Letters.USA. 1994. Vol.72,-p.2267.
80. Annet J.F., Wallington J.P. Pairing gap symmetry and pseudogap symmetry// Physica C. Netherlands. 2000. Vol.341-348, pp.1621-1623.
81. Komiya S., Ando Y., Sun X.F., Lavrov A.N. c-axis transport and resistivity anisotropy of lightly to moderately doped $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ single crystals:

Implications on the charge transport mechanisms// Physical. Review. B. USA. 2002. Vol.65,-p214535.

82. Deutscher G. Andreev-Saint James reflactions: A probe of cuprate superconductors// Reviews of Modern Physics. USA. 2005. Vol.77,-p.109.
83. Hoffman J.E., Hudson E.W., Long K.M., Madhavan V., Eisaki H., Uchida S., Davis J.C. A four unit cell periodic pattern of quasi-particle states surrounding vortex cores in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$// Science. USA. 2002. Vol.295,-p.466-469.
84. Li Q., Tsay Y.N., Suenaga M., Klemm R.A., Gu G.D., Koshizuka N. $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ Bicrystal c-Axis Twist Josephson Junctions: A New Phase-Sensitive Test of Order Parameter Symmetry// Physica. Review. Letters.USA. 1999. Vol.83,-p.4160.
85. Müller K.A. Estimation of the Surface-d to Bulk-s Crossover in the Macroscopic Superconducting Wavefunction in Cuprates// Journal of Superconductivity. Springer US. 2004.-Vol.17,-p.3-6.
86. Dzhumanov S., Khudayberdiev Z.S., Djumanov Sh.S., Peculiar oxygen and copper isotope effects on the pseudogap formation temperature in underdoped to overdoped cuprates: Pseudogap induced by pairing corralations above T_c in cuprates with large and small Fermi surfaces// Physica B. Amsterdam, Netherlands. 2015.-Vol.465,-p.29-37.
87. Dzhumanov S., Precursor non-superconducting pairing and novel superconductivity in underdoped and optimally doped cuprates// Physica C. Netherlands. 2007. Vol.460-462,-p.1131-1132.
88. Oda M., Hoya K., Kubota R., Manabe C., Momono N., Nakano T., Ido M. Strong pairing interactions in the underdoped region of $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$// Physica C. Netherlands. 1997. Vol.281,-p.135-142.
89. Miyakawa N., Guptasarma P., Zasadzinski J.F., Hinks D.G., Gray K.E. Strong Dependence of the Superconducting Gap on Oxygen Doping from Tunneling Measurements on $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8-\delta}$// Physical Review Letters USA. 1998.-Vol.80,-p.157.

90. Nakano T., Momono N., Oda M. Correlation between the Doping Dependences of Superconducting Gap Magnitude $2\Delta\ 0$ and Pseudogap Temperature T^* in High-T_c Cuprates// Journal of the Physical Society of Japan. Japan. 1998.-Vol.67,-p.2622.
91. Dispasupil R.M., Oda M., Momono N., IdoM. Energy gap Evolution in the Tunneling Spectra of $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$// Journal of the Physical Society of Japan. Japan. 2002.-Vol.71,-p.1535.
92. Hüfner S., Hossain M.A., Damascelli A., Sawatzky G.A. Two Gaps make a high-temperature superconductor?// Reports on Progress in Physics. Great Britain. 2008.-Vol.71,-p.062501.
93. Ino A., Kim C., Nakamura M., Yoshida T., Mirzokawa T., Fujimori A., Shen Z.-X., Kakeshita T., Eisaki H., Uchida S. Doping-dependent evolution of the electronic structure of $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ in the superconducting and metallic phases// Physical Review B. USA. 2002.-Vol.65,-p.094504.
94. Yeh N.-C., Chen C.-T., Hammerl G., Mannbart J., Schneider A., Schulz R. R., Tajima S., Yoshida K., Garrigus D., Strasik M. Evidence of Doping-Dependent Pairing Symmetry in Cuprate Superconductors// Physical Review Letters USA. 2001.-Vol.87,-p.087003.
95. Kato T., Noguchi T., Saito R., Machida T., Sakata H. Gap distribution in overdoped $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ observed by scanning tunneling spectroscopy// Physica C. Netherlands. 2007.-Vol.460-462,-p.880-881.
96. Hwang H.Y., Batlogg B., Takagi H., Kao H.L., Kwo J., Cava R.J., Krajewski J.J., Peck W.F. Jr. Scaling of the temperature dependent Hall effect in $La_{2-x}Sr_xCuO_4$// Physical Review Letters. USA. 1994.-Vol.72,-p.2636.
97. Nalini J.G., Chen X.K., Hewitt K.C., Irwin J.C., Devereaux T.P., Kimura T., Kishio K. Evidence for magnetic pseudoscaling in overdoped $La_{2-x}Sr_xCuO_4$// Physical Review B. USA. 1998.-Vol.57,-p.11077.
98. Castellani C., Castro C.Di., Grilli M. STRIPE FORMATION: A QUANTUM CRITICAL POINT FOR CUPRATE SUPERCONDUCTORS// Journal of Physics and Chemistry of Solids. Amsterdam, Netherlands. 1998. Vol.59,-p.1694-1698.

99. Schmalian J., Pines D., Stojkovic B.. Microscopic theory of weak pseudogap behavior in the underdoped cuprate superconductors: General theory and quasiparticle properties// Physical Review B. USA. 1999. Vol.60,-p.667.
100. Ichida K., Yoshida K., Mito T., Tokunaga Y., Kitaoka Y., Asayama K., Nakayama Y., Shimoyama J., Kishio K. Pseudogap behavior in single-crystal $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ probed by Cu NMR// Physical Review B. USA. 1998. Vol.58,-p.5960.
101. Watanabe T., Fujii T., Matsuda A. Pseudogap in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ Studied by Measuring Anisotropic Susceptibilities and Out-of-Plain Transport// Physical Review Letters USA. 2000. Vol.84,-p.5848.
102. Kaminski A., Rosenkraz S., Fretwell H.M., Li Z., Raffy H., Randeria M., Norman M.R., Campuzano J.C. Crossover from coherent to incoherent electronic excitations in the normal state of high temperature superconductors// Physical Review Letters USA. 2003. Vol.90,-p.207003-207006.
103. Ren J.K., Zhu X.B., Yu H.F., Tian Ye, Yang H.F., Gu C.Z., Wang N.L., Ren Y.F., Zhao S.P. Energy Gaps in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ cuprate superconductors// Scientific Reports. London. Great Britain 2012. Vol.2,-p.248.
104. Varma C.M. High-temperature superconductivity: Mind the pseudogap// Nature. Great Britain. 2010. Vol.468,-p.184.
105. Bardeen J., Cooper L.N., Schieffer J.R. Theory of Superconductivity// Physical Review. USA. 1957.-Vol.108,-p.1175.
106. Fröhlich H. Theory of the Superconducting State. I. The Ground State at the Absolute Zero of Temperature// Physical Review. USA. 1950.-Vol.79,-p.845.
107. Falicow L.M. Superconductivity: a brief introduction to its phenomenology and theories// IEEE Quantum Electronics. USA. 1989.-Vol.25,-p.2358.
108. CohenM.L., GladstoneG., JensenM.A., SchriefferJ.R., Сверхпроводимость в полупроводниках и переходных металлах//.-М.: Мир, 1972.
109. Dzhumanov S., Baimatov P.J., Djumanov Sh.S. Unusual isotope effects on the pseudogap in high-T_c cuprate superconductors as support for the BCS-like pairing

theory of large polarons above T_c// Physica C. Amsterdam, Netherlands. 2015.-Vol.513,-p.43-50.

110. Devreese J.T., Alexandrov A.S. Froehlich Polaron and Bipolaron: Recent Developments// Reports on Progress in Physics. Great Britain. 2009. Vol.72,-p.066501.
111. Williams G.V.M., Tallon J.L., Quilty J.W., Trodahl H.J., Flower N.E. Absence of an Isotope Effect in the Pseudogap in $YBa_2Cu_4O_8$ as Determined by High-Resolution ^{89}YNMR// Physical Review Letters USA. 1998.-Vol.80,-p.377.
112. Raffa F., Ohno T., Mali M., Roos J., Brinkmann D., Conder K., Eremin M. Isotope Dependence of the Spin Gap in $YBa_2Cu_4O_8$ as Determined by Cu NQR Relaxation// Physical Review Letters USA. 1998.-Vol.81,-p.5912.
113. Temprano D.R., Mesot J., Janssen S., Conder K., Furrer A., Mutka H., Müller K. A. Large Isotope Effect on the Pseudogap in the High-Temperature Superconductor $HoBa_2Cu_4O_8$// Physical Review Letters USA. 2000.-Vol.84,-p.1990.
114. Temprano D.R., Mesot J., Janssen S., Conder K., Furrer A., Sokolov A., Trounov V., Kazakov S.M., Karpinski J., Müller K.A. Large copper isotope effect on the pseudogap in the high-temperature superconductor $HoBa_2Cu_4O_8$// European. Physical. Journal. B. France. 2001.-Vol.19,-p.5-8.
115. Temprano D.R., Conder K., Furrer A., Mutka H., Trounov V., Müller K.A. Oxygen and copper isotope effects on the pseudogap in the high-temperature superconductor $La_{1.81}Ho_{0.04}Sr_{0.15}CuO_4$ studied by neutron crystal-field spectroscopy// Physical. Review. B. USA. 2002.-Vol.66,-p.184506.
116. Tallon J.L., Islam R.S., Storey J., Willams G.V.M., Cooper J.R. Isotope Effect in the Superfluid Density of High-Temperature Superconducting Cuprates: Stripes, Pseudogap, and Impurities// Physical. Review. Letters. USA. 2005.-Vol.94,-p.237002.
117. Lanzara A., Zhao G.-M., Saint N. I., Bianconi A., Conder K., Keller H., Müller K.A. Oxygen-Isotope shift of the charge-stripe ordering temperature in

$La_{2-x}Sr_xCuO_4$ from x-ray absorption spectroscopy// Journal of Physics: Condensed. Matter. Great Britain. 1999.-Vol.11, L.541.

118. Zeyher R., Greco A. Large isotope effect on T_c in cuprates despite s small electron-phonon coupling// Physical. Review. B. USA 2009.-Vol.80,-p.064519.
119. Emin D., Hillery M.S. Formation of a large singlet bipolaron: Application to high-temperature bipolaronic superconductivity// Physical. Review. B. USA. 1989.-Vol.39,-p.6575.
120. Reagor D., Ahrens E., Cheong S.-W., Migliori A., Fisk Z. Large dielectric constants and massive carriers in La_2CuO_4// Physical. Review. Letters. USA. 1989. Vol.62,-p.2048.
121. Furrer A., Conder K., Höfliger P., Podlesnyak A. Isotope, pressure, and doping effects on the pseudogap in the LSCO-type compounds studied by neutron spectroscopy// Physica C. Netherlands. 2004.-Vol.408-410,-p.773-774.
122. Kirzhnits D.A., Maksimov E.G., Khomski D.I. The description of superconductivity in terms of dielectric response function// Journal of Low Temperature Physics. Germany. 1973.-Vol.10,-p.79-93.
123. Pietronero L., Strässler S., Grimaldi C. Nonadiabatic superconductivity. I. Vertex corrections for the electron-phonon interactions// Physical. Review. B. USA. 1995.-Vol.52,-p.10516.
124. Grimaldi C., Pietronero L., Strässler S. Nonadiabatic superconductivity. II. Generalized Eliashberg equations beyond Migdal's theorem// Physical. Review. B. USA. 1995.-Vol.52,-p.10530.
125. Wen H.-H., Mu G., Luo H., Yang H., Shan L., Ren C., Cheng P., Yan J., Fang L. Specific-Heat Measurement of a Residual Superconducting State in the Normal State of Underdoped $Bi_2Sr_{2-x}La_xCuO_{6+\delta}$ Cuprate Superconductors// Physical Review Letters. USA. 2009.-Vol.103,-p.067002.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

В случае модельного потенциала (2.16) БКШ-подобный энергетический щели можно записать в виде

$$\Delta_{F_1}(\vec{k},T)=\begin{cases}\Delta_{F_1}(T) & \text{для} \quad |\varepsilon(\vec{k})|,|\varepsilon(\vec{k}')|\le\varepsilon_A=E_p+\hbar\omega_{LO}\\ \Delta_{F_2}(T) & \text{для} \quad \varepsilon_A\le|\varepsilon(\vec{k})|,|\varepsilon(\vec{k'})|<\varepsilon_c\\ 0 & \text{для остальных случаях}\end{cases} \tag{A.1}$$

Тогда из уравнения (2.16) (после замены суммы по $\vec{k}$ интегралом по ε получим следующие системы уравнений для определения $\Delta_{F_1}(T)$ и $\Delta_{F_2}(T)$:

$$\Delta_{F_1}(T)=-D_p(\varepsilon_F)(V_c-V_{ph})\Delta_{F_1}(T)I_1-D_p(\varepsilon_F)V_c\Delta_{F_2}(T)I_2, \tag{A.2}$$

$$\Delta_{F_2}(T)=-D_p(\varepsilon_p)V_c\Delta_{F_1}(T)I_1-D_p(\varepsilon_p)V_c\Delta_{F_2}(T)I_2, \tag{A.3}$$

где

$$I_1=\int_0^{\varepsilon_A}\frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta_{F_1}^2(T)}}tanh\frac{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta_{F_1}^2(T)}}{2k_BT},$$

$$I_2=\int_{\varepsilon_A}^{\varepsilon_c}\frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta_{F_2}^2(T)}}tanh\frac{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta_{F_2}^2(T)}}{2k_BT}$$

$D_p(\varepsilon_F)$ плотность состояний на уровне Ферми поляронов определяя $\Delta_{F_2}^2(T)$ из (A.3) и подставляя его в (A.2) получаем

$$1=D_p(\varepsilon_F)\left[V_{ph}-\frac{V_c}{1+D_p(\varepsilon_F)V_cI_2}\right]I_1=\lambda^*I_1, \tag{A.4}$$

где $\lambda^*=D_p(\varepsilon_F)\tilde{V}_p$, $\tilde{V}_p=V_{ph}-V_c/[1+D_p(\varepsilon_F)V_cI_2]$ экранированный кулоновское взаимодействие между двух поляронов.

Предполагается, что при $T\to T^*$ энергетические щели $\Delta_{F_1}(T)$ и $\Delta_{F_2}(T)$ стремятся к нулю. Тогда при $\varepsilon_c>\varepsilon_A\gg k_BT^*$ второй интеграл I_2 становится равным к $\ln(\varepsilon_c/\varepsilon_A)$ и из (A.4) получаем уравнение (2.17), где вместо $\Delta_{F_1}(T)$ использовано $\Delta_F(T)$.

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Предэкспотенциальный множитель в (3.6) с учетом (3.5) можно написать в виде

$$E_p + \hbar\omega_{LO} = (\alpha_F + 1)\hbar\omega_{LO}, \qquad (B.1)$$

где $\alpha_F = \frac{e^2}{\hbar\tilde{\varepsilon}}\sqrt{m/2\hbar\omega_{LO}}$, $\frac{1}{\tilde{\varepsilon}} = \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}$, $\omega_{LO} = \sqrt{2\beta}\sqrt{\frac{1}{M} + \frac{1}{M'}} = \sqrt{\frac{2\beta}{\mu}}$, $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M} + \frac{1}{M'}$

Подставляя выражениедля α_F и ω_{LO} в (B.1), имеем

$$E_p + \hbar\omega_{LO} = A\mu^{-1/4}[1 + a\mu^{-1/4}] \qquad (B.2)$$

где $A = \frac{e^2}{\tilde{\varepsilon}}\sqrt{\frac{m}{2\hbar}}(2\beta)^{1/4}$, $a = \hbar\tilde{\varepsilon}\sqrt{\frac{2\hbar}{m}}(2\beta)^{1/4}/e^2$

Далее выражение для λ^* в (3.6) можно записать как

$$\lambda^*(\mu) = \frac{\widetilde{V}_p}{\varepsilon_F} = \frac{V_{ph}}{\varepsilon_F} - \frac{V_c/\varepsilon_F}{1+(V_c/\varepsilon_F)\ln[\frac{\varepsilon_c\mu^{1/4}}{A(1+a\mu^{-1/4})}]}, \qquad (B.3)$$

где $\varepsilon_F = \varepsilon_F^f/(1 + b\mu^{1/4})$, $\varepsilon_F^f = \hbar^2(3\pi^2 n)^{2/3}/2m_e$, $b = 1/6a$

Теперь вводя обозначения $\lambda_{ph} = V_{ph}/\varepsilon_F^f$ и $\lambda_c = V_c/\varepsilon_F^f$, уравнение (B.3) можно записать в виде

$$\lambda^*(\mu) = \lambda_{ph}\left(1 + b\mu^{\frac{1}{4}}\right) - \frac{\lambda_c\left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)}{U_c(\mu)} \qquad (B.4)$$

где $U_c(\mu) = 1 + \lambda_c\left(1 + b\mu^{\frac{1}{4}}\right) lnB_c(\mu)$, $B_c(\mu) = \frac{\varepsilon_F\mu^{1/4}}{A(1+a\mu^{-1/4})}$, $\varepsilon_F = \varepsilon_c$.

Тогда выражение (3.6) имеет следующий вид

$$k_B T^* = 1.134A\mu^{1/4}[1 + a\mu^{-\frac{1}{4}}]\exp[-\frac{1}{\lambda^*(\mu)}] \qquad (B.5)$$

ПРИЛОЖЕНИЕ С

Изменение величины T^* в (3.9) при изотопическом замещении атомов основной решетки другими их изотопами определяется из выражения (3.6) с учетом (В.5) как

$$\delta(k_B T^*) = k_B \delta T^* = 1.134A\left\{-\frac{1}{4}\mu^{-\frac{1}{4}}\left(1+a\mu^{-\frac{1}{4}}\right)\left[1+\frac{a\mu^{-\frac{1}{4}}}{1+a\mu^{-\frac{1}{4}}}\right]e^{-\frac{1}{\lambda^*(\mu)}}\frac{\delta\mu}{\mu}+\right.$$
$$\left.\mu^{-\frac{1}{4}}\left(1+a\mu^{-\frac{1}{4}}\right)e^{-\frac{1}{\lambda^*(\mu)}}\frac{\delta\lambda^*(\mu)}{(\lambda^*(\mu))^2}\right\}, \qquad (C.1)$$

$$\delta\lambda^*(\mu) = \delta\left[\lambda_{ph}\left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)-\frac{\lambda_c\left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)}{U_c(\mu)}\right] = \left[\frac{\lambda_{ph}b}{4}\mu^{\frac{1}{4}}\frac{\delta\mu}{\mu}-\right.$$
$$\left.\frac{\frac{\lambda_c b}{4}\mu^{\frac{1}{4}}U_c(\mu)\frac{\delta\mu}{\mu}-\lambda_c\left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)\delta U_c(\mu)}{U^2{}_c(\mu)}\right] = \left[\frac{\lambda_{ph}b}{4}-\frac{\lambda_c b}{4U_c(\mu)}\right]\mu^{\frac{1}{4}}\frac{\delta\mu}{\mu}+$$
$$\frac{\lambda_c\left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)}{U_c(\mu)}\left[\frac{\lambda_c b}{4}\left(\mu^{\frac{1}{4}}lnB_c(\mu)\right)\frac{\delta\mu}{\mu}+\lambda_c\left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)\frac{\delta B_c(\mu)}{B_c(\mu)}\right],$$

$$\delta B_c(\mu) = \frac{\varepsilon_F\mu^{1/4}}{4A}\left[1+\frac{a\mu^{-\frac{1}{4}}}{1+a\mu^{-\frac{1}{4}}}\right]\frac{1}{1+a\mu^{-\frac{1}{4}}}\frac{\delta\mu}{\mu}$$

Тогда (С.1) будет иметь вид

$$k_B\delta T^* \simeq -\frac{1.134A}{4}\mu^{-\frac{1}{4}}(1+a\mu^{-\frac{1}{4}})e^{-\frac{1}{\lambda^*(\mu)}}\left\{1+\frac{a\mu^{-\frac{1}{4}}}{1+a\mu^{-\frac{1}{4}}}-\frac{1}{(\lambda^*(\mu))^2}(\lambda_{ph}b\mu^{\frac{1}{4}}-\frac{\lambda_c b\mu^{\frac{1}{4}}}{U_c(\mu)}+\right.$$
$$\left.\frac{\lambda_c^2\left(1+a\mu^{\frac{1}{4}}\right)}{U^2{}_c(\mu)}[b\mu^{\frac{1}{4}}lnB_c(\mu)+\left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)(1+\frac{a\mu^{-\frac{1}{4}}}{1+a\mu^{-\frac{1}{4}}})])\right\}\frac{\delta\mu}{\mu} \qquad (C.2)$$

Для определения коэффициенты, соответствующие кислородным и медным изотопическим эффектам, выражение (3.8) запишем в виде

$$\alpha_{T^*}^{O} = -\frac{\delta T^*/T^*}{\delta M_O/M_O} \qquad (C.3)$$

$$\alpha_{T^*}^{Cu} = -\frac{\delta T^*/T^*}{\delta M_{Cu}/M_{Cu}}. \qquad (C.4)$$

$$\frac{\delta\mu}{\mu} = \frac{\delta(\frac{MM'}{M+M'})}{\frac{MM'}{M+M'}} = \frac{\frac{(M')^2}{(M+M')^2}\delta M}{\frac{MM'}{M+M'}} = \frac{M'\delta M}{M(M+M')} = \frac{1}{1+M/M'}\frac{\delta M}{M} \qquad (C.5)$$

и

$$\frac{\delta\mu}{\mu} = \frac{\delta(\frac{MM'}{M+M'})}{\frac{MM'}{M+M'}} = \frac{\frac{(M)^2}{(M+M')^2}\delta M'}{\frac{MM'}{M+M'}} = \frac{M\delta M'}{M'(M+M')} = \frac{1}{1+M'/M}\frac{\delta M'}{M'} \qquad (C.6)$$

Подставляя (C.5) и (C.6) в (C.2) с учетом (C.3) и (C.4), находим

$$\alpha_{T^*}^{O} = \frac{1}{4(1+M/M')}\left\{1 + \frac{a\mu^{-\frac{1}{4}}}{1+a\mu^{-\frac{1}{4}}} - \frac{1}{(\lambda^*(\mu))^2}(\lambda_{ph}b\mu^{\frac{1}{4}} - \frac{\lambda_c b\mu^{\frac{1}{4}}}{U_c(\mu)} + \frac{\lambda_c^2\left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)}{U^2{}_c(\mu)})[b\mu^{\frac{1}{4}}lnB_c(\mu) + \left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)(1+\frac{a\mu^{-\frac{1}{4}}}{1+a\mu^{-\frac{1}{4}}})]\right\}, \qquad (C.7)$$

и

$$\alpha_{T^*}^{Cu} = \frac{1}{4(1+M'/M)}\left\{1 + \frac{a\mu^{-\frac{1}{4}}}{1+a\mu^{-\frac{1}{4}}} - \frac{1}{(\lambda^*(\mu))^2}(\lambda_{ph}b\mu^{\frac{1}{4}} - \frac{\lambda_c b\mu^{\frac{1}{4}}}{U_c(\mu)} + \frac{\lambda_c^2\left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)}{U^2{}_c(\mu)})[b\mu^{\frac{1}{4}}lnB_c(\mu) + + \left(1+b\mu^{\frac{1}{4}}\right)(1+\frac{a\mu^{-\frac{1}{4}}}{1+a\mu^{-\frac{1}{4}}})]\right\}, \qquad (C.8)$$

где $M = M_O$, $M' = M_{Cu}$.

ПРИЛОЖЕНИЕ D

Изменение величины T_c при изотопическом замещении атомов основной решетки другими их изотопами определяется из выражения (3.19) как

$$\delta(k_B T_c) = k_B \delta T_c = 1.134\hbar(2\beta)^{1/2}\delta\left[\mu^{-\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{\lambda_{BCS}(\mu)}}\right] =$$
$$1.134\hbar(2\beta)^{1/2}\left[-\frac{1}{2}\mu^{-\frac{1}{2}-1}e^{-\frac{1}{\lambda_{BCS}(\mu)}}\delta\mu + \mu^{-\frac{1}{2}}\delta\left(e^{-\frac{1}{\lambda_{BCS}(\mu)}}\right)\right] =$$
$$1.134\hbar(2\beta)^{1/2}\left[-\frac{1}{2}\mu^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{1}{\lambda_{BCS}(\mu)}}\frac{\delta\mu}{\mu} + \frac{1}{2}\mu^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{\tilde{\lambda}_c(\mu)}{\lambda_{BCS}(\mu)}\right)^2 e^{-\frac{1}{\lambda_{BCS}(\mu)}}\frac{\delta\mu}{\mu}\right] =$$
$$\frac{1}{2}1.134\hbar\omega_0(\mu)[\left(\frac{\tilde{\lambda}_c(\mu)}{\lambda_{BCS}(\mu)}\right)^2 - 1]e^{-\frac{1}{\lambda_{BCS}(\mu)}}\frac{\delta\mu}{\mu} \qquad \text{(D.1)}$$

Для определения коэффициенты, соответствующих кислородным и медным изотопическим эффектам, выражение (3.8) запишем в виде

$$\alpha_{T_c}^{O} = -\frac{\delta T_c/T_c}{\delta M_O/M_O} \qquad \text{(D.2)}$$

и

$$\alpha_{T_c}^{Cu} = -\frac{\delta T_c/T_c}{\delta M_{Cu}/M_{Cu}} \qquad \text{(D.3)}$$

Далее при изотопических замещениях кислорода и меди в купратах выражения для $\delta\mu/\mu$ будут определены как

$$\frac{\delta\mu}{\mu} = \frac{\delta(\frac{M_O M_{Cu}}{M_O+M_{Cu}})}{\frac{M_O M_{Cu}}{M_O+M_{Cu}}} = \frac{\frac{M_{Cu}^2\delta M_O}{(M_O+M_{Cu})^2}}{\frac{M_O M_{Cu}}{M_O+M_{Cu}}} = \frac{M_{Cu}\delta M_O}{M_O(M_O+M_{Cu})} = \frac{1}{1+M_O/M_{Cu}}\frac{\delta M_O}{M_O} \qquad \text{(D.4)}$$

$$\frac{\delta\mu}{\mu} = \frac{\delta(\frac{M_O M_{Cu}}{M_O+M_{Cu}})}{\frac{M_O M_{Cu}}{M_O+M_{Cu}}} = \frac{\frac{M_O^2\delta M_{Cu}}{(M_O+M_{Cu})^2}}{\frac{M_O M_{Cu}}{M_O+M_{Cu}}} = \frac{M_O\delta M_{Cu}}{M_{Cu}(M_O+M_{Cu})} = \frac{1}{1+M_{Cu}/M_O}\frac{\delta M_{Cu}}{M_{Cu}} \qquad \text{(D.5)}$$

Подставляя (D.4) и (D.5) в (D.1) с учетом (D.2) и (D.3), находим

$$\alpha_{T_c}^{O} = \frac{1}{2(1+M_O/M_{Cu})}[1 - \left(\frac{\tilde{\lambda}_c(\mu)}{\lambda_{BCS}(\mu)}\right)^2] \qquad \text{(D.6)}$$

$$\alpha_{T_c}^{Cu} = \frac{1}{2(1+M_{Cu}/M_O)}[1 - \left(\frac{\tilde{\lambda}_c(\mu)}{\lambda_{BCS}(\mu)}\right)^2] \qquad \text{(D.7)}$$