АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

На правах рукописи УДК 537.312.62; 538.945

КУРБАНОВ УЛУГБЕК ТАЖИБАЕВИЧ

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

01.04.07 - физика конденсированного состояния

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

Научный консультант: Джуманов Сафарали

д.ф-м.н., профессор

СОДЕРЖАНИЕ

ОСНОВНЫЕ УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ	6
ВВЕДЕНИЕ	7
ГЛАВА І. МЕХАНИЗМЫ ЛОКАЛИЗАЦИИ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА И	23
МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК ПЕРЕХОДОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ	
§1.1. Локализованные и делокализованные состояния носителей тока в	23
кристаллических веществах	
§1.2. Образование энергетических зон электронов в кристаллических	25
твердых телах	
§1.3. Металлы, полупроводники и диэлектрики	27
§1.4. Атомные и электронные дефекты в твердых телах	32
§1.5. Локализованные водородоподобные примесные состояния в	33
легированных полупроводниках и диэлектриках	
§1.6. Различные типы металл диэлектрик переходов	36
§1.6.1. Металл диэлектрик переход по Вильсону	37
§1.6.2. Моттовский металл-диэлектрик переход	39
§1.6.3. Пайерлсовский и андерсоновский металл-диэлектрик переходы	48
§1.6.4. Купратные ВТСП-материалы и металл-диэлектрик переходы	53
§1.7. Цель и задачи исследования	56
ГЛАВА II. ОТЛИЧИТЕЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ	59
СТРУКТУР НЕЛЕГИРОВАННЫХ И ЛЕГИРОВАННЫХ	
КУПРАТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ	
§2.1. Электронная структура нелегированных купратов	59
§2.2. Основное состояния дырочных носителей в легированных	64
купратах	
§2.3. Применимости водородоподобной модели в легированных	68
купратных соединениях	
§2.4. Образование больших поляронов и биполяронов в легированных	72
купратах	

§2.5. Низкоэнергетические электронные структуры легированных	75
купратов и их экспериментальные подтверждения	
Выводы к главе II	78
ГЛАВА III. ПРИМЕНИМОСТИ МОТТОВСКОГО МЕТАЛЛ-	79
ДИЭЛЕКТРИК ПЕРЕХОДА К ЛЕГИРОВАННЫМ КУПРАТАМ	
§3.1. Образование энергетической зоны водородоподобных примесей в	80
дырочно-легированных купратах	
§3.2. Точный метод определения энергии кулоновского отталкивания	83
двух дырок локализованных на водородоподобном примесном центре	
§3.3. Новые и универсальные критерии моттовских металл-диэлектрик	85
переходов в легированных твердых телах	
§3.4. Применимости моттовского металл-диэлектрик перехода в	89
легированных купратах	
Выводы к главе III	93
ГЛАВА IV. НОВЫЕ МЕТАЛЛ- ДИЭЛЕКТРИК ПЕРЕХОДЫ И	95
НАНОМАСШТАБНЫЕ РАЗДЕЛЕНИЯ ФАЗ В ДЫРОЧНО-	
ЛЕГИРОВАННЫХ ВТСП – КУПРАТАХ	
§4.1. Локализации дырочных носителей в деформируемой решетки	96
легированных ВТСП-купратах	
§4.2. Возможные наномасштабные сверхструктурные упорядочения	98
поляронных носителей и образование поляронных зон в легированных	
ВТСП-купратах	
§4.3. Критерии новых металл-диэлектрик переходов в легированных	100
полярных материалах	
§4.4. Возможности новых металл-диэлектрик переходов и	101
наномасштабного разделения диэлектрических, металлических и	
сверхпроводящих фаз в легированных купратах	
Выводы к главе IV	107
ГЛАВА V. ВОЗМОЖНЫЕ ПРОЯВЛЕНИЯ МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК	

ПЕРЕХОДОВ И ЭФФЕКТЫ СОСУЩЕСТВОВАНИЯ	109
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ, МЕТАЛЛИЧЕСКИХ И	
СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ФАЗ В НОРМАЛЬНЫХ И	
СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВАХ СЛАБО ЛЕГИРОВАННЫХ И	
НЕДОЛЕГИРОВАННЫХ КУПРАТАХ	
§5.1. Проявление металл-диэлектрик переходов в температурной	110
зависимости магнитной восприимчивости слаболегированных купратов	
и недолегированных ВТСП-купратов	
§5.1.1. Температурная зависимость магнитной восприимчивости	111
слаболегированных купратов	
§5.1.2. Температурная зависимость магнитной восприимчивости	114
недолегированных ВТСП-купратов	
§5.1.3. Температурная зависимость магнитной восприимчивости в	119
оптимально легированных ВТСП-купратах	
§5.2. Проявление металл-диэлектрик переходов в температурной	121
зависимости удельного электрического сопротивления вдоль c -оси	
ВТСП-купратов	
§5.3. Проявление металл-диэлектрик переходов и сосуществующих	126
диэлектрических и сверхпроводящих фаз в подавлении	
сверхпроводимости недолегированных ВТСП-купратов	
Выводы к главе V	127
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	129
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ	133

ОСНОВНЫЕ УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

Купраты – медно-оксидные соединения СП – сверхпроводимость ВТСП – высокотемпературная сверхпроводимость LSCO- $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ YBCO – $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ g_s - константа связи короткодействующего электронфононного взаимодействия g_l - константа связи дальнодействующего электрон-фононного взаимодействия E_p — энергия большого полярона E_{B} — энергия образования большого биполярона E_{bB} — энергия связи большого биполярона ε_{∞} – высокочастотная диэлектрическая проницаемость ε_0 — статическая диэлектрическая проницаемость $\tilde{\varepsilon}$ - эффективная диэлектрическая проницаемость K – упругая постоянная решетки a_H – боровский радиус водородоподобного примесного центра m^* – эффективная масса свободного носителя заряда

 m_p – эффективная масса полярона E_d – деформационный потенциал носителя E_{dD} – деформационный потенциал дефекта E_F – энергия Ферми нелегированных купратов n_p — концентрация поляронов n_c — критическая концентрация носителей при котором происходит моттовский МДП x_c — критическое концентрация носителей или легирования (безразмерной единице) при котором происходит ионизации примесного центра E_c – энергия зоны проводимости E_I – энергия связи примесного центра U_d – энергия кулоновского отталкивания на одном и том же узле решетки $\chi(T)$ -температурная зависимость магнитной восприимчивости $\rho_c(T)$ - удельное сопротивление легированных ВТСП-материалов вдоль с-оси

ВВЕДЕНИЕ

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

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

В Республике Узбекистан большое внимание уделяется развитию полупроводникового и сверхпроводникового материаловедения. При этом особое внимание уделяется определению природы локализованных дырочных носителей тока и возможных механизмов металл-диэлектрик переходов и наномасштабного фаз разделения В легированных ВТСП-купратах. фундаментальных исследований, Направления ЭТИХ 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 выполняет Постановлениях Президента Республики предусмотренные В Узбекистан № УП-4947 от 7 февраля 2017 года «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан на 2017–2021-гг», №ПП-2772 февраля 2017 года «О приоритетных направлениях развития электротехнической промышленности в 2017–2021 годах», №ПП-2789 от 17 февраля 2017 года «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности организации, управления финансирования Академии наук, И исследовательской деятельности», а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере.

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

Обзор зарубежных научных исследований по теме диссертации. Научные исследования в области физики диэлектриков и высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) проводятся в научных центрах, институтах и

8

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.

университетах ведущих стран, в том числе в Лейденском университете (Нидерланды), Стенфордском университете (США), Аргоннской национальной лаборатории (США), Кембриджском университете (Англия), Токийском университете (Япония), Цюрихском университете (Швейцария), Лаборатории нейтронного рассеяния (Швейцария), Университете Хоккайдо (Япония), Принстонском университете (США), Макмастерском университете (Канада), Университете Жозеф-Фоурера (Франция), Брукхейвенской национальной лаборатории (США), Институте физики твердого тела имени Макса Планка (Германия), Лос-Аламосской национальной лаборатории (США), Китайском университете науки и технологии (Китай), Массачусетском технологическом институте (США), Институте теоретической физики имени Ландау (Россия), Физическом институте имени Лебедева (Россия), Институте физики твердого тела (Россия), Римском университете (Италия), Антверпенском университете (Бельгия), Университете Лафборо (Англия), Неапольском университете (Италия), Институте теоретической физики (Китай), Токийском научном университете (Япония), Физико-техническом институте низких температур им. Институте физики (Эстония), Б.И. Веркина (Украина), Актюбинском государственном университете (Казахстан), Институте физико-технических проблем и материаловедения (Киргизия).

В результате проводимых в мире исследований электронных свойств дырочно-легированных получен купратов ряд интересных научных результатов, в частности предложены идея о сегрегации и разделении электронных фаз в ВТСП-материалах (Институт теоретической физики имени Ландау, Россия); различные теоретические модели разделения фаз в виде чередующихся полос упорядоченных спинов и носителей зарядов недолегированных ВТСП-купратах (Лейденский университет, Нидерланды; Брукхейвенская национальная лаборатория, США; Римский университет, Италия); обнаружены полосатые фазы упорядоченных спинов и носителей зарядов в недолегированных ВТСП-купратах (Брукхейвенская национальная лаборатория, США); определены характерные диэлектрические поведения удельного сопротивления ВТСП-купратов вдоль CuO_2 слоев (т. е. ab-плоскости) и вдоль оси c, обусловленные явлением локализации носителей тока в недолегированных и оптимально легированных режимах, а также определены тенденции постепенного изменения их диэлектрического поведения, связанные с диэлектрик-металл переходами и делокализацией носителей тока (Лослаборатория, США; Токийский Аламосская национальная научный университет, Япония; Институт физики твердого тела, Россия; Международный технологический центр сверхпроводимости, Япония); получены аналогичные и довольно интересные экспериментальные данные, согласно которым температурные зависимости магнитной восприимчивости, свидетельствующие также о металл-диэлектрик переходах в недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратах, оказались неожиданными и необычными по восприимчивостью обычных сравнению магнитной металлов (Государственный университет Айовы, США; Университет Хоккайдо, Япония; Кембриджский университет, Англия); получена ценная информация подавлении сверхпроводимости и сосуществовании сверхпроводимости и эффектах локализации носителей тока при переходе OT оптимально легированного К недолегированному режиму ВТСП-купратах (Брукхейвенская национальная лаборатория, США; Университет Тохоку, Япония).

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

псевдощелей в этих материалах, определение возможных эффектов локализации носителей тока, металл-диэлектрик переходов и наномасштабного разделения фаз, различных псевдощелей и других электронных процессов на нормальные и сверхпроводящие свойства дырочно-легированных ВТСП-купратов.

Степень изученности проблемы. Вопросы о локализации носителей тока металл-диэлектрик переходов В различных классах твердых тел исследовались многими известными учеными, в том числе российскими (Л.Д. Ландау, С.И. Пекар), германскими (Г. Фрелих), английскими (Р. Пайерлс, Н.Ф. Мотт, А. Вильсон, Дж. Хаббард, Д.М. Эглес,), японскими (Ю. Тойазова), американскими (Р. Фейнман, Т. Холстейн, Ф.В. Андерсон, Ж. Девреес, Д. Эмин) учеными в течение многих десятилетий. Эти проблемы восходят еще к 1933 году, когда Ландау, объясняя свойства F-центров (анионная вакансия с захваченным электроном) в щелочно-галоидных кристаллах, выдвинул идею об автолокализации электрона и к 1931–1958 годам, когда А. Вильсон, Н.Ф. Мотт, Ф. Вигнер, Р. Пайерлс и Ф.В. Андерсон пытались объяснить изменение делокализованного состояния электронов в локализованное, выдвинули идеи о металл-диэлектрик переходах при перекрывании полностью заполненной валентной зоны с вышележащей незаполненной зоной (переход Вильсона), сильной электронной корреляции (т. е. при кулоновском отталкивании двух электронов, находящихся в одном и том же атоме или ионе кристаллической решетке) (переход Мотта), кристаллизации электронного газа (переход Вигнера), искажении одномерной кристаллической решетки и удвоении периода решетки (переход Пайерлса) и неупорядоченности решетки (переход Андерсона).

Последующие годы эти ранние идеи были использованы и развиты при изучении явлений локализации и делокализации носителей тока и металл-диэлектрик переходов в различных классах твердых тел, в частности в оксидных материалах и легированных полупроводниках. При этом идеи моттовского и андерсоновского металл-диэлектрик переходов получили

значительное развитие в исследованиях, проводимых за рубежом в области физики оксидных диэлектриков и легированных полупроводников (Дж. Хаббард, О. Маделунг, М.И. Клингер, Дж.Р. Куллен, Э.Р. Каллен, Дж. Канамор, Я. Заанен, Г.А. Савацский, Дж.В. Аллен, Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос, Г. Котлиар, В. Добросавлжевик). После открытия новых легированных меднооксидных (купратных) ВТСП проводятся исследования по проблемам локализации носителей тока и металл-диэлектрик переходов в этих сложных материалах с применением различных методов и подходов (М. Имада, П. Клемериал, Дж. Финк, А.Н. Лавров, В.Ф. Гантмахер, Г.С. Боебингер, Я. Эндо, С. Кастэллени, П.А. Магетты, Ж.Б. Су, Ю Ли, С. Оно).

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

Связь темы диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертация. Диссертационная работа выполнена в рамках научно-исследовательских проектов Института ядерной физики по темам ФА-Ф2-Ф075+Ф070 «Исследования специфических электрических, тепловых и механических свойств реакторных материалов и высокотемпературных сверхпроводников» (2007–2011); Ф2-ФА-Ф120 «Электронные свойства и радиационная модификация низкоразмерных высокотемпературных

сверхпроводников, полупроводниковых гетероструктур, металлов ИХ оксидов» (2012–2016); OT-Φ2-15 «Теоретические исследования новых сверхпроводящих сверхтекучих свойств высокотемпературных И сверхпроводников и родственных конденсированных систем» (2017–2021).

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

Для достижения поставленной цели сформулированы следующие задачи исследования:

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

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

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

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

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

определить возможности проявления металл-диэлектрик переходов и наномасштабных разделений диэлектрических и металлических поведениях необычных магнитной восприимчивости И электрического T_c сопротивления выше высокотемпературной И В механизмах

сверхпроводимости недолегированных купратов.

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

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

Методы исследований. Вариационные методы, использование адиабатического приближения и континуальной модели собственной и несобственной автолокализации носителей, метод сильной связи, компьютерная графика (Mathematica).

Научная новизна диссертационного исследования заключается в следующем:

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

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

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

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

слаболегированных купратах, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратах;

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

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

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

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

Практические результаты исследования заключаются в следующем:

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

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

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

Достоверность результатов исследования подтверждается применением апробированных математических методов и теоретических подходов, таких как вариационные методы и методы сильной связи, континуальная модель твердого

тела для описания автолокализации носителей возле примесей и в деформируемой решетке, модель Мотта—Хаббарда, позволяющая описать эффекты сильной электронной корреляции в узких примесных зонах, а также совпадением полученных результатов с существующими экспериментальными данными.

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

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

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

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

разработанные адекватные количественные теории моттовских и новых металл-диэлектрик переходов в слабо легированных купратах и ВТСПшироком интервале легирования были использованы выполнении научно-исследовательских работ в рамках государственного заказа по бюджетной программе по темам № 0113PK00953 «Разработка технологии управления физическими свойствами щелочногалоидных и сверхпроводящих материалов при понижении симметрии решетки» (2012-2017) и № 0115PK01111 «Технология управления механизмом трансформации энергии ионизирующей радиации щелочногалоидных кристаллах-сцинтилляторах» (2012-2017)(Письмо Актюбинского регионального государственного университета им. К. Жубанова № 21-13/569 от 15.02.2019). Использование новых теоретических результатов позволило объяснить различные электронные процессы, протекающие сверхпроводящих материалах, В имеющих пониженную симметрию решетки;

металл-диэлектрик предложенные механизмы новых переходов И микроскопические механизмы наномасштабного разделения диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в слабо легированных купратах, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратах, а также выявленная возможность сосуществования конкурирующих диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в легированных купратных материалах были использованы рамках научно-исследовательского $N_{\underline{0}}$ проекта 0115РК02715 «Разработка новых углеродных наноматериалов широкого применения» при изучении необычных электронных материалов (Письмо Казахского нанокомпозитных национального университета имени аль-Фараби № 19-9-396 от 12.02.2019). Использование новых научных результатов позволило объяснить физические процессы, протекающие в композитных материалах при диэлектрик-металл и металлуглерод переходах, а также при разработке и исследовании наноматериалов;

результаты теоретических исследований по влиянию металл-диэлектрик переходов и различных псевдощелей на температурные зависимости магнитной

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

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 7 международных и 3 республиканских научно-практических конференциях.

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

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

Список опубликованных работ:

- 1. Джуманов С., Ганиев О.К., Джуманов Ш.С., Курбанов У.Т. Роль поляронных эффектов в необычных туннельных спектрах ВТСП купратов// Доклады Академии наук Республики Узбекистан.— Ташкент, 2013.— № 1.— С.30–33 (01.00.00. №7).
- 2. Dzhumanov S., Karimboev E.X., Kurbanov U.T., Ganiev O.K., Djumanov Sh.S. Temperature-independent pseudogap and thermally activated *c*-axis hopping conductivity in layered cuprate superconductors// Superlattices and

- Microstructures.- Elsevier: Holland, 2014.- vol.68.-pp.6-15 (N_2 39. Impact Factor Search; IF = 2.099).
- 3. Dzhumanov S., Karimboev E.X., Kurbanov U.T., Ganiev O.K., Djumanov Sh.S., Khudayberdiev Z.S. Nanoscale phase separation and thermally activated *c*-axis hopping conductivity in layered cuprate superconductors// Uzbek Journal of Physics. -Ташкент, 2014.- Vol.16, №3.-C.187-196 (01.00.00. №5).
- 4. Dzhumanov S., Kurbanov U. The new metal-insulator transitions and nanoscale phase separation in doped cuprates// Superlattices and Microstructures.- Elsevier: Holland, 2015.- V. 84.-pp.66-71 (№ 39. Impact Factor Search; IF = 2.099).
- 5. Джуманов С., Курбанов У., Худайбердиев З.С., Хафизов А. Металл-диэлектрик переходы и магнитная восприимчивость в легированных купратных соединениях// Физика низких температур.— Харьков, 2016.—Т. 42, No 11.—С.1345—1353; Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Hafizov A. Metal-insulator transitions and magnetic susceptibility in doped cuprate compounds// Low Temperature Physics.-American Institute of Physics (USA), 2016.- V.42, №11.-pp.1057-1062 (№ 39. Impact Factor Search; IF = 0.86).
- 6. Явидов Б.Я., Курбанов У.Т., Джуманов С., Каримбаев Э.Х. Влияние одноосного напряжения на температуру Бозе–Эйнштейновской конденсации биполяронных носителей в слоистых ВТСП-купратах// Доклады Академии наук Республики Узбекистан.—Ташкент, 2016.— №3.— С.18–21 (01.00.00. №7).
- 7. Джуманов С., Курбанов У.Т., Явидов Б.Я. Механизмы локализации носителей заряда и магнитная восприимчивость в легированных купратах// Доклады Академии наук Республики Узбекистан.—Ташкент, 2017.— №3.—С. 23–26 (01.00.00. №7).
- 8. Dzhumanov S., Kurbanov U. Metal-insulator transitions in cuprate high-temperature superconductors// Eurasian Physical Technical Journal.- Karaganda, 2017.- Vol.14, No.1 (27).-pp. 49-55.

- 9. Dzhumanov S., Kurbanov U.T. The coexistence of insulating and metallic/superconducting phases and their competing effects in various underdoped cuprates// Modern Physics Letters B.- World Scientific (Singapore), 2018.-vol.32, No 26.-id.1850312.-10 p (№ 39. Impact Factor Search; IF = 0.731).
- 10. Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Rashidov J.Sh. Coexisting insulating and metallic/superconducting phases and their role in normal state properties of underdoped cuprates// Доклады Академии наук Республики Узбекистан.- Ташкент, 2018.- №3.-С.22-27 (01.00.00. №7).
- 11. Dzhumanov S., Kurbanov U.T. Metal-insulator transitions and nanoscale phase separation in various underdoped cuprates// Eurasian Journal of Physics and Functional Materials.- Astana, 2018.- vol.2, No.3.-pp.219-230.
- 12. С. Джуманов, У.Т. Курбанов, З.С. Худайбердиев. Возможные металлдиэлектрик переходы и наноразмерное разделение фаз в дырочнолегированных купратах// Доклады Академии наук Республики Узбекистан.-Ташкент, 2018.- №6.-С.14-20 (01.00.00. №7).
- 13. Dzhumanov S., Khidirov I., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Rashidov J.Sh. Distinctive features of metal-insulator transitions, multiscale phase separation, and related effects in hole-doped cuprates// Ukrainian Journal of Physics.-Kyiv, 2019.-vol.64, No.4.-P. 322-335. (№ 39. Impact Factor Search; IF = 0.51).
- 14. Dzhumanov S., Ganiev O.K., Khudayberdiev Z.S., Kurbanov U.T. Carrier localization, metal-insulator transitions and stripe formation in inhomogeneous hole-doped cuprates//«Fundamental and applied questions of physics»: Book of Abstracts of the conference, dedicated to 80th anniversary of academician M.S. Saidov 24-25 November, 2010.- Tashkent- 2010.- pp. 337-339.
- 15. Dzhumanov S., Ganiev O.K., Khudayberdiev Z.S., Karimboev E.X., Kurbanov U.T. Metal-insulator transitions and stripe formation in cuprates//"Nuclear Science and Its Applications": Book of Abstracts of the International Conference September 25-28, 2012. Samarkand, 2012.- p.282.
- 16. Dzhumanov S., Ganiev O.K., Djumanov Sh.S., Kurbanov U.T., Karimboev E.X., Khudayberdiev Z.S. Normal-state charge transport properties of high- T_c

- cuprates//"Physics and Ecology": Book of Abstracts of the Republican scientific-practical conference 11-12 December 2013.- Nukus, 2013. -p.26-27.
- 17. Kurbanov U.T., Ganiev O.K. Carrier localization and Mott metal—insulator transitions in hole-doped cuprates// Сборник тезисов докладов Республиканской научно-практической конференции молодых ученых посвященной 70-летию Академии наук Республики Узбекистан, 26 Декабря 2013.- Ташкент, 2013.- С.116.
- 18. Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S. Metal-insulator transitions in doped high temperature cuprate superconductors//«Nuclear Science and its Application»: Book of Abstracts of the VII Eurasian Conference October 21-24, 2014.- Baku, 2014.- pp.255-256.
- 19. Курбанов У., Худайбердиев З.С., Каримбаев Э., Джуманов С. Возможные металл-диэлектрик переходы и наноразмерное разделение фаз в дырочно-легированных купратах//«Современные материалы и технологии»: Сборник докладов Международной конференции 21–23 Октября, 2015.—Тбилиси, 2015.—С.195–199.
- 20. Dzhumanov S., Kurbanov U.T. Possible mechanisms of carrier localization and metal–insulator transitions in hole-doped cuprates//"Nuclear and radiationphysics": Reports of the 10th International conference September 8-11, 2015. Kurchatov, 2016. p. 129-134.
- 21. Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Imamberdiyev S.S. The metal-insulator transitions and nanoscale phase separation and their manifestations inelectronic properties of doped high- T_c cuprate superconductors// Хозирги замон аник ва техник фанлар муаммолари ва уларнинг ечимлари-Республика илмийназарий анжуман Материаллари II бўлим, Нукус, 2017й.-6.42-43.
- 22. Dzhumanov S., Kurbanov U.T. The metal-insulator transitions and nanoscale phase separation and their manifestations in electronic properties of doped high- T_c cuprate superconductors//«Nuclear Science and Technologies»: Book of Abstracts of the International Scientific Forum dedicated t the 60th anniversary of the Institute of Nuclear Physics, September 12-15, 2017.- Almaty, 2017.- pp.215.

- 23. Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Rashidov J.Sh. The coexisting insulating and metallic/superconducting phases and their manifestations in various underdoped cuprates//Book of Abstracts of the Seventh International Conference on Physical Electronics IPEC-7 May 18-19, 2018.-Tashkent, 2018.-pp. 129.
- 24. Джуманов С., Курбанов У.Т. Сосуществующие диэлектрические и металлические/сверхпроводящие фазы и их конкурирующие эффекты в различных недолегированных купратах//Физика твердого тела, Функциональные материалы и новые технологии (ФТТ-2018): Материалы XIV Международной научной конференции, посвященной 80-летию основателя конференции профессора Т.А. Кукетаева, 1–4 августа 2018 г.– Бишкек–Караганда, 2018.– С.42–45.
- 25. Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Rashidov J.Sh. Nanoscale phase separation and coexisting insulating, metallic and superconducting phases in underdoped cuprates// Materials and Mechamisms of superconductivity and high temperature superconductors-Book of Abstracts of the 12th International Conference August 19-24, 2018. -Beijing, China, 2018.-pp. 717.

ГЛАВА І. МЕХАНИЗМЫ ЛОКАЛИЗАЦИИ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА И МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК ПЕРЕХОДОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

§1.1 Локализованные и делокализованные состояния носителей тока в кристаллических веществах

В настоящее время область физики твердого тела разрослась настолько, что должна быть единая и наглядная форма описания многих электронных процессов в твердых телах, которая облегчает их понимание. В этой связи предпринята попытка развить основы теории твердого тела, исходя из единой унифицированной точки зрения описания посредством концепций локализованных И делокализованных состояний носителей тока (T.e. заряженных квазичастиц – электронов или дырок) [1;с.184]. Состояния электронов и дырок, простирающихся по всему твердому телу, называются их делокализованными (или свободными) состояниями, которые описываются в зонной модели этих квазичастиц, имеющих хорошо определенные волновые векторы (т.е. квазиимпульсы). В рамках описания зонной модели коллективные свойства решетки включены в характеристики электронной или дырочной квазичастицы. В зонной модели переходы электрона или дырки из одного делокализованного состояния в другое происходят с изменением энергии и волнового вектора этой квазичастицы. В противоположность этому при локализованном описании явлений переноса в твердом теле электрон или дырка переходят из одного локализованного состояния на одном атоме или ионе или на одном примесном (дефектном) центре в другое локализованное состояние. В идеальной бесконечной решетке локальное описание состояния носителей тока становится важным тогда, когда приближения зонной модели (пренебрежение сильным электрон-электронным и электрон-фононным взаимодействиями) нарушаются [1;с.184].

В частности, искаженные области кристаллической решетки и точечные дефекты этой решетки (т.е. примесные ионы и вакансии анионов или катионов) обладают истинно локализованными состояниями, на которые могут быть захвачены электроны или дырки [1;c.184. 2;c.13-204. 3;c.792. 4;c.264. 5;c.640. 6;с.304. 7;с.1-23. 8;с.368. 9;с.365]. Локализованные состояния электронов и являются бестоковыми И определяют неметаллическое (T.e. дырок полупроводниковое и диэлектрическое) поведение твердых тел. При описании делокализованных состояний носителей тока в простой (одноэлектронной) зонной модели сделаны следующие предположения: все валентные электроны являются квазисвободными, так что модель почти свободных электронов пренебрегала и взаимодействием электронов с атомами решетки, и их взаимодействием друг с другом. Оба эти предположения, лежащие в основе зонной модели, приводят во многих случаях к серьезным ошибкам в основном вопросе о критерии металл-диэлектрик перехода [10;с.342. 11;с.336]. Каждый свободный электрон в обычной зонной модели описывали волновой функцией, которая имеет следующий вид

$$\psi_{\vec{k}} = \Omega^{-1/2} exp\left(i\vec{k}\vec{r}\right),\tag{1.1}$$

где Ω - объем кристалл, \vec{k} -волновой вектор, описывающий импульс электрона, \vec{r} - радиус вектор электрона.

Движение электрона с массой m_e в идеальном кристалле (где влиянием фононов пренебрегается) описывается уравнением Шредингера

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - V(|\vec{r}|)] \psi(\vec{r}) = 0$$
 (1.2)

с периодической потенциальной энергией $V(|\vec{r}|)$.

Согласно теореме Блоха волновые функции, являющиеся решениями уравнения Шредингера (1.2) с периодическим потенциалом, имеющим период

решетки, представляют собой плоские волны $exp\left[i\vec{k}\vec{r}\right]$, модулированные некоторой функцией $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ с периодом решетки, т.е. волновые функции Блоха (плоские волны Блоха) имеют вид

$$\psi_{\vec{k}} = u_{\vec{k}}(\vec{r}) exp\left(i\vec{k}\vec{r}\right),\tag{1.3}$$

Таким волновые функции Блоха образом, описывают движение делокализованного носителя тока (электрона или дырки), соответствующие значения энергии которых E(k) образуют разрешенные энергетические зоны энергетического кристалла (T.e. зонные структуры спектра делокализованного носителя в кристалле) [1;с.184. 3;с.792. 5;с.640. 10;с.342. 11;c.336. 12;c.384].

§1.2. Образование энергетических зон электронов в кристаллических твердых телах

Теория энергетических зон электронов является основой для научного объяснения электрических, магнитных и других электронных свойств твердых тел [3;с.792. 5;с.640. 10;с.342. 11;с.336. 12;с.384. 13;с.574]. Энергетические зоны электронов позволяют классифицировать твердые тела с точки их электрических свойств. Эта классификация делит твердые тела на металлы (хорошие проводники), полупроводники (плохие проводники), диэлектрики (непроводники) и основана на двух фундаментальных понятиях (концепциях), касающихся энергетических зон электронов или дырок [13;с.574]: 1): понятии неразрешенных (запрещенных) зон, разделяющих различные разрешенные энергетические зоны электронов и 2) понятии заселенности или степени заполнения разрешенных энергетических зон электронами. Образование разрешенных и запрещенных зон электронов в кристаллических твердых телах показано на рис.1.1.

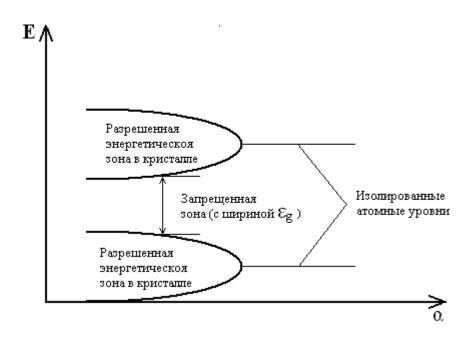


Рис.1.1. Расщепление дискретных атомных уровней в зоны при различных межатомных расстояниях a в кристалле

В изолированном атоме энергетические уровни заполнены вплоть до некоторой энергии, а все более высокие уровни энергии пусты. При образовании кристалла из N атомов в результате их сближения до определенного расстояния (равной постоянной решетки a_0) изолированные (Nкратно вырожденные электронные) уровни атомов образуют соответствующие энергетические зоны из-за снятия вырождения энергетических уровней электронов. Сближение атомов включает взаимодействие между ними и снимает вырождение электронных уровней. При ограниченном содержащихся кристалле, будут заполнены электронов, В некоторые электронами, низколежащие энергетические зоны более высокие энергетические зоны будут свободны. При этом, наибольший интерес представляют две соседние энергетические зоны, одна из которых является заполненных (она называется валентной зоной, и наивысшей из максимальная энергия обозначается как E_{ν}), а другая — наименьшей из пустых (она называется зоной проводимости, и ее минимальная энергия обозначается как E_c). Разность $E_g = E_c$ - E_v называется шириной запрещенной зоны или 26

энергетической щелью E_g , разделяющей зону проводимости от валентной зоны [12;c.384. 13;c.574].

Если теперь увеличим расстояние между атомами (т.е. постоянную решетки), одновременно, сохраняя кристаллическую структуру, то результатом будет уменьшение ширины валентной зоны. Если увеличить постоянную решетки до такой величины $(a_0 \rightarrow \infty)$, что взаимодействия между атомами решетки будут отсутствовать, энергетическая зона электронов сведется к дискретным уровням изолированных атомов. В этом предельном случае изолированных атомов каждый атом становится нейтральным, т.е. он имеет вблизи себя локализованные валентные электроны. Электрическая проводимость, связанная с зонным движением электронов теперь невозможна, так как валентные электроны сильно связаны со своими атомами и неподвижны. Каждый энергетический уровень системы N удаленных атомов $(a_0 \to \infty)$ становится *N*− кратно вырожденным. Когда эти атомы образуют сближении, вырожденный при ИХ энергетический кристалл расщепляется на огромное число уровней и вместо одного N-кратно вырожденного уровня возникает громадное количество их, образующих энергетическую зону. Вышеизложенные наглядно поясняет, как из отдельных уровней изолированных атомов возникает одноэлектронная зонная структура энергии кристаллических твердых тел, которая позволяет делить их на металлы, полупроводники и диэлектрики [1;c.184. 12;c.384. 13;c.574].

§1.3. Металлы, полупроводники и диэлектрики

Взаимодействие атомов, которые образуют кристалл, при их сближении проявляется, в основном, на электронах внешних оболочек, волновые функции которых сильно перекрываются. Однако, на внутренних электронах, волновые функции которых почти не перекрываются или очень слабо перекрываются, это взаимодействие сказывается гораздо слабее. Поэтому глубоко расположенные электронные уровни порождают значительно более широкие энергетические

зоны (т.е. широкие валентные зоны), в которых при определенных условиях электроны являются делокализованными и ответственными за проводимость электрического тока. Все кристаллические твердые тела разделяются на металлы, полупроводники и диэлектрики.

Твердые тела являются металлами, только если некоторые ИΧ высоколежащие энергетические зоны (T.e. валентные зоны зоны проводимости) частично заполнены электронами. В обычных металлах валентная зона заполнена электронами целиком, а зона проводимости заполнена лишь частично. Под действием внешнего электрического поля занимающие уровни вблизи границы электроны, заполнения, переходить на более высокие свободные уровни той же зоны и будут давать электрического Согласно проводимость тока. (одноэлектронной) зонной теории твердых тел, металлом должен быть любой кристалл, содержащий нечетное число электронов на элементарную ячейку. Для примера рассмотрим атомы натрия. Каждый атом натрия содержит 11 электронов, распределенных по электронным уровням следующим образом: $1s^22s^22p^23s^1$. При объединении N атомов натрия в кристалл их энергетические уровни превращаются в зоны. Зона проводимости образована из 3s состояний электронов и в ней имеется всего 2N электронных состояния, на которые приходится N атомов (по одному валентному электрону на атом). Поэтому, в кристаллическом натрии зона проводимости заполнена только наполовину. Аналогичным образом заполняются зоны проводимости и у других щелочных металлов [3;с.792. 5;с.640. 11;с.336. 12;с.384. 13;с.574. 14;с.426. 15;с.155-160. 16;c.296].

Твердые тела, у которых энергетическая щель E_g между последней заполненной зоной (валентной зоной) и первой незаполненной зоной (зоной проводимости) не более $1\div 2$ эВ, называются полупроводниками, а при $E_g \gtrsim 2$ эВ – диэлектриками [11;c.336]. В диэлектрике валентная зона целиком заполнена электронами, а лежащая выше зона проводимости, отделенная от нее

энергетической щелью $E_g>2$ эВ, совсем не содержит электронов. По этой причине диэлектрик не проводит электрический ток.

В полупроводниках, как и в диэлектриках, валентная зона полностью заполнена электронами, a зона проводимости полностью свободна. Энергетическая щель E_g между этими зонами в полупроводниках значительно меньше, чем в диэлектриках. Схема энергетических зон, принятая для металлов, полупроводников и диэлектриков, показана на рисунке 1.2. Если температура кристалла отлична от абсолютного нуля, то электрон в валентной зоне может получить энергии от кристаллической решетки её колебательной энергии порядка k_BT и перейти в зону проводимости. При этом число электронных носителей тока в зоне проводимости полупроводника будет пропорциональным $exp(E_g/k_BT)$ [13;c.574], и кристаллический полупроводник приобретает способность проводить электрический ток. При тепловом возбуждении электронов из валентной зоны в зону проводимости диэлектрика, число электронов в зоне проводимости будет очень малым [12;с.384; 16;с.296. 17;c.613304. 18;c.616. 19;c.584].

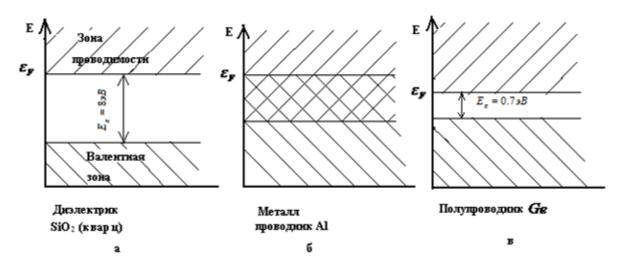


Рис.1.2. Схема заполнения зон в диэлектриках и полупроводниках (а), металлах (б) и полуметаллах (в); ε_F - уровень Ферми

Существуют следующие два основных различия между металлами и полупроводниками:

1. При высоких температурах полупроводники хорошо проводят электрический ток, тогда как с понижением температуры их проводимость падает до нуля. В отличие от полупроводников, металлы являются хорошими проводниками как при низких, так и при высоких температурах, причем их проводимость $\sigma(T)$ быстро возрастает, когда температура стремится к нулю. На рисунке 1.3 показан схематически ход температурных зависимостей удельного сопротивления $\rho(T)=1/\sigma(T)$ для металла и полупроводника/диэлектрика.

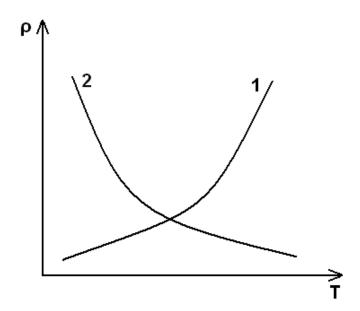
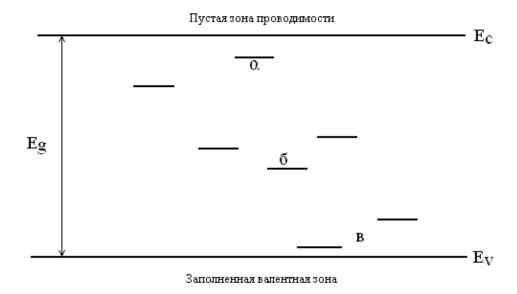


Рис.1.3. Схематический вид температурной зависимости удельного сопротивления 1- металлов, 2- полупроводников/диэлектриков

Дефекты, такие как примеси, могут либо также отдавать электроны в зону проводимости (доноры), либо забирать электроны из валентной зоны (акцепторы), оставляя в ней дырки (незаполненные состояния), которые являются носителями тока. Уровни таких примесей обычно возникают в запрещенной зоне, как показано на рисунке 1.4.



a- мелкие донорные уровни; δ - глубокие уровни; ϵ - мелкие акцепторные уровни.

Рис.1.4. Локализованные уровни, введенные точечными дефектами в запрещенную зону, находящуюся между верхом валентной зоны (E_{ν}) и дном зоны проводимости (E_c)

Введение примеси в кристаллическую решетку обычно проводимость полупроводников, но снижает проводимость металлов. Примеси, малых количествах, сильно повышают лаже при проводимость полупроводника/диэлектрика. Примесные уровни часто расположены вблизи зоны проводимости. Тогда создается возможность для перехода электронов и дырок с таких примесных уровней соответственно в зону проводимости и валентную зону. В результате проводимость полупроводника возрастает с повышением температуры [12;с.384; 16;с.296. 18;с.616. 19;с.584].

2. Поведения металлов существенно отличаются от поведения полупроводников и диэлектриков. Так как концентрация электронов в металлах практически не зависит от температуры, и поэтому проводимость металлов, в основном, определяется длиной свободного пробега электронов. С увеличением концентрации примесей в кристаллической решетке металлов длина свободного пробега электронов уменьшается. В отсутствии примесей и других дефектов, электроны двигались бы в идеальной кристаллической

решетке металлов без затухания и рассеяния на дефектах. Проводимость таких бездефектных металлов была бы бесконечно велика. Однако, в реальных кристаллах свободный пробег электрона ограничен тепловыми колебаниями и дефектами кристаллической решетки, которые возрастают с повышением Поэтому, температуры. проводимость металлов будет уменьшаться увеличением температуры и концентрации дефектов решетки [3;с.792. 11;с.336. 12;с.384. 14;с.426]. С увеличением концентрации примесей в кристаллической решетке полупроводников/диэлектриков, энергетические уровни примесей, возникающие в запрещенной зоне, превращаются в примесные зоны. В этом случае движения делокализованных электронов/дырок в примесных зонах приводят также к сильному повышению электрической проводимости полупроводника и диэлектрика, которые проявляют необычное металлическое поведение.

§1.4. Атомные и электронные дефекты в твердых телах

Твердые тела часто содержат различные атомные и электронные дефекты, такие как вакансии, автолокализованные дырки (дырочные поляроны), примеси замещения и различные дефектные центры (F-центр, V_k -центр и др.) [3;с.792. 4;с.264]. Эти атомные и электронные дефекты оказывают существенное, порой определяющее влияние на различные электронные свойства твердых тел. Характер влияния различных типов дефектов кристаллической решетки на физические свойства твердых тел зависит от природы этих дефектов.

В частности, проводимость и сверхпроводимость некоторых полупроводников и диэлектриков зависят от концентрации легируемых примесей. Люминесценция ионных кристаллов также связана с присутствием в них различных примесей. В зависимости от концентрации примесей твердые тела могут вести себя как полупроводники, диэлектрики, металлы или сверхпроводники [13;с.574. 15;с.155-160. 16;с.296]. Это относится также к легированным ВТСП- купратам [9;с.365. 15;с.155-160].

Полное и адекватное описание процессов локализации и делокализации носителей тока возможно только при учете всех видов взаимодействия этих носителей с колебаниями кристаллической решетки и дефектами [5;c.640.6;c.304.7;c.1-23.9;c.365].

Стандартная одноэлектронная зонная теория, которая опирается на идеи независимости движения электронов и адиабатического приближения сумела объяснить свойства многих веществ. Однако оказалось, существует ряд веществ, свойства которых не могут быть объяснены в рамках стандартной одноэлектронной зонной теории. К этой группе материалов позднее присоединились, так называемые, легированные купраты — ВТСП-материалы. Как выше было сказано, примесные уровни возникают в запрещенной зоне полупроводников и диэлектриков.

§1.5. Локализованные водородоподобные примесные состояния в легированных полупроводниках и диэлектриках

Введение различных примесей В кристаллическую решетку полупроводников И диэлектриков создает локализованные примесные запрещенной материалов. состояния зоне ЭТИХ При достаточной легирующих примесей волновые функции электронных и дырочных носителей тока, локализованные на этих примесных центрах, начинают перекрываться, и это приводит к образованию примесных зон в запрещенной зоне полупроводника/диэлектрика. Образование таких зон существенно меняет электронные свойства этих материалов, и часто приводит к переходу металл-диэлектрик. Поэтому изучение локализации носителей заряда возле различных примесей в связи с возможностью металлдиэлектрик переходов в легированных материалах представляет значительный интерес.

Здесь для примера рассмотрим простую водородоподобную модель с целью изучения локализации электронного носителя возле примеси, например,

мышьяка, введенной в кремний. Если предположить, что в одном из узлов кристаллической решетки кремния находится атом мышьяка (As) имеющий пять электронов в валентной оболочке, тогда четыре валентных электрона мышьяка участвуют в образовании ковалентных связей с четырьмя соседними атомами кремния. Тогда как пятый электрон, не участвующий в образовании ковалентной связи, слабо взаимодействует с большим числом окружающих атомов кремния Si. Поскольку этот электрон движется не только в кулоновском поле иона мышьяка, но и периодическом поле кристаллической решетки, он должен иметь некоторую эффективную массу m^* . Далее, взаимодействие электрона с ионом мышьяка As^+ , имеющим заряд Ze, происходит в твердом теле, обладающем диэлектрической проницаемостью ε [12;c.384. 14;c.426. 16;c.296. 17;c.613304. 18;c.616. 19;c.584].

Тогда с учетом этого, потенциальную энергию электрона, не участвующего в образовании валентных связей в Si, можно написать в виде

$$V(|\vec{r}|) = \frac{Ze^2}{\varepsilon|\vec{r}|} \tag{1.4}$$

Неспаренный электрон создаст примесный уровень в запрещенной зоне полупроводника. По аналогии с решением уравнения Шредингера для атома водорода можно определить собственное значение энергии этого электрона E_n из следующего уравнения Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta - \frac{Ze^2}{\varepsilon |\vec{r}|} \right] \psi(\vec{r}) = E_n \psi(\vec{r}), \tag{1.5}$$

где $\psi(\vec{r})$ - волновая функция электрона.

При этом энергии водородоподобного донорного примесного центра, определяемые из уравнения (1.5) при Z=1 будут равны

$$E_n = E_c - \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2 n^2} = E_c - \frac{m_e e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2} \left(\frac{m^*}{m_e}\right) \frac{1}{n^2}$$
 (1.6)

Здесь энергия отсчитывается от дна зоны проводимости E_c , m_e -масса свободного электрона, n=1,2,3,... - есть главное квантовое число. Если в (1.6) подставить числовые значения параметров m_e , e, \hbar , то получаем

$$E_n = E_c - \frac{13.52}{\varepsilon^2} \left(\frac{m^*}{m_e} \right) \frac{1}{n^2} \tag{1.7}$$

где величина 13.52 представляет собой энергию ионизации атома водорода (в $_{9}B$). Энергия ионизации донорного примесного атома или центра E_{D} , (выраженная в $_{9}B$) равна по модулю энергии основного состояния (n=1)

$$E_D = \frac{13.52}{\varepsilon^2} \left(\frac{m^*}{m_e}\right) \tag{1.8}$$

Как видно из (1.8), энергия ионизации атома примеси E_D в ε^2 раз меньше, чем энергия ионизации атома водорода.

В кремнии, где $\varepsilon \approx 12$, а $m^* \approx 0.2 m_e$ [20;с.1039-1263], энергия ионизации донорного примесного центра E_D должна быть примерно 0.02 эВ. Радиус первой боровской орбиты примеси As в Si равен

$$a_0 = 0.529\varepsilon \left(\frac{m_c}{m^*}\right) \text{Å} \approx 32\text{Å}$$
 (1.9)

Когда в одном из узлов кристаллической решетки кремния находится атом бора *В*, который имеет три валентных электрона, тогда эти электроны образуют три ковалентные связи с соседними атомами кремния, а четвертая связь остаётся незавершенной. Поэтому, в данном случае атом бора может забирать электрон из валентной зоны кремния на незавершенную связь и превратиться в отрицательно заряженный ион, имеющий заряд *Ze* [11;c.336. 12;c.384. 17;c.613304. 18;c.616. 19;c.584]. При этом дырка появляется в валентной зоне и примеси, поставляющие такие свободные дырки, называют акцепторами. Собственные значения энергии для акцепторной примеси можно определить

точно таким же путем, каким они были получены для донорной примеси. При этом энергии водородоподобного акцепторного примесного центра E_n , определяемые из уравнения (1.5), будут равны

$$E_n = E_v + \frac{13.52}{\varepsilon^2} \left(\frac{m_h^*}{m_e} \right) \frac{1}{n^2} \tag{1.10}$$

Здесь энергия (выраженная в эВ) отсчитывается от потолка валентной зоны E_v , m_h^* - эффективная масса дырки.

Вышеприведенная теория примесных состояний в легированных ковалентных полупроводниках является довольно элементарным. Она вполне пригодна для рассмотрения мелких примесных состояний, для которых энергия связи дырочных носителей тока мала ($\sim 10^{-2}$ эВ) по сравнению с шириной запрещенной зоны. Для таких примесных центров радиус орбиты дырок значительно больше постоянной решетки a_0 . Для описания состояния электронов, связанных с примесями, образующими глубокие локальные уровни, водородоподобная модель непригодна, так как в данном случае нельзя пренебрегать короткодействующими носитель-примесными, а также коротко- и дальнодействующими носитель-решеточными взаимодействиями.

Вследствие этих причин пределы применимости водородоподобной модели для описания локализованных электронных состояний в легированных полупроводниках и полярных оксидных соединениях ограничены. Остаются все еще не выясненными и условия образования локализованных водородоподобных примесных состояний в этих материалах.

§1.6. Различные типы металл - диэлектрик переходов

Металл-диэлектрик переходы в твердых телах объясняют многие экспериментальные факты, и служат основой для описания практически всех их электронных свойств. Проблемы локализации носителей тока и металл-

диэлектрик переходов в твердых телах оказались очень сложными и являются еще не законченными, хотя интерес к этим явлениям возник после 1930 года [20;с.1039-1263]. Теоретическому исследованию различных механизмов металл-диэлектрик переходов в твердых телах посвящены фундаментальные работы Вильсона [21;с.458], Мотта [22;с.72], Вигнеря [23;с.678], Пайерлса [24;с.260], Андерсона [25;с.1492-1505], Хаббарда [26;с.237-259. 27;с.401-419] и других. Эти работы основаны на теоретических моделях, пытающихся объяснить каким образом и при каких условиях, электронный газ в твердом теле может испытывать немедленное изменение из делокализованного в локализованное состояние, приводящее к переходу металл-диэлектрик. Эти вопросы будут обсуждены ниже в силу их исключительной важности.

§1.6.1. Металл - диэлектрик переход по Вильсону

Согласно зонной теории все твердые тела являются металлами, только если некоторые энергетические зоны частично заполнены. Например, металлом должен быть любой кристалл, содержащий нечетное число электронов на элементарную ячейку. Действительно, полное число состояний в зоне четно, ибо имеется двукратное спиновое вырождение, а число электронов нечетно, поэтому одна или несколько полос будут заполнены частично. При нецелом числе электронов на атом система всегда будет металлом. Выводы зонной теории выполняются не для всех веществ. К примеру, твердый водород (по крайней мере, при не слишком высоких давлениях) - неметалл. На один атом водорода приходится один электрон, но энергетически выгоднее образоваться молекулам H_2 . При этом атомы водорода занимают заведомо не эквивалентные позиции (расстояние между атомами в молекуле много меньше, чем расстояния между последними), и число электронов на элементарную ячейку оказывается четным. Другим примером, показывающим нарушение следствия зонной теории, является случай с кальцием. У кальция число электронов на

элементарную решетку четно, тем не менее, кальций - является металлом [11;с.336. 13;с.574. 18;с.616].

Для преодоления трудностей, связанных с предсказанием фазового состояния вещества зонной теорией, еще в 1931 году английский ученый - физик Вильсон выдвинул свою модель металл-диэлектрик перехода. Согласно Вильсону фазовое состояние вещества зависит от ряда внешних и внутренних факторов, которые влияют на зонную структуру носителей. Так, если дно зоны проводимости и начинает перекрываться с потолком зоны валентности, то, по Вильсону, вещество будет, скорее всего, металлом, а если они не перекрыты, то вещество относится к диэлектрикам.

В частности, когда дно зоны проводимости касается в одной точке потолка валентной зоны (как у серого олова, *HgTe*, *HgSe* и др.), вещество будет бесщелевым полупроводником (рис. 1.5). На перекрытие зон влияют такие факторы, как внешнее давление, легирование, температура и т.п. Металлдиэлектрик переход типа Вильсона наблюдался в двухвалентных элементах барии, кальции, стронции и иттербии при приложении внешнего давления и в сплаве висмута с сурьмой (7%).

Зонная теория и модель металл-диэлектрик перехода по Вильсону в состоянии объяснить массу опытных фактов, они служат основой для рассмотрения практически всех свойств твердых тел. Однако, здесь возникает связанных с обобщением критериев этих моделей на вопросов, некристаллические конденсированные вещества и в твердые тела с сильно коррелированной подсистемой фермионов. Кроме τογο, заполненной зоне фактически В свободном или электронном кристаллизация в непроводящую фазу была предсказана Вигнером много лет назад [23;с.678].

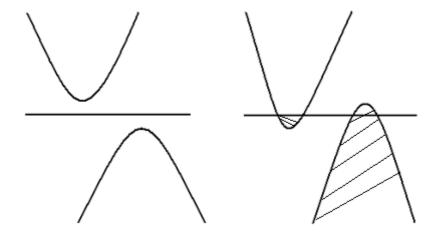


Рис.1.5. Схема бесщелевого энергетического спектра полупроводника [21]

Согласно Вигнеру [23;с.678], ансамбль свободных электронов с плотностью *п*, нейтрализуемой равномерно распределенным положительным зарядом ионов решетки, должен, наконец, кристаллизоваться в непроводящее состояние (вигнеровская кристаллизация). Условия, соответствующие локализации электронов, получаются путем минимизации полной энергии электронного газа, состоящего из кинетической и корреляционной энергии, по отношению к плотности *п* следующим образом [28;с.R285-R340]

$$\frac{1}{m} \left(\frac{\hbar}{e}\right)^2 n^{1/3} = a_H n^{1/3} \simeq 0.05, \tag{1.11}$$

где a_H - радиус атома водорода.

§1.6.2. Моттовский металл-диэлектрик переход

Одним из основных предсказаний зонной теории вещества в период её становления являлось то, что все вещества, содержащие нечетное количество электронов в элементарной ячейке, являются металлами. Однако, сразу же был обнаружен целый ряд веществ, прямо-таки, не вписывающихся в рамки тогдашней зонной теории. Веществами, для которых не выполняется

предсказание зонной теории, были некоторые оксиды переходных металлов, например окись никеля NiO. Этот материал должен иметь металлическую проводимость, поскольку восемь 3d —электронов иона Ni^{2+} должны заполнять 3d—зоны лишь частично. Согласно зонной теории NiO должен быть металлом. В действительности же NiO является одним из известных диэлектриков. Такой исход предсказаний зонной теории являлся, как потом уже было выяснено, результатом допустимых приближений, таких как независимость электронов и одноэлектронное приближение.

В (обычной) одноэлектронной зонной теории твердого тела кристаллическая решетка считалась жесткой (т.е. недеформируемой), а электроны – не взаимодействующими. Однако, оба эти предположения, лежащие в основе зонной модели, могут приводить к серьезным ошибкам именно в основном вопросе о критерии металл-диэлектрик перехода [11;с.336]. одноэлектронном приближении зонной модели Блоховские функции простираются на всю решетку и каждый электрон делокализован. В этом случае сделаны следующие три важных предположения [1;с.184]: 1) строгая 2) кристаллической решетки; фактического периодичность замена взаимодействия межэлектронного на усредненное взаимодействие (приближения Хартри - Фока) и 3) пренебрежение колебаниями решетки при предположении, что их можно учесть позднее по теории возмущений (слабая электрон-фононная связь). В обычной зонной модели введение среднего взаимодействия необходимо, чтобы межэлектронного можно было, одноэлектронном приближении, считать возможные состояния электрона полностью не зависящими от рассматриваемого заполнения электронами других состояний. Поведение зонного (блоховского) электрона полностью определяется периодическим потенциалом, в котором он движется. Это подразумевает пренебрежение корреляциями между валентными электронами в кристалле. Здесь мы обсудим насколько серьезно могло критерий повлиять металл-диэлектрик перехода пренебрежение на межэлектронным взаимодействием в зонной теории (в которой часть 40

межэлектронного взаимодействия учтена, включая его в потенциал кристалла [11;с.336. 12;с.384]. При этом обсудим, в какой мере можно включить корреляции в зонную модель в рамках так называемой модели Хаббарда [26;с.237-259. 27;с.401-419]. В модели Хаббарда можно проследить переход от нелокального (делокализованного) описания электронов посредством зонной модели к локальному их описанию.

Как было подчеркнуто Моттом, учет взаимодействия электронов между собой приводит к кардинальной перестройке электронной структуры вещества. Это взаимодействие также может быть доминирующим в определении характера или природы фазового перехода металл-диэлектрик. С 1949 года Мотт в своих публикациях выдвигал идею, согласно которой достаточно сильное межэлектронное взаимодействие может перевести вещество в диэлектрическое состояние (более подробно см. [10;с.342]). Следующий важный шаг в развитии теории был сделан Хаббардом [26;с.237-259. 27;с.401-419]. Он разработал модель, в которой взаимодействие между электронами вводится в рассмотрение лишь в том случае, когда они находятся в одном и том же атоме, а дальнодействующими кулоновскими силами пренебрегают. Для больших a эта модель приводит к антиферромагнитному диэлектрику, так что (аналогично выводам слэтеровской работы [29;с.538-541]) энергии электронов образуют целиком заполненную и пустую зоны, которые называются соответственно нижней и верхней хаббардовскими зонами. Тогда переход металл-диэлектрик проявляется как переход от антиферромагнитного металла к антиферромагнитному диэлектрику, связанный с расщеплением зон. Чтобы понять основные причины возникновения моттовского металл-диэлектрик перехода, обусловленного корреляцией электронов, рассмотрим кристалл с числом электронов, равным числу узлов решетки.

По зонной теории основное состояние такой многоэлектронной системы является металлическим и представляет собой наполовину заполненную зону электронов, причем в каждом орбитальном (блоховском) состоянии находятся два электрона с антипараллельными спинами. Обозначим характерную энергию

кулоновского отталкивания двух электронов на одном и том же узле кристаллической решетки через U, а ширину одноэлектронной зоны без электронной корреляции (когда U=0), т.е. характерную кинетическую энергию электронов, через W. Согласно модели Мотта-Хаббарда [10;c.342. 11;c.336. 30;c.416] при U<<W взаимодействие между электронами будет приводить лишь к каким-то малым поправкам в зонной теории, но зато при U \gtrsim W основное состояние системы радикально меняется, и каждый электрон локализован на своем узле. Очевидно, что такое состояние системы будет непроводящим (диэлектрическим).

Эффекты корреляции в моделях электронной металл-диэлектрик переходов учтены Вигнером и Моттом скорее только качественно, тогда как Хаббард впервые ввел в явном виде корреляционный член в гамильтониан для вычисления зонной проводимости. Он нашёл способ успешного моделирования металл-диэлектрик перехода путём введения только внутриатомного корреляционного члена $U=e^2/r_{12}$ без дальнейшего рассмотрения какого-либо дальнодействующего кулоновского взаимодействия. При этом Хаббард для изучения моттовского металл-диэлектрик перехода, вызванного сильной корреляцией носителей, предложил следующий модельной гамильтониан, носящий его имя [26;с.237-259. 27;с.401-419]:

$$H = \sum_{ik\sigma} T_{ik} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + U \sum_{i} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}, \qquad (1.12)$$

где T_{ik} - интеграл перескока электрона между ближайшими соседними узлами решетки, выражемый как

$$T_{ik} = W/2z,$$
 (1.13)

z - координационное число данного узла решетки, $c_{i\sigma}^+$ и $c_{k\sigma}$ - соответственно операторы рождения и уничтожения электрона в i-ом и k-ом узлах решетки, σ -

направления спина электрона, $n_{i\sigma}$ и $n_{i-\sigma}$ - операторы числа заполнения i—го состояния.

Хаббард показал, что применение гамильтониана (1.12) к цепочке одноэлектронных атомов даёт две расщепленные зоны, показанные на рисунке 1.6, которые начинают перекрываться при $a < a_0$ согласно его анализу для $W/U \ge 1.15$ (смотрите Рисунок 1.7).

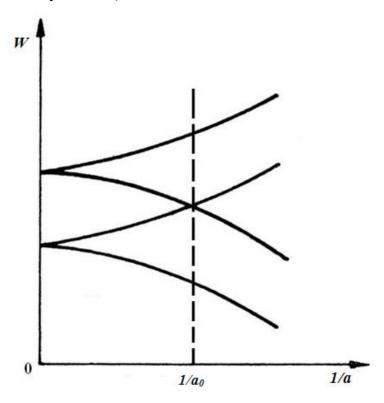


Рис.1.6. Расщепление наполовину заполненной зоны в нелегированных купратах вследствие сильной электронной корреляции в рамках однозонной модели Хаббарда [26,27], где W - ширина полосы, a — параметр решетки

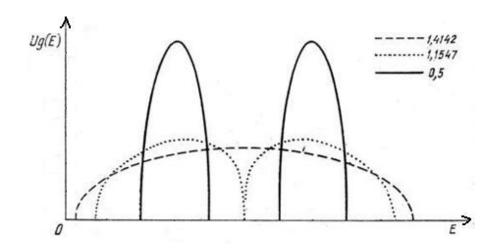


Рис.1.7. Две хаббардовские зоны как функция параметра W/U [1], где g(E) - плотность состояний

Теперь рассмотрим свойства кристаллической системы одноэлектронных центров, каждый из которых описывается атомной волновой функцией $\psi(r)$, убывающей как $\exp(-r/a_H)$ (где a_H - радиус водородоподобного центра) для больших r, причем расстояние a от одного центра до другого достаточно велико, чтобы приближение сильной связи было применимо [8;с.368]. Тогда при одном или любом целом числе электронов на атом эта система представляет собой диэлектрик. Наиболее удобно описывать ее с помощью внутриатомной энергии Хаббарда [26;с.237-259], которая для примесных центров в полупроводниках определяется выражением [8;с.368]

$$U = \int |\psi(\vec{r}_1)|^2 \frac{e^2}{\varepsilon r_{12}} |\psi(\vec{r}_2)|^2 d^3 r_1 d^3 r_2$$
 (1.14)

Для водородоподобных функций радиальная часть в сферических координатах

$$\psi(r) = (a_H^3/\pi)^{1/2} exp(-a_H r), \tag{1.15}$$

величина U была оценена и равна [31;с.473]

$$U = \frac{5e^2}{8\varepsilon a_H} \tag{1.16}$$

Хаббард показал, что система водородоподобных атомов (или центров) обладает следующими свойствами:

а) Полузаполненная энергетическая зона электронов расщепляется на две зоны (Рис.1.7), когда выполняется неравенство

$$\frac{w}{v} \lesssim 1.15,\tag{1.17}$$

тогда происходит металл-диэлектрик переход, часто называемый переходом Мотта.

б) Две зоны Хаббарда будут перекрываться, когда a достаточно мало (т.е. при $a \le a_0$) и соответственно W достаточно велико, чтобы обеспечить выполнение условия

$$W \gtrsim 1.15U,\tag{1.18}$$

Ширина энергетической зоны W электронов при U=0 определяется из выражения (см.ниже §1.5.4)

$$W = 2zI, (1.19)$$

где *z*- координационное число водородоподобных центров, *I*- интеграл перекрывания, который был оценен Слэтером [32;с.483] для водородоподобной функции (1.15) (см. также [10;с.342]).

Условие (1.17) для моттовского металл-диэлектрик перехода можно найти для водородоподобных волновых функций, когда U (формула 1.16) и W (формула 1.19) известны. Слэтер [32;с.483] оценил величину I, определяющую ширину зоны для водородоподобных функций (1.15), и для I получил

$$I = \left[\frac{3}{2}(1 + \alpha R) + \frac{1}{6}(\alpha R)^{2}\right]e^{2}\alpha exp(-\alpha R), \tag{1.20}$$

где R- расстояние между водородоподобными атомами, α - параметр, характеризующий скорость экспоненциального спада волновой функции с расстоянием.

Согласно Мотту ширина зоны, определяемая из (1.19) для атомов водорода, заменяется для водородоподобных примесных центров в диэлектрической среде (т.е. в твердом теле с диэлектрической проницаемостью ε) соотношением [8;c.368]

$$W = 2z\varepsilon^{-1}I\tag{1.21}$$

Тогда при z=6 условие моттовского металл-диэлектрик перехода (1.18) можно написать как

$$16.7 \left[\frac{3}{2} (1 + \alpha R) + \frac{1}{6} (\alpha R)^2 \right] \alpha a_H \exp(-\alpha R) \simeq 1, \tag{1.22}$$

так что, записав $\alpha = 1/a_H$ и $nR^3 = 1$ (для z = 6), имеем

$$R/a_H \simeq 5.5 \tag{1.23}$$

Таким образом, критерий моттовского металл-диэлектрик перехода для простой кубичской решетки (z=6) водородоподобных центров имеет вид

$$n^{1/3}a_H \simeq 0.182 \tag{1.24}$$

Переход металл-диэлектрик для решетки водородоподобных атомов рассмотрен также Моттом и с другой точки зрения. Если перевести электрон от его иона решетки к другому, то это означает в модели Хаббарда образование свободного электрона в верхней зоне Хаббарда и свободной дырки в нижней

(заполненной) зоне Хаббарда [1;с.184]. Взаимодействие между этими частицами осуществляется посредством потенциала $V(|\vec{r}|) = -e^2/\varepsilon r$ и этот потенциал является дальнодействующим. Электрон и дырка могут образовать связанное состояние (экситон) и кристалл остается диэлектриком. Если возбуждается много электронов, то образующийся газ будет экранировать взаимодействие электрон-дырка. При этом потенциал имеет вид [1;с.184]

$$V(|\vec{r}|) = -\frac{e^2}{\varepsilon r}e^{-\lambda r},\tag{1.25}$$

где

$$\lambda = \sqrt{12\pi e^2 n \cdot m_e / \hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3} \varepsilon} = \sqrt{4 \cdot \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} n^{1/3} / a_H}.$$
 (1.26)

Экранирование ослабляет энергию связи электрон-дырочной пары. При критической концентрации электронов ($n=n_{\rm c}$) постоянная экранирования λ становится настолько большой, что электрон и дырка не могут образовать связанное состояние. Это случается, когда обратная величина постоянной экранирования меньше, чем расстояние электрон-дырка (боровский радиус $a_H = \hbar^2 \, \varepsilon / m_e \cdot e^2$). Тогда из (1.26) следует, что $a_H \lambda \geq 1$. Следовательно, теперь критерий моттовского металл-диэлектрик перехода имеет вид

$$n_c^{1/3} a_H \ge \frac{1}{4} \left(\frac{\pi}{3}\right)^{1/3} \approx 0.25$$
 (1.27)

Хюлтен и Лаурикаинен показали [33;с.1-9], что связанное состояние электрона и дырки существует при условие $\lambda a_H > 1.19$. Тогда критерий перехода Мотта имеет вид

$$n_c^{1/3} a_H \ge \left(\frac{\pi}{3}\right)^{1/3} \frac{(1.19)^2}{4} \approx 0.36$$
 (1.28)

§1.6.3. Пайерлсовский и андерсоновский металл-диэлектрик переходы

Выше было сказано, что зонная теория твердого тела предполагает решетку жесткой. В действительности, некоторые металлические твердые тела могут испытывать структурные переходы с искажением высокосимметричной первоначальной решетки. Поэтому остановимся здесь на чисто качественном некоторых искажений решетки, рассмотрении приводящих К металлдиэлектрик переходам. Откажемся сначала от предположения жесткой решетки (электроны, по-прежнему, считаем невзаимодействующими) для рассмотрения возможности пайерлсовского металл-диэлектрик перехода. Если предположить, что в одномерном кристалле с параметром решетки a_0 атомы через один смещаются из положений равновесия, то параметр решетки уже не будет равен a_0 , а становится равным $2a_0$ и на новых границах зоны Бриллюэна происходит разрыв спектра. В этом случае энергия всех занятых состояний будет понижаться, а всех свободных состояний повышаться, что приводит к выигрышу полной зонной энергии электронов в кристалле, и следовательно, к понижению полной энергии одномерного кристалла [1;с.184. 10;с.342. 11;с.336. 13;с.574. 16;с.296. 18;с.616. 19;с.584]. Согласно Пайерлсу такое искажение приводит к появлению энергетической щели на уровне Ферми, поэтому металл превращается в диэлектрик.

Проведенное Пайерлсом рассмотрение показывает, что одномерная цепочка в основном состоянии, по-видимому, не может быть металлом. Это предсказание Пайерлса подтверждено опыте ДЛЯ некоторых на квазиодномерных систем (состоящих из цепочек со слабым взаимодействием низких температурах между которые при ведут полупроводники, а при повышении температуры переходят в металл (переход Пайерлса). В случае трехмерного кристалла, трудно добиться существенного понижения энергии всех занятых состояний искажением решетки, так как для этого нужно, чтобы поверхность Ферми в точности совпадала с новой границей зоны Бриллюэна. Однако, если поверхность Ферми совпадает с новой границей зоны Бриллюэна, то достигаемый за счет уменьшения зонной энергии общий выигрыш в энергии кристалла может быть заметным. В данном случае может происходить только локальная перестройка спектра в определенных точках *к*-пространства и поэтому, переход металл – диэлектрик не происходит. [10;с.342. 11;с.336. 13;с.574. 16;с.296. 24;с.260].

Обсудим теперь, к чему приводит отказ от еще одного фундаментального зонной теории, строгой пространственной предположения T.e. otпериодичности кристаллической решетки. Андерсон [25;с.1492-1505] показал, что при наличии неупорядоченности в кристаллической решетке электроны оказываются локализованными в некоторой области пространства, а их состояния, следовательно, являются бестоковыми. Он при изучении влияния разупорядочения решетки на подвижность невзаимодействующих электронов обнаружил, выше определенного предела беспорядка в решетке происходит пространственная локализация электрона, вызванная этим беспорядком, т.е. при достаточно сильном разупорядочении уравнение Шредингера может иметь решение, локализованное в пространстве. При этом Андерсон доказал это и привел также количественный критерий локализации электрона [25;с.1492-1505]. Результат Андерсона воспроизводится ниже. При решении уравнения Шредингера (1.2) Андерсон использовал приближение сильной связи, согласно которому системе ИЗ потенциальных ям, расположенных кристаллической решетки, образуется узкая энергетическая зона, как показано на рис.1.8a. Такая модель может быть применена к d-зоне переходного металла образующим металлизированную примесную к донорам, полупроводнике. Предположим, что ямы расположены настолько далеко друг от друга, что перекрытие между атомными волновыми функциями $\phi(r)$ на соседних узлах мало. Если индекс n соответствует n-й яме, а R_n - ее координата, то блоховская волновая функция электрона в кристалле имеет вид

$$\psi_k(r,R) = \sum_n \exp(ik \cdot R_n) \phi(r - R_n). \tag{1.29}$$

Функции ϕ будем считать сферически симметричными (*s*-функция). Если теперь W_0 - энергия уровня в изолированной яме, то энергии электрона в простой кубической решетке, соответствующие волновым функциям (1.29) равны

$$E = W_0 + W_k, (1.30)$$

где

$$W_k = -2I(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a).$$

Здесь І- интеграл перекрытия

$$I = \int \phi^*(r - R_n) H \phi(r - R_{n+1}) dr dR_n, \tag{1.31}$$

где H-гамильтониан. Интеграл перекрытия зависит от вида потенциала в яме. Но для нашей цели достаточно представить его в виде

$$I = I_0 exp(-\alpha R). \tag{1.32}$$

Здесь α определяется таким образом, что $exp(-\alpha r)$ дает скорость спада волновой функции изолированной ямы с расстоянием $\alpha=\hbar^{-1}(2mW_0)^{1/2}$.

Для водородоподобных функций можно оценить I_0 :

$$I_0 = e^2 a \left[\frac{3}{2} (1 + \alpha R) + \frac{1}{6} (\alpha R)^2 \right]. \tag{1.33}$$

Эффективная масса m^* на дне зоны равна

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2Ia^2},\tag{1.34}$$

а ширина зоны B

$$B = 2zI, (1.35)$$

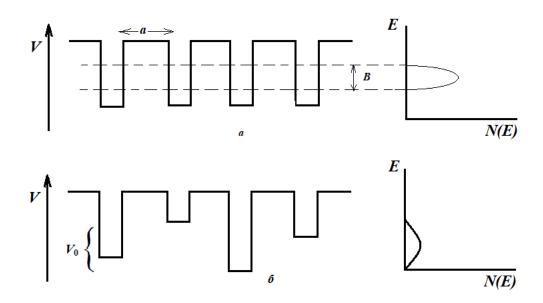


Рис.1.8. Потенциальные ямы в кристаллической решетке (a) и в решетке Андерсона (δ) . Показана также плотность состояний N(E)

В модели Андерсона задача состоит в том, чтобы рассмотреть, что произойдет с этой энергетической зоной в случае непериодического характера потенциальной энергии V. Непериодический потенциал можно получить двумя способами:

- А) смещая каждый центр на случайное расстояние, как например, при колебаниях решетки, или нарушая дальний порядок (позиционный, или «горизонтальный» беспорядок), как в жидкости;
- Б) добавляя случайный потенциал 1/2V к каждой яме («вертикальный» беспорядок); Андерсон предположил, что V принимает всевозможные случайные значения в интервале $\pm V_0$ так, что V_0 представляет собой область размытия энергий. Конечно допустимы и другие функции распределения, такие, как гауссова.

Андерсон показал, при некотором критическом значении отношения V_0/W состояние электрона в разупорядоченной решетке является локализованным. Критическую величину $(V_0/W)_c$ трудно рассчитать точно; первоначально Андерсон получил для z=6 значение, близкое к 5, но более поздние расчеты ([10;c.342]) дали результат близкий к 2. При этом критерий андерсоновского металл-диэлектрик перехода определен как [10;c.342. 28;c.R285-R340]

$$V_0/W > c(1.4 < c < 2.7)$$
 (1.36)

Как подчеркнуто Моттом [34;с.227], модель Андерсона описывает ситуации, где электроны вблизи конца их энергетической зоны являются уже локализованными до энергии $E \le E_c$, тогда как электроны с энергией $E > E_c$, остаются делокализованными и дают вклад в проводимость (смотрите Рисунок 1.9). В случае частичной локализации электрона, положение энергии Ферми E_F относительно края подвижности E_c определяет, является ли твердое тело диэлектриком ($E_F \le E_c$) или металлом.

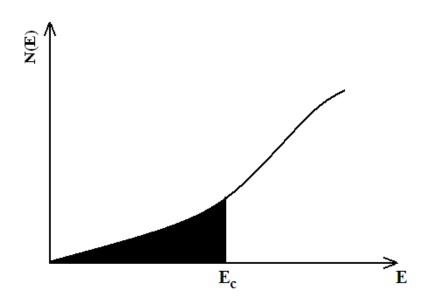


Рис. 1.9. Плотность состояний в некристаллическом твердом теле с краем подвижности, E_c . В зависимости от относительной локализации энергии Ферми, E_F , материал ведет себя как металлоподобный проводник ($E > E_c$) или как изолятор ($E < E_c$)

§1.6.4. Купратные ВТСП-материалы и металл-диэлектрик переходы

До открытия ВТСП-купратов, металл-диэлектрик переходы в оксидах переходных металлов и легированных полупроводниках обсуждались, в основном, как моттовские и андерсоновские переходы [1;с.184. 6;с.304. 8;с.368. 10;с.342. 11;с.336. 28;с.R285-R340. 30;с.416]. После открытия ВТСП-купратов металл-диэлектрик переходы в этих материалах исследовались в различных экспериментальных и теоретических работах [20;с.1039-1263. 35;с.1233-1234. 36;с.1665-1672. 37;с.5417-5420. 38;с.897-928. 39;с.241. 46;с.е301-е302. 47;с.136–139].

В предыдущих пунктах были кратко изложены различные механизмы металл-диэлектрик переходов. Как известно, легированные ВТСП-купраты по своим электронным свойствам точно не вписываются в рамки имеющихся ранее теоретических представлений. Согласно теоретическим расчетам элементарная ячейка нелегированных купратов содержит нечетное число электронов. Следовало бы ожидать, что все они являются металлами. Однако, нелегированные купраты являются моттовскими диэлектриками. Далее при дырочном легировании этих моттовских диэлектриков, необычные фазовые переходы металл-диэлектрик происходят начиная от слабо легированного до оптимально легированного режима. Природа этих переходов остается еще неясной.

За последние годы предпринимались многочисленные попытки понять электронные свойства ВТСП-купратов в нормальном и сверхпроводящем состояниях. Это относится также к фазовым переходам металл-диэлектрик в этих материалах. Однако до сих пор продолжаются спекулятивные дискуссии о природе металл-диэлектрик переходов. Это конечно обусловлено сложностью структуры и свойств легированных ВТСП-купратов. Предполагают, что в фазовых переходах металл-диэлектрик в легированных купратах могут быть обнаружены черты и моттовского и андерсоновского металл-диэлектрик

переходов [20;с.1039-1263. 34;с.227. 35;с.1233-1234. 36;с.1665-1672. 37;с.5417-5420. 38;с.897-928. 39;с.241].

Как уже было сказано выше, купраты сложны по кристаллическим структурам, анизотропны, электронная подсистема сильно коррелирована. Кроме дырочные носители тока сильно взаимодействуют кристаллической решеткой. Сама кристаллическая решетка претерпевает структурный фазовый переход из орторомбической фазы в тетрагональную фазу при легировании. Металл-диэлектрик переходы в легированных купратах изучались в работах [35;с.1233-1234. 36;с.1665-1672. 37;с.5417-5420. 38;с.897-928. 39;с.241. 40;с.169-206. 41;с.392. 42;с.373. 43;с.151-154]. Разные авторы рассматривают металл-диэлектрик переходы в различных аспектах и в свете своих представлений (моделей). Применимость металл-диэлектрик перехода Вильсона к легированным ВТСП-купратам неадекватна из-за отсутствия перекрытия зон (даже при высоких давлениях). То же можно сказать и про переход Пайерлса, так как нет удвоения решетки купратов. Поэтому в настоящие время все большее число ученых склоняются к тому, что моттовский или андерсоновский металл-диэлектрик переходы и даже другие типы металл-диэлектрик переходов могут иметь место в легированных купратах.

Томас в работе [40;с.169-206] изучил особенности металл-диэлектрик перехода в соединениях $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ и $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. Согласно [40;с.169-206] металл-диэлектрик переход в легированных купратах происходит при концентрации носителей (дырок), удовлетворяющей соотношению

$$n_c^{1/3} a_H^* \approx 0.26 \tag{1.37}$$

То есть металл-диэлектрик переход в легированных купратах ни чем не отличается от металл-диэлектрик перехода в обычных полупроводниках. Однако следует отметить имеющиеся отличия легированных ВТСП-купратов от обычных полупроводников. Эти отличия следующие:

- купраты являются ионными соединениями;
- лишние дырки, введенные в кристаллическую решетку купратов, могут локализоваться как возле примесей, так и в деформируемой решетке из-за их сильного взаимодействия с колебаниями кристаллической решетки;
- из-за сильной полярности соединений купратов дырки, скорее всего, автолокализуются в поляронные состояния;
- из-за сильного взаимодействия дырок с фононами имеется некоторая вероятность спаривания дырок в биполяроны, Бозе-конденсация которых ведет к ВТСП.

Эти особенности купратов проявляются также в металл-диэлектрик переходах. Здесь следует заметить, что в легированных ВТСП-купратах наряду с металл-диэлектрик переходом существует переход диэлектрик-сверхпроводник или диэлектрик - «странный металл» [43;с.151-154].

Важная роль электрон-фононного взаимодействия в определении свойств купратов отмечена во многих работах [44;с.043201. 45;с.1259-1280], в том числе в металл-диэлектрик переходе Мотта [46;с.е301-е302]. Куямарис в работе [36;с.1665-1672] изучил металл-диэлектрик переход в купратах с учетом поляронных эффектов. По его оценкам критическое значение концентрации, которой моттовский при происходит металл-диэлектрик переход легированных ВТСП-купратах составляет $x_c^M = 0.03$, что приблизительно согласуется с экспериментально найденным значением $x_c=0.04$ для $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. Результаты Куямариса основываются в предположении о вигнеровской кристаллизации поляронов. Во время применимости идеи вигнеровского критерия полярона в купратах ограничены малыми значениями концентрации носителей.

Булля в работе [47;с.136-139] обсудил возможности металл-диэлектрик перехода в рамках модели Хаббарда применительно к купратам. Выводы Булля таковы: если энергия Хаббарда U (кулоновская энергия отталкивания двух электронов на одном узле решетки) меньше некоторого критического значения $U_{cl} \approx 1.2W$ (где W — ширина зоны проводимости), то вещество будет металлом, а

при $U \ge U_{c2} \approx 1.5W$ вещество, скорее всего, будет моттовским диэлектриком. При промежуточных значениях U таких, что $U_{c1} \le U \le U_{c2}$ в веществе будет сосуществовать металлическое и диэлектрическое состояния. Одним из недостатков результатов Булля является то, что в нем корреляционная энергия Хаббарда вычисляется без учета эффектов экранирования, не рассматривается возможность образования локализованных состояний носителей возле легирующих примесей. Кроме того, не учитываются поляронные эффекты, что очень важно для определения зоны проводимости носителя- полярона, что было отмечено в работе [48;с.916-918].

Из вышесказанного становится очевидной необходимость дальнейшего комплексного изучения металл-диэлектрик переходов с учетом отличительных особенностей свойств купратов от обычных полупроводников, в которых, как известно, металл-диэлектрик переходы происходят при известных критериях Мотта

$$n_c^{1/3} a_H \approx 0.18 - 0.36 \tag{1.38}$$

§1.7. Цель и задачи исследования

Анализ литературных данных показал, что несмотря на определенный прогресс, достигнутый в последние десятилетия в понимании процессов локализации и делокализации носителей тока, металл-диэлектрик переходов и разделения различных электронных фаз в нелегированных и легированных твердых телах, основные вопросы об этих взаимосвязанных явлениях в легированных ВТСП-материалах остаются еще нерешенными, поскольку существующие теоретические модели, предложенные для описания явления локализации дырочных носителей тока, металл-диэлектрик переходов и разделения диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в слабо легированных купратах, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратах, во-первых, противоречивы, а во-вторых, недостаточно обоснованы,

причем применимость моттовских и других (в том числе и новых) металлдиэлектрик переходов для легированных купратных соединений остается не доказанной. В частности, теория моттовского металл-диэлектрик перехода (вызванного сильной электронной корреляцией) пока еще не построена в сколько-нибудь полном виде. В то время как новые металл-диэлектрик быть переходы, которые МОГУТ вызваны сильными носитель-дефектрешеточными и носитель-решеточными взаимодействиями в легированных ВТСП-купратах, не были исследованы. В выше перечисленных работах, хотя и изучаются металл-диэлектрик переходы в легированных купратах, но не учитывается особенности купратов. Одной из этих особенностей является сильная поляризуемость кристаллической решетки купратов и возможности образования поляронных и биполяронных состояний.

Далее следует отметить, что не учитывается то, что дырочно-решеточные взаимодействия в легированных ВТСП-купратах являются сильными и имеются экспериментальные данные, свидетельствующие в пользу того, что металл-диэлектрик переходы в легированных ВТСП-купратах обусловлены локализацией носителей около легирующих примесей.

Кроме того, не учитываются возможности образования упорядоченных структур примесных центров с образованием различных типов сверхрешеток. Учет последнего обстоятельства чрезвычайно важен из-за их связи с экспериментом по обнаруженным структурам типа страйпы или стринги в купратах [49;с.736-740. 50;с.L541-L546. 51;с.12018-12021. 52;с.629. 53;с.3412-3415. 54;с.3467-3470].

Поэтому цель настоящей диссертационной работы заключается в исследовании механизмов локализации носителей тока, механизмов моттовских и других металл-диэлектрик переходов и наномасштабных разделений диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в слабо легированных купратах, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратах и в построении последовательной теории этих сложных и взаимосвязанных

явлений в легированных оксидных ВТСП-материалах. Достижению этой главной цели подчинен круг задач, решаемых в данной работе:

исследовать механизмы локализации дырочных носителей возле примесей и в деформируемой решетке слабо легированных купратов;

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

исследовать специфические механизмы моттовского металл-диэлектрик перехода, реализуемого в дырочно-легированных ВТСП-купратах;

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

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

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

ГЛАВА II. ОТЛИЧИТЕЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СТРУКТУР НЕЛЕГИРОВАННЫХ И ЛЕГИРОВАННЫХ КУПРАТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Нелегированные И легированные купратные соединения являются существенно различными системами, причем высокоэнергетическая электронная структура нелегированных купратов фундаментально отличается от низко энергетической электронной структуры легированных купратов. Ниже будут обсуждены важные отличительные особенности электронных структур нелегированных и легированных купратов [55;с.30-33. 56;с.18-21. 57;с.14-20. 58;c.337-339. 59;c.26-27].

§2.1. Электронная структура нелегированных купратов

Нелегированные купраты имеют слоистую кристаллическую структуру типа перовскита и их основной структурный элемент представлен одной или более CuO_2 плоскостей (слои) в элементарной ячейке, которые отделены друг от друга так называемыми слоями «резервуарами заряда». Они подразделяются на однослойные соединения (например, $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO), $Bi_2Sr_2CuO_{6+\delta}$ и $Tl_2Ba_2CuO_6$), двухслойные соединения (например, $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO), $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (Bi-2212) и $Tl_2Ca_2Ba_2Cu_3O_{10}$) и трехслойные соединения (например, $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ и $Tl_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$) [20;c.1039-1263. 60;c.8-38. 61;с.69-90. 62;с.63. 63;с.1547-1610]. В нелегированных купратах, каждый из ионов меди Cu^{2+} окружен шестью или пятью ионами кислорода O^{2-} , которые образуют восьмигранник (в лантановых - соединениях) или неполный октаэдр (в иттриевых или висмутовых соединениях), вытянутых вдоль c-оси, перпендикулярной к слою CuO_2 . Cu^{2+} ион имеет девять электронов в dорбиталях, так что его электронная конфигурация $3d^9$ с одной дыркой в вышележащих $3d_{x^2-y^2}$ орбиталях. В кубическом кристалле пятикратно вырожденный 3d уровень Cu^{2+} иона расщепляется на два двукратно и трехкратно вырожденных e_g и t_{2g} уровня. Дальнейшее расщепление этих дегенеративных e_g и t_{2g} уровней происходит под тетрагональным кристаллическим полем, как показано на рис. 2.1.

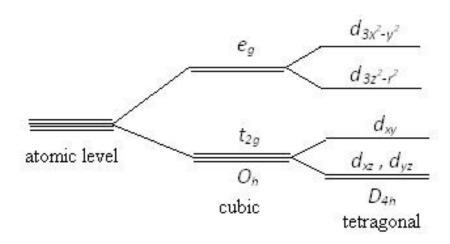


Рис.2.1. Кристаллическое расщепления 3d-состояний Cu^{2+} иона в купратах при кубической (O_h) и тетрагональной (D_{4h}) симметриях [64]

Так как искажения Яна-Теллера [65;с.343. 66;с.352] приведут к удлинению октаэдра вдоль оси c, которое сопровождается расщеплением вырожденных уровней $e_{\rm g}$, в нижний уровень, $d_{3z^2-r^2}$ и верхний, $d_{3x^2-y^2}$. Согласно теории поля лигандов [65;с.343. 67;с.360], орбитали меди Cu d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} образуют несвязывающие (NB) зоны и орбитали кислорода O $p_{x\pi}$, $p_{y\pi}$, $p_{z\pi}$, невзаимодействующие с Cu $d_{x^2-y^2}$ и $d_{3z^2-r^2}$ состояниями, образуют π связи изза прямого перекрытия орбиталей p_{π} , в то время как Cu $d_{x^2-y^2}$ и $d_{3z^2-r^2}$ орбитали образуют связывающие σ и разрыхляющие σ^* зоны с p-орбиталями кислорода, как показано на рис. 2.2.

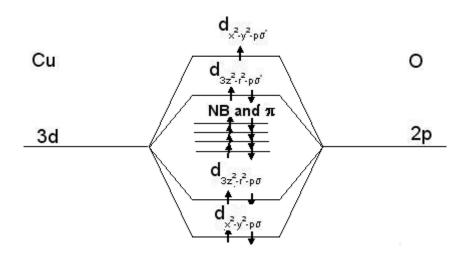


Рис.2.2. Схематическая диаграмма энергетических уровней нелегированных оксидов меди [9]

Низколежащие t_{2g} и $d_{3z^2-r^2}$ орбитали полностью заняты, тогда как $d_{x^2-y^2}$ орбиталь остается наполовину заполненной. В конфигурации октаэдра, расстояние Cu-O вдоль c-оси больше, чем расстояние Cu-O в плоскостях CuO_2 . Таким образом, считается, что Cu-O связь по c-оси намного слабее, чем Cu-O связь в плоскости, и нелегированные купраты имеют квази-двумерную (2D) электронную структуру [66;c.352. 68;c.763-840. 69;c.473-541. 70;c.1267-1276].

Вышеприведенная качественная картина об одноэлектронной зонной структуре нелегированных купратов (рис. 2.2) была подтверждена расчетами зонной структуры [71;с.433-512. 72;с.227. 73;с.351]. Эти расчеты зонной структуры основаны на теории функционала плотности и эффективных одноэлектронных схемах, которые используют делокализованные состояния Блоха, и получают электронные зонные структуры, предполагая приближение локальной плотности для рассмотрения корреляционных эффектов. Такие расчеты дают практически одну картину электронной зонной структуры нелегированных купратов [74;с.770] и показывают, что важные электронные состояния преобладают в медной *Си* 3*d* и кислородной *О* 2*p*-орбиталях, с сильной гибридизацией между ними.

Общая ширина *W* валентной зоны нелегированного купратного материала составляет около 8.5 эВ и энергия Ферми лежит приблизительно 2 эВ ниже

потолка этой зоны. Одноэлектронная зонная структура нелегированных купратов схематически показана рис.2.3 для их 2D CuO_2 плоскости. При этом $d_{3z^2-r^2}$ орбитали меди Cu являются несвязывающими (NB), d_{xy} , d_{xz} и d_{yz} орбитали меди Cu образуют π и π^* связи с p_{π} орбиталями кислородов (лигандов), тогда как $d_{x^2-y^2}$ орбиталь меди Cu образует связывающие σ и разрыхляющие (антисвязывающие) σ^* связи с p_{σ} орбиталями кислородов. Согласно этой зонной картине верхняя $d_{x^2-y^2}$ зона нелегированных купратов заполнена наполовину и они должны быть металлами. Однако, нелегированные купраты являются моттовскими диэлектриками [20;с.1039-1263. 68;с.763840. 69;с.473-541]. Это свидетельствует о том, что корреляционные эффекты имеют важное значение для более детального понимания высокоэнергетической электронной структуры нелегированных купратов.

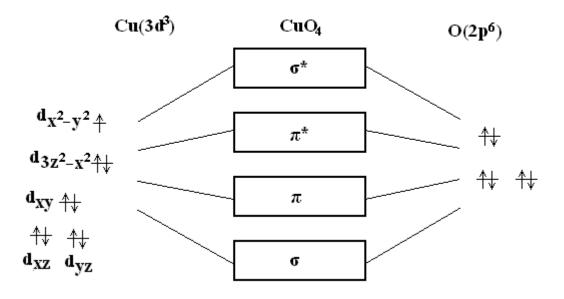


Рис.2.3. Диаграмма схематических энергетических зон нелегированных купратов для CuO_2 плоскости [75]

Действительно, экспериментальные результаты показывают [20;с.1039-1263. 38;с.897-928. 68;с.763-840. 69;с.473-541], что нелегированные купраты являются антиферромагнитными ($A\Phi$) моттовскими диэлектриками. Причины неудачи одноэлектронной зонной теории, которая не в состоянии предсказать

наблюдаемое диэлектрическое состояние нелегированных купратов, связана с пренебрежением сильного кулоновского отталкивания между двумя дырками на одном и том же ионе меди Си в кристаллической решетке. Энергия такого кулоновского отталкивания U_d между двумя дырочными носителями на одном и том же ионе меди Cu^{3+} больше, чем ширины валентной зоны W, т.е. $U_d \gtrsim 10$ эВ и $W \approx 8-9$ эВ. В этом случае две дырки, находящиеся на узле решетки, занятые ионом Cu^{3+} , будут чувствовать большое кулоновское отталкивание ($U_d > W$), которое будет расщеплять наполовину заполненные σ^* зоны (представляющие в основном $d_{\chi^2-\gamma^2}$ зоны меди) в так называемые верхнюю и нижнюю Хаббардовские зоны. Можно ожидать, что нелегированные купраты, скорее всего, будут диэлектрическими материалами из-за сильного кулоновского отталкивания двух дырок или корреляционного эффекта. Величины экспериментально обнаруженной энергетической щели, спектрах возбуждения этих материалов, составляют около 1.5-2 эВ и эти щели интерпретируются энергией возбуждения переноса заряда. По этой причине трехзонная модель Хаббарда может оказаться хорошим приближением для описания высокоэнергетической электронной структуры нелегированных купратов. Поэтому, согласно современной классификации Зайнана-Савацкого-Аллена [76;с.418-421], конечная зонная структура оксидов переходных металлов зависит от величины внутриатомного кулоновского отталкивания U_d , ширины d-зоны W и энергетической щели $E_{\mathfrak{g}} = \Delta_{CT} = \varepsilon_d - \varepsilon_p$ для переноса ионов кислорода в ионы меди, где ε_d и ε_p соответственно энергии электрона на атомах меди и кислорода. При $U_d > W > \Delta_{CT}$ электронная зонная структура оксидов переходных металлов соответствует моттовскому диэлектрику типа переноса заряда, как показано на рис.2.4. LHB и UHB соответственно нижняя и верхняя зоны Хаббарда, В и NB, соответственно, связывающая σ и несвязывающая π зоны, имеющие в основном кислородный характер.

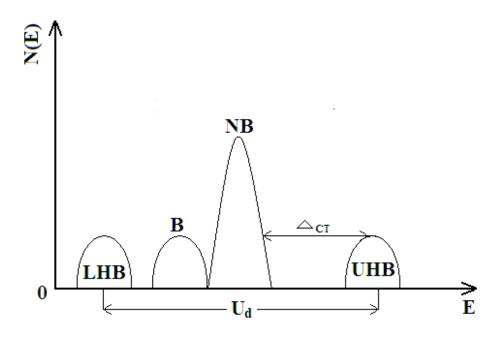


Рис.2.4. Схематическая зонная структура нелегированных купратов предсказуемой трехзонной модели Хаббарда [5]

По нашему мнению, модели Хаббарда, описывающие диэлектрические (высокоэнергетические электронные структуры нелегированных будут купратов) неадекватными И непригодными ДЛЯ изучения низкоэнергетических электронных структур легированных купратов, в которых дырочные носители (введенные в процессы легирования купратов) могут быть делокализованными аналогично как в обычных легированных полупроводниках (например, легированных Si и Ge). Поэтому адекватное низкоэнергетической электронной структуры легированных купратов требует более подходящей и реалистической теоретической модели.

§2.2. Основное состояние дырочных носителей в легированных купратах

Как выше было сказано (смотрите Рисунок 2.4), различные эксперименты свидетельствуют о том, что валентная зона кислорода лежит внутри энергетической щели U_d Мотта-Хаббарда. Эти диэлектрики могут быть легированы дырками путем замещения атомов решетки примесными атомами

или путем изменения содержания кислорода. При этом дырочные носители появляются в валентной зоне кислорода и имеют эффективные массы m^* . Затем эти свободные дырки взаимодействуют с акустическими и оптическими фононами, а также с дефектами кристаллической решетки (примесями). В материалах дырки, взаимодействующие как с колебаниями кристаллической решетки, так и с дефектами могут легко автолокализоваться в деформируемой решетке и вблизи примесей. При этом локализованные поляронные и примесные состояния образуются в энергетической щели $(E_g = \Delta_{CT})$ переноса заряда, т.е. запрещенной зоне моттовского диэлектрика. Возможности образования таких локализованных состояний носителей в легированных купратах могут быть изучены рамках континуальной модели ионного кристалла, предложенной Тойозавой [77;с.7-17]. В этой модели энергии основных состояний дырки в трехмерном (3D) кристалле легированных купратов вычисляются вариационно в адиабатическом приближении с учетом коротко- и дально- действующих носитель-фононных, носитель-дефект и дефект-фононных взаимодействий. При этом дырки и дефект взаимодействуют с упругой дилитацией среды $\Delta(r)$ через их соответствующие деформационные потенциалы E_d и E_{dD} , и с полем электростатического потенциала $\phi(r)$ поляризации ионного смещения через их соответствующие заряды е и Ze, в добавление к кулоновскому взаимодействию между носителями (в двухчастичной системе) и носитель-дефектному взаимодействию, состоящему короткодействующей ИЗ $V_0\delta(r)$ дальнодействующей частей $-Ze^2/\varepsilon_{\infty}r$ (где ε_{∞} - высокочастотная диэлектрическая проницаемость).

Поэтому, общие энергии одночастичной и двухчастичной систем, связанных с потенциалом дефекта и акустическими и оптическими фононами, зависит от $\Delta(r)$ и $\phi(r)$, а также от пробных волновых функцией $\psi(\vec{r})$ и $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ [77;с.7-17] (где \vec{r}_1 и \vec{r}_2 – радиус-векторы носителей). Тогда функционалы полной энергии одночастичной и двухчастичной систем после минимизации по

 $\Delta(r)$ и $\phi(r)$ при фиксированном $\psi(\vec{r})$ и $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ имеют вид [57;с.14-20. 77;с.7-17. 78;с.484-494]

$$E_{1}\{\psi\} = \frac{\hbar^{2}}{2m^{*}} \int (\nabla \psi(\vec{r}))^{2} d^{3}r - \frac{e^{2}}{2\tilde{\epsilon}} \int \frac{\psi^{2}(\vec{r})\psi^{2}(\vec{r}')}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|} d^{3}r d^{3}r' - \frac{E_{d}^{2}}{2K} \int \psi^{4}(\vec{r})d^{3}r - \frac{Ze^{2}}{\varepsilon_{0}} \int \frac{\psi^{2}(\vec{r})}{\left|\vec{r}\right|} d^{3}r + \left(V_{0} - \frac{E_{d}E_{dD}}{K}\right) \int \psi^{2}(\vec{r})\delta(\vec{r})d^{3}r$$

$$(2.1)$$

И

$$E_{2}\{\Psi\} = \frac{\hbar^{2}}{2m^{*}} \int [|\nabla_{1}\Psi(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2})|^{2} + |\nabla_{2}\Psi(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2})|^{2}]d^{3}r_{1}d^{3}r_{2} + \frac{e^{2}}{\varepsilon_{\infty}} \int \frac{\Psi^{2}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2})}{|\vec{r}_{1}-\vec{r}_{2}|} d^{3}r_{1}d^{3}r_{2} - \frac{2e^{2}}{\varepsilon} \int \frac{\Psi^{2}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2})\Psi^{2}(\vec{r}_{3},\vec{r}_{4})}{|\vec{r}_{1}-\vec{r}_{3}|} d^{3}r_{1}d^{3}r_{2}d^{3}r_{3}d^{3}r_{4} - \frac{2E_{d}^{2}}{K} \int \Psi^{2}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2})\Psi^{2}(\vec{r}_{2},\vec{r}_{3})d^{3}r_{1}d^{3}r_{2}d^{3}r_{3} - \frac{2Ze^{2}}{\varepsilon_{0}} \int \frac{\Psi^{2}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2})}{|\vec{r}_{1}|} d^{3}r_{1}d^{3}r_{2} + 2\left(V_{0} - \frac{E_{d}E_{dD}}{K}\right) \int \Psi^{2}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2})\delta(\vec{r}_{1})d^{3}r_{1}d^{3}r_{2}, \quad (2.2)$$

где m^* - эффективная масса носителя, $\tilde{\varepsilon}$ дается в виде $\tilde{\varepsilon}^{-1} = \varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_{0}^{-1} = (1-\eta)/\varepsilon_{\infty}$, $\eta = \varepsilon_{\infty}/\varepsilon_{0}$, ε_{∞} - высокочастотная диэлектрическая проницаемость, ε_{0} - статическая диэлектрическая проницаемость, K - упругая постоянная решетки, V_{0} - короткодействующий потенциал примеси, Z - зарядовое состояние примеси.

Чтобы минимизировать функционалы (после перехода в радиальную систему) (2.1) и (2.2) по $\psi(\vec{r}) = \psi(r)$ и $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(r_1, r_2)$, мы выбираем пробные волновые функции в виде

$$\psi(r) = N_1 exp \left[-(\sigma r) \right] \tag{2.3}$$

И

$$\Psi(r_1, r_2) = N_2[1 + \gamma(\sigma|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)] exp[-\sigma(r_1 + r_2)], \qquad (2.4)$$

где $N_1=\sigma^{3/2}/\sqrt{\pi}$ и $N_2=\sigma^3/\pi\sqrt{C_1(\gamma)}$ нормировочные коэффициенты, $\sigma=\beta/a_0,\ C_1(\gamma)=1+\frac{35}{8}\gamma+6\gamma^2,\ \beta$ и γ вариационные параметры, соответственно

характеризующие степень локализации носителей и корреляцию между ними, $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ расстояние между носителями, a_0 параметр решетки.

Подставляя (2.3) и (2.4) в уравнения (2.1) и (2.2) и выполняя интегрирование в уравнениях (2.1) и (2.2), мы получаем следующие выражения:

$$E_1(\beta) = A \left[\beta^2 - g_s (1 + b_s) \beta^3 - g_l \left(1 - \eta + \frac{16}{5} Z \eta \right) \beta \right]$$
 (2.5)

И

$$E_{2}(\beta,\gamma) = 2A \frac{c_{2}(\gamma)}{c_{1}(\gamma)} \left\{ \beta^{2} - \frac{8}{5} g_{l} \times \left[2(1-\eta) \frac{c_{4}(\gamma)}{c_{1}(\gamma)c_{2}(\gamma)} + Z\eta \frac{c_{5}(\gamma)}{c_{2}(\gamma)} - \frac{c_{3}(\gamma)}{c_{2}(\gamma)} \right] \beta - 16g_{s} \left[\frac{c_{6}(\gamma)}{c_{1}(\gamma)c_{2}(\gamma)} + \frac{b_{s}}{16} \frac{c_{7}(\gamma)}{c_{2}(\gamma)} \right] \beta^{3} \right\}$$
(2.6)

где $A=\hbar^2/2\,m^*a_0^2$, $g_s=E_d^2/16\,\pi K\,a_0^3A$, и $g_l=5\,e^2/16\,\varepsilon_\infty a_0A$ безразмерные параметры короткодействующей и дальнодействующей носитель-фононной связи, $b_s=16[E_{dD}/E_d-K\,V_0/E_d^2]$ параметр короткодействующей носитель-дефект-фононной связи, и корреляционные коэффициенты являются аналитическими функциями вариационного параметра γ

$$C_{2}(\gamma) = 1 + \frac{25}{8}\gamma + 4\gamma^{2},$$

$$C_{3}(\gamma) = \frac{5}{8} + 2\gamma + \frac{35}{16}\gamma^{2},$$

$$C_{4}(\gamma) = \frac{5}{8} + \frac{1087}{216}\gamma + \frac{38237}{2304}\gamma^{2} + \frac{67639}{2592}\gamma^{3} + \frac{4293}{256}\gamma^{4},$$

$$C_{5}(\gamma) = 2 + \frac{15}{2}\gamma + 9\gamma^{2},$$

$$C_{6}(\gamma) = \frac{1}{8} + \frac{185}{216}\gamma + \frac{4199}{1728}\gamma^{2} + \frac{8591}{2592}\gamma^{3} + \frac{477}{256}\gamma^{4},$$

$$C_{7}(\gamma) = 1 + 3\gamma + 3\gamma^{2}.$$

Минимизации выражений (2.5) и (2.6) по вариационным параметрам β и γ дают энергии основных состояний $E_1(\beta_{min})$ и $E_2(\beta_{min}, \gamma_{min})$ автолокализованных неспаренных и спаренных дырок возле примесей. Если знаки деформационных потенциалов носителей E_d и примесей (т.е. дефектов) E_{dD} являются положительными, то функционалы (2.5) и (2.6) описывают образование поляронных и биполяронных состояний возле примесей. Однако, если знак деформационного потенциала примеси (или дефекта) является отрицательным E_{dD} <0, то поляронный эффект возле примесей отсутствует и в функционале

(2.1) присутствуют только два члена: кинетическая энергия носителя и энергия взаимодействия носителя с примесью. В данном случае этот функционал представляет собой гамильтониан водородоподобного примесного центра.

 b_s , Параметры \boldsymbol{Z} И соответственно, характеризуют образование водородоподобных и неводородоподобных примесных состояний, тогда как параметры g_s и g_l , характеризующие силы коротко- и дально-действующих дырочно-решеточных взаимодействий ответственными являются за образование поляронных и биполяронных состояний. В дальнейшем нас интересуют возможности образования локализованных водородоподобных примесных состояний и (би)поляронных состояний внутри запрещенной зоны (т.е. энергетической щели переноса заряда) купратов.

§2.3. Применимости водородоподобной модели в легированных купратных соединениях

Возможности применимости водородоподобной модели для описания локализованных электронных состояний в легированных купратах, которые являются поляронными материалами остаются еще не доказанными, и образования локализованных водородоподобных примесных состояний в этих материалах еще мало изучены. Вышеприведенные количественные результаты позволяют дать определенный ответ на эти нерешенные вопросы легированных купратных соединений. Далее модель Мотта-Хаббарда, описывающая сильную электронную корреляцию и металл-диэлектрик переходы в легированных купратах применима тогда, когда условие образования водородоподобных примесных центров будет удовлетворено в этих полярных материалах. Водородоподобные примесные центры в легированных купратах могут образоваться при выполнении следующих условий: 1) носитель-дефектфононные и носитель-фононные взаимодействия возле примесей являются достаточно слабыми и 2) энергетический уровень E_2 двухэлектронного или двухдырочного примесного центра должен лежать выше энергетического

уровня E_1 одноэлектронного или однодырочного примесного центра. Однако вопрос, при каких условиях реализуется такая ситуация, остается открытым. Ниже будут проанализированы реальные возможности образования мелких водородоподобных примесных состояний в дырочно-легированных купратах. Условия образования такого локализованного водородоподобного примесного состояния в энергетической щели $E_g = \Delta_{CT}$ или запрещенной зоне купратов можно записать как

$$E_1 < E_2. \tag{2.7}$$

Это условие может выполняться в том случае, когда $E_d>0$ и $b_s<0$ или $E_{dD}<0$. Условие $b_s<0$ (или $E_{dD}<0$) будет выполняться для примесей замещения, имеющих большие ионные радиусы (см. [77;с.7-17]). Выполнение условия (2.7) означает, что возле таких примесей поляронные эффекты отсутствуют, и образование биполяронных состояний не представляется возможным.

Возможности образования водородоподобных примесных центров при слабой носитель-дефект-фононной связи в легированных купратах зависит от знаков деформационных потенциалов носителя E_d и примеси (т.е. дефекта) E_{dD} , которые являются положительными для дырок и примесей малых радиусов. Однако, знак деформационного потенциала примесей большого радиуса является отрицательным [77;с.7-17. 79;с.327]. В дырочно-легированных купратах LSCO и $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ (LBCO) радиусы примесных ионов Sr^{2+} и Ba^{2+} больше, чем радиус ионов La^{3+} основной решетки [80;с.295], так что знаки деформационных потенциалов E_{dD} ионов Sr^{2+} и Ba^{2+} являются отрицательными. В этих случаях суммарный короткодействующий потенциал примеси является отталкивающим и дырочно-фононные взаимодействия вокруг примесных ионов Sr^{2+} и Ba^{2+} подавляются этим отталкивающим потенциалом, так как знак константы связи b_s будет отрицательным из-за отрицательного знака E_{dD} , т.е. для E_d >0 имеет место неравенство

$$b_{s} = 16 \left[\frac{E_{dD}}{E_{d}} - \frac{KV_{0}}{E_{d}} \right] < 0 \tag{2.8}$$

Поэтому, при b_s <0 модель жесткой решетки или водородоподобная модель является хорошим приближением для описания локализованных примесных состояний в легированных полярных купратных материалах.

При этом дырочные носители локализуются вдали от примесных ионов Sr^{2+} и Ba^{2+} , т.е. дырочные носители слабо связаны с такими примесными ионами посредством их дальнодействующего кулоновского притяжения. Поэтому, можем рассматривать возможности образования водородоподобных примесных центров, имеющих боровские радиусы a_H и энергии ионизации E_I в слабо легированных купратах LSCO и LBCO. Аналогичные аргументы можно считать также правомерными для других легированных купратов, таких как $La_2CuO_{4+\delta}$, YBCO и $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (Bi-2212). В этих материалах легирующими дефектными центрами являются лишние атомы кислорода, которые захватывают электроны из валентной зоны кислорода и образуют акцепторные примесные центры, т.е. ионы O^- . Можно полагать, что такие лишние ионы O^- аналогично как ионы Sr^{2+} могут иметь отрицательные деформационные потенциалы (E_{dD} <0).

Таким образом, сначала обсудим возможность образования водородоподобных примесных состояний в дырочно-легированных купратах. Если носитель-фононные взаимодействия вблизи допантов являются слабыми, то в этих системах могут образоваться простые водородоподобные примесные центры. Такие ситуации реализуются в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO) или $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ (LBCO), где радиус ионов Sr^{2+} больше, чем ионов La^{3+} [80;c.295], так что для иона Sr^{2+} Z=1, $E_{dD}<0$ или $b_s<0$. В этом случае короткодействующая часть примесного потенциала в уравнении (2.1) будет отталкивающей, поэтому к ней можно относиться как к твердому ядру.

Дырочно-решеточные взаимодействия вблизи допантов большого радиуса в LSCO и LBCO подавляются этим отталкивающим дефектным потенциалом, и

дырочные носители локализуются на некотором расстоянии от допантов (т.е. носитель свободно связан с допантом дальнодействующим кулоновским притяжением). Из этих рассмотрений следует, что дырочнорешеточные взаимодействия вблизи допанта большого радиуса слабые и примесные состояния могут иметь водородоподобный локализованные характер, описываемый жесткой решеточной моделью [8;с.368]. Поэтому мы можем рассматривать водородоподобные примесные центры, имеющие боровские радиус a_H и энергию ионизации E_{IH} в слегка легированных LSCO и LBCO. Подобный довод можно сделать для остальных купратов, таких как $La_2CuO_{4+\delta}$, $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO), и $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (Bi-2212). В этих системах примесные центры избыточные кислородные атомы, которые захватывают электроны из зоны проводимости кислорода и имеют акцепторные центры, т.е. ионы O^- . Можно предполагать, что такие лишные ионы O^- точно также как ионы Sr^{2+} могут иметь отрицательный деформационный потенциал E_{dD} . Таким при $b_s < 0$ простая водородоподобная модель ДЛЯ акцепторных центров и мелкие примесные центры в дырочно-легированных купратах являются оправданными. Тогда при $b_s < 0$ и Z = 1 энергия ионизации E_I и боровский радиус локализованного водородоподобного примесного центра имеют вид

$$E_I = 13.575 \left(\frac{z}{\varepsilon_0}\right)^2 \frac{m^*}{m_e} \Im B,\tag{2.9}$$

И

$$a_H \simeq 0.529 \frac{\varepsilon_0}{7} (m_e/m^*) \text{Å},$$
 (2.10)

где m_e - масса свободного электрона.

Взяв $m^*=m_e$ [38;с.897-928], $\varepsilon_0\simeq 25$ [81;с.6575-6593], найдем $E_I\simeq 0.022$ эВ, которая близка к энергию связи акцептора Sr $E_I=19\pm 2$ мэВ, наблюдаемой в LSCO [38;с.897-928]. Кислородный акцептор в YBCO имеет эффективный заряд $Z=Z^*\simeq 1.5$. Используя $m^*\simeq m_e$ и $\varepsilon_0\simeq 30$, найдем $a_H\simeq 10.5A^\circ$ и $E_I\simeq 0.034$

эВ, который в разумном согласии с экспериментальными значениями $a_H \simeq 8\pm 2A^\circ$ и $E_I \simeq 0.035$ эВ (для кислородного акцептора в слегка легированных купратах) [38;с.897-928].

§2.4. Образование больших поляронов и биполяронов в легированных купратах

Для того чтобы найти энергии основных состояний автолокализованной дырки (полярона) и спаренных автолокализованных дырок (биполярона), значения параметров Z, V_0 и E_{dD} в уравнениях (2.5) и (2.6) будем считать равными нулю. Тогда энергии основных состояний поляронов и биполяронов определяются из следующих выражений:

$$E_{p}(\beta) = A[\beta^{2} - g_{s}\beta^{3} - g_{l}(1 - \eta)\beta]$$
(2.11)

И

$$E_{B}(\beta, \gamma) = 2A \frac{c_{2}(\gamma)}{c_{1}(\gamma)} \left\{ \beta^{2} - 16g_{s} \frac{c_{6}(\gamma)}{c_{1}(\gamma)c_{2}(\gamma)} \beta^{3} - \frac{8}{5}g_{l} \left[2(1-\eta) \frac{c_{4}(\gamma)}{c_{1}(\gamma)c_{2}(\gamma)} - \frac{c_{3}(\gamma)}{c_{2}(\gamma)} \right] \beta \right\}$$
(2.12)

выражений Путем минимизации ЭТИХ по отношению вариационных параметров, получаем энергии поляронных и биполяронных состояний, которые образуют дискретные энергетические уровни в запрещенной зоне купратов. С использованием значений параметров, входящих в уравнения (2.11) и (2.12), нами вычислены энергии основных состояний больших поляронов и биполяронов. Проведенные расчеты показывают, что состояния (би)поляронов большого и малого радиусов разделены очень высокими потенциальными барьерами (высоты которых оказались приблизительно порядка 20-30 эВ при ε_{∞} =4). Используя уравнения (2.11) и (2.12) определяем энергии связей большого полярона и биполярона при различных значениях ε_{∞} и η из следующих соотношений:

$$E_p = \left| E_p^{min}(\beta) \right| \tag{2.13}$$

И

$$E_{bB} = \left| E_B^{min}(\beta, \gamma) - 2E_p^{min}(\beta) \right| \tag{2.14}$$

Теперь вычисляем эти основные параметры больших поляронов и биполяронов в легированных лантановых купратах. При низкой температуре кристаллические решетки лантановых купратов LSCO и LBCO являются $a_0 \simeq 5.4$ Å. орторомбическими решетки параметрами Согласно спектроскопическим данным энергия Ферми нелегированных купратов составляет величину порядка $E_F \simeq 7$ эВ [82;с.137-176. 83;с.950-953]. Для того, определить значение константы короткодействующей чтобы дырочнофононной связи g_s , оценим константы деформационного потенциала дырки в этих системах из следующего соотношения [5;с.640. 84;с.491]

$$E_d = \frac{2}{3}E_F {(2.15)}$$

Для купратных соединений типичные значения других параметров являются равными следующим параметрам: $m^* = m_e$ (где m_e масса свободного электрона) [38;c.897-928], ε_{∞} =3-5 [81;c.6575-6593. 85;c.2387-2388], K=1.4·10¹² $\partial \mu/c M^2$ [86;c.56-66] и Z=1. Вычисленные значения E_p и E_{bB} при различных значениях ε_{∞} и η приведены в таблицах 2.1 и 2.2.

Таблица 2.1 Вычисленные значения параметров больших поляронов и биполяронов в 3D купратах при различных ε_{∞} и η значениях [78,87]

η	$\epsilon_{\infty} = 3$		$arepsilon_{\infty}\!\!=\!\!4$		$arepsilon_{\infty}\!\!=\!\!5$	
	$E_p^{min}(\beta)$	$E_B^{min}(\beta,\gamma)$	$E_p^{min}(\beta)$	$E_B^{min}(\beta,\gamma)$	$E_p^{min}(\beta)$	$E_B^{min}(\beta,\gamma)$
0.00	-0.150946	-0.382865	-0.0843231	-0.212482	-0.537482	-0.134941
0.02	-0.144887	-0.357026	-0.0809509	-0.198269	-0.0516031	-0.125959
0.04	-0.138957	-0.332205	-0.0776488	-0.1846	-0.0495024	-0.117315
0.06	-0.133513	-0.30839	-0.0744168	-0.17147	-0.047446	-0.109008
0.08	-0.127476	-0.285568	-0.0712548	-0.158875	-0.0454339	-0.101034
0.10	-0.121927	-0.263726	-0.0681624	-0.146809	-0.0434661	-0.0933911
0.12	-0.116503	-0.242853	-0.0651405	-0.135265	-0.0415424	-0.0860753
0.14	-0.111207	-0.222936	-0.062188	-0.12424	-0.0396629	-0.0790839

Таблица 2.2 Вычисленные значения энергии связей больших поляронов и биполяронов в 3D купратах при различных ε_{∞} и η значениях [78,87]

η	$\varepsilon_{\infty} = 3$		$\epsilon_{\infty}\!\!=\!\!4$		$arepsilon_{\infty} = 5$	
	E_p	E_{bB}	E_p	E_{bB}	E_p	E_{bB}
0.00	0.150946	0.080973	0.0843231	0.043836	0.537482	0.027445
0.02	0.144887	0.067252	0.0809509	0.036367	0.0516031	0.022753
0.04	0.138957	0.054291	0.0776488	0.029302	0.0495024	0.01831
0.06	0.133513	0.042084	0.0744168	0.022636	0.047446	0.014116
0.08	0.127476	0.030616	0.0712548	0.016365	0.0454339	0.010166
0.10	0.121927	0.019872	0.0681624	0.010484	0.0434661	0.006459
0.12	0.116503	0.009847	0.0651405	0.004984	0.0415424	0.00299
0.14	0.111207	0.000522	0.062188	0.000136	0.0396629	0.0000242

Из таблиц 2.1 и 2.2 видно, что малые значения параметров ε_{∞} и η являются благоприятными для образования больших поляронов и биполяронов. Однако, с увеличением величины ε_{∞} и η энергии связей таких поляронов и биполяронов быстро уменьшаются. Отличительными особенностями купратных соединений являются их очень большие статические диэлектрические проницаемости $\varepsilon_0 \simeq 22\text{-}105$ [38;c.897-928. 81;c.6575-6593. 88;c.975-976] по сравнению с высокочастотными проницаемостями $\varepsilon_{\infty} = 2\text{-}5$ [81;c.6575-6593. 85;c.2387-2388]. Поэтому ситуации в этих материалах с η =0.02-0.08 являются очень благоприятными для образования больших поляронов и биполяронов.

§2.5. Низкоэнергетические электронные структуры легированных купратов и их экспериментальные подтверждения

Из вышеизложенного следует, что диэлектрическое поведение нелегированных купратов характеризуется относительно большими значениями энергетической щели $E_g = \Delta_{CT} \simeq 1.5 - 2.0$ эВ в их спектрах возбуждения. В экспериментальных исследованиях обнаружено [20;с.1039-1263. 38;с.897-928. 69;с.473-541. 89;с.2124-2127. 90;с.094504], что легированные купраты в отличие от их нелегированных соединений характеризуются довольно сложными электронными структурами и новой диэлектрической щелью $\varepsilon_g << E_g$ примерно в десять раз меньше, чем E_g . При этом электронные структуры купратов изменяются драматически с легированием и образуются новые внутрищелевые электронные состояния, В результате спектральный вес электронных возбуждений переносится к низкоэнергетическим возбуждениям [20;с.1039-1263. 91;с.28-33]. Нами показано, что такие драматические изменения электронной структуры легированных купратов связаны с образованием внутрищелевых локализованных электронных состояний И низкоэнергетических щелей ($\varepsilon_g << E_g$) в спектрах возбуждения легированных купратов при сильных взаимодействиях дырочных носителей с акустическими

и оптическими колебаниями решетки, а также при их относительно слабых взаимодействиях с примесями. Энергия образования $\left|E_p^{min}(\beta)\right|=E_p$ больших поляронов будет проявляться в спектрах возбуждения легированных купратов как новая энергетическая щель для возбуждения дырочного носителя из поляронного состояния в свободное состояние дырки в валентной зоне кислорода. В то время, как энергия образования больших биполяронов $E_B^{min}(eta,\gamma)$ или $\left|E_B^{min}(eta,\gamma)\right|>E_p$ будет проявляться как вторая большая энергетическая щель в спектрах возбуждения этих материалов. Кроме того, появление в спектрах возбуждения легированных купратов ожидается еще другая довольно малая или низкоэнергетическая щель E_{bB} для возбуждения автолокализованной дырки из их связанных биполяронных состояний в поляронное состояние. Такие щелевые особенности экспериментально наблюдались в слаболегированных и недолегированных купратах, в которых низкоэнергетические щели, экспериментально наблюдаемые при энергиях 0.04-0.06 эВ [92;с.66-70. 93;с.61-122. 94;с.158-161] и 0.08-0.15 эВ [69;с.473-541. 93;с.61-122. 95;с.164-168], могут быть связаны соответственно с энергией связи (или диссоциации) E_p и E_{bB} больших поляронов и биполяронов. Из этих экспериментальных наблюдений следует, что легированные купраты имеют низкоэнергетические электронные структуры (с диэлектрическими щелями $\varepsilon_g \simeq$ 0.1 - 0.2эB), которые полностью отличаются от высокоэнергетических электронных структур нелегированных купратов (с диэлектрическими щелями $E_g = \Delta_{CT} \approx 1.5 - 2.0$ 9B). Экспериментальные результаты свидетельствуют существовании локализованных внутрищелевых электронных состояний и хорошо определенной полупроводниковой щели в спектре возбуждения слабо легированного купрата LSCO (x=0.02) [94;c.158-161], где наблюдаемая энергетическая щель имеет значение 0.04 эВ и не зависит от температуры до 160 К. Значение этой маленькой щели близко к энергии связи больших биполяронов, приведенных в таблице 2.2 для ε_{∞} =3 и η =0.06.

Как было выше сказано, при b_s <0 мелкие водородоподобные состояния могут образоваться в LSCO, LBCO и других легированных купратах. Учитывая, что зонная масса дырочных носителей в легированных купратах, определенная экспериментально, составляет $m^*\approx(1.0\text{-}1.4)m_e$ [38;c.897-928. 90;c.094504], положим $m^*\approx 1m_e$. Тогда, полагая, что $\varepsilon_0\approx 25$ [38;c.897-928], получаем из уравнения (2.9) $E_I\approx 0.022$ эВ. Это значение E_I также близко к экспериментальному значению энергии связи акцепторных примесных центров $E_I\approx 0.021$ эВ в LSCO [38;c.897-928]. Для иллюстрации вышесказанного низкоэнергетическая электронная структура легированных купратов показана на рис.2.5.

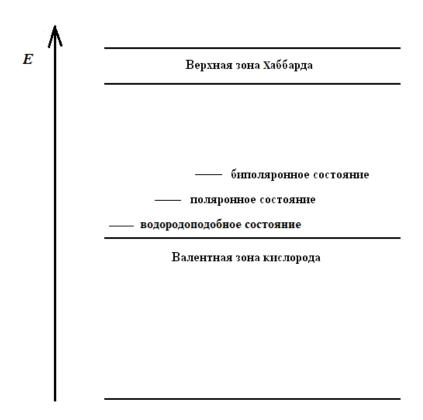


Рис.2.5. Локализованные уровни (введенные примесями, большими поляронами и биполяронами) находящиеся между дном верхней зоны Хаббарда и потолком валентной зоны кислорода

Выводы

- 1. Вычислены энергии основных состояний дырок, появляющихся в валентной зоне кислорода купратных соединений при дырочном легировании этих материалов, и определены возможные энергетические уровни водородоподобных примесей, больших поляронов и биполяронов в диэлектрической щели (т.е. запрещенной зоне) нелегированных купратов.
- 2. Определены энергии связей больших (би)поляронов и энергия образования больших биполяронов как низкоэнергетические щели в спектрах одночастичного возбуждения в дырочно-легированных купратах.
- 3. Показано, что низкоэнергетические электронные структуры дырочнолегированных купратов фундаментально отличаются от высокоэнергетических электронных структур нелегированных купратов, которые являются моттовскими диэлектриками типа переноса заряда.
- 4. Установлено, что образованные локализованные примесные, поляронные и биполяронные состояния внутри запрещенной зоны купратных соединений при их дырочном легировании являются ответственными за новые низкоэнергетические электронные структуры дырочнолегированных купратов, которые наблюдаются во многих экспериментах.

ГЛАВА III. ПРИМЕНИМОСТИ МОТТОВСКОГО МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК ПЕРЕХОДА К ЛЕГИРОВАННЫМ КУПРАТАМ

Сильная корреляция носителей (т.е. сильное кулоновское отталкивание двух электронов или дырок на одном и том же атоме кристаллической решетки) вызывает локализации носителей тока и моттовского металл-диэлектрик перехода в нелегированных купратах, которые являются диэлектриками типа Мотта-Хаббарда, называемыми также диэлектриками типа переноса заряда. Однако, не очевидно, применима ли также концепция такого рода сильной корреляции носителей, приводящей к металл-диэлектрик переходу типа Мотта-Хаббарда, в легированных купратах.

В этой главе будет показано, что вопрос о применимости концепции металл-диэлектрик перехода легированным моттовского К быть решен более материалам может на основании адекватных реалистических подходов. При ЭТОМ В качестве основного рассматриваются специфические особенности моттовских металл-диэлектрик переходов В легированных купратах В условиях существования водородоподобных примесных центров и сильных корреляций носителей в узких примесных зонах. Поэтому в следующих разделах рассмотрим процессы водородоподобных упорядочения примесных центров легированных купратах, приводящих к образованию их сверхрешетки и узких энергетических зон между валентной зоной кислорода и зоной проводимости (т.е. верхной зоной Хаббарда), а затем опишем эффекты электронной корреляции в узких примесных зонах и покажем, в каких случаях она важна, а в каких нет. Представления о примесных зонах образующегося выше потолка валентной зоны кислорода в дырочно-легированных купратах служат в качестве отправных при исследовании специфических особенностей моттовских металлдиэлектрик переходов в этих системах.

Здесь проанализированы следующие важные аспекты данной проблемы: 1) важная роль эффекта экранирования заряда примесного иона одним из двух

дырок, локализованных на водородоподобном примесном центре; 2) процессы разных типов упорядочения водородоподобных примесных центров, приводящие к образованию их различных сверхрешеток и энергетических зон в легированных купратах; 3) новый и универсальный критерий моттовского металл-диэлектрик перехода и 4) пределы применимости моттовских металл-диэлектрик переходов в легированных купратах.

§3.1. Образование энергетической зоны водородоподобных примесей в дырочно-легированных купратах

Как показал вышеприведенный теоретический анализ, дырочные носители в легированных купратах, локализованные возле легирующих примесей, имеющих большие радиусы, образуют водородоподобные примесные центры. Упорядочение таких примесей c захваченными дырками является ответственным за образование энергетической зоны примесей в запрещенной зоне купратов выше потолка валентной зоны кислорода, и эти реальности физических процессов, следуют учесть описании протекающих легированных купратах. Развитие теоретических представлений о примесной зоне водородоподобных атомов в легированных купратах для изучения применимости моттовского металл-диэлектрик перехода в этих системах является одной из основных целей данной работы [96;с.49-55. 97;с.66-71. 98;c.116. 99;c.255-256. 100;c.129-134. 101;c.129].

Во многих экспериментах неоднородные распределения носителей заряда были обнаружены в легированных купратах (см. [102;с.880-881]). При этом неоднородное пространственное распределение водородоподобных центров приводит к их сегрегации в насыщенные и обедненные водородоподобными примесями области в легированных купратах. Локальная неоднородность и конкуренция между кинетической энергией притягательными носитель-дефект (примесь)-фононными взаимодействиями создают наномасштабные самоорганизованные структуры (например, различные виды сверхрешетки

водородоподобных центров). В неоднородно легированных купратах случайное или неравномерное пространственное распределение легирующих примесей приводит к различным явлениям их упорядочения с образованием различных сверхрешеток водородоподобных примесных центров и узких примесных зон, которые играют важную роль в моттовских металл-диэлектрик переходах. Предполагается, что водородоподобные примесные центры при упорядочениях образуют сверхрешетки с константой решетки a_I и координационным числом z. При этом упорядочение таких примесных центров в богатых и обедненных примесями областях может приводить к образованию простой кубической (с z=6), объёмноцентрированной кубической (с z=8) и гранецентрированной кубической (с z=12) сверхрешеток и образованию различных примесных зон в запрещенной зоне купратов. Ширины этих примесных зон могут быть определены в приближении сильной связи из соотношения

$$W_I = 2zJ, (3.1)$$

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

Для случая водородоподобных примесных центров, интеграл перескока в уравнении (3.1) может быть определен как [8;с.368]

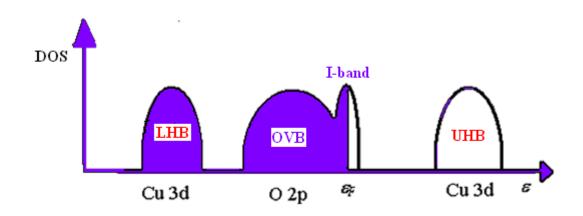
$$J = \frac{e^2 \lambda}{\varepsilon_0} \exp(-\lambda R), \tag{3.2}$$

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

С увеличением расстояния R, примесная зона непрерывно сужается и, наконец, превращается в дискретные примесные уровни при $R >> \lambda$. В этом случае дырочные носители локализованы на примесных узлах или заключены в потенциальные ямы на примесных узлах, и система, состоящая из

водородоподобных примесных центров, превращается в диэлектрик. Поэтому, проводимость осуществляется в узкой примесной зоне путем перескока дырочного носителя из одного примесного узла к другому примесному узлу. Когда число примесных центров увеличивается, перекрывание примесных состояний увеличивается, причем увеличивается ширина примесной зоны W_I и процесс переноса дырочных носителей в достаточно уширенной примесной зоне становится их зонным (или металло-подобным) движением. Определение критической концентрации дырочных носителей (т.е. водородоподобных примесных центров), при которой такой переход из перескока-подобного к металло-подобному процессу переноса дырок по примесной зоне в легированных купратах является очень сложной задачей, которая в настоящее время не решена еще полностью.

При низких уровнях легирования купратов уровень Ферми находится вблизи центра энергетической щели переноса заряда Δ_{CT} . С увеличением уровня легирования примесная зона образуется над потолком валентной зоны кислорода, и уровень Ферми смещается к примесной зоне (Рис.3.1.) аналогично, как уровень Ферми в p-тип полупроводниках смещается к потолку их валентной зоны.



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

Рис.3.1. Схематическая зонная структура как функция энергии ε в недолегированных купратах

§3.2. Точный метод определения энергии кулоновского отталкивания двух дырок локализованных на водородоподобном примесном центре

Как уже было сказано ранее (см. Гл.1), неадекватность обычной одноэлектронной зонной теории связана с пренебрежением межэлектронным взаимодействием, учет которого может приводить к кардинальной перестройке электронной структуры твердого тела и расщепить частично заполненные зоны проводимости на две зоны, называемые как верхняя (пустая) и нижняя (заполненная) зоны Хаббарда. Известно, что внутриатомная кулоновская энергия отталкивания между двумя электронами называется энергией Хаббарда и обозначается как U. Энергия Хаббарда является очень важной энергетической величиной, характеризующей диэлектрическое поведение твердого тела, в частности, диэлектрическое поведение системы с узкой примесной зоной (которая образуется между зоной проводимости и валентной зоной). При этом применимость моттовского металл-диэлектрик перехода дырочнолегированных купратах, вызванного сильной корреляцией носителей, зависит от величины энергии кулоновского отталкивания U двух дырок, находящихся на одном и том же примесном центре, а также от ширины примесной зоны W_I . В этих материалах модель Мотта-Хаббарда может быть использована для кристаллической системы одно-дырочных примесных центров, каждый из которых описывается волновой функцией $\Psi_I(\vec{r})$, убывающей как $exp(-r/a_H)$ для больших r, причем расстояние a_l от одного примесного центра до другого достаточно большое, чтобы приближение сильной связи было применимо. Когда модель Мотта-Хаббарда применяется к узкой зоне водородоподобных примесных атомов, определение наиболее точного значения U является очень важным для уяснения пределов применимости моттовского металл-диэлектрик перехода к легированным купратным материалам.

В ранее проведенных теоретических исследованиях моттовского металл-диэлектрик перехода в нелегированных твердых телах и легированных

полупроводниках (см. [8;с.368. 34;с.227]) значения U были определены без учета важного эффекта экранирования заряда водородоподобного иона решетки одним из двух электронов, находящихся на этом ионе.

Теперь будет рассмотрен вопрос об оценке наиболее точной величины энергии кулоновского отталкивания U между двумя дырками, находящимися на одном и том же водородоподобном примесном центре [103;c.169-178]. При этом будет показано, что эффект экранирования заряда водородоподобного акцепторного примесного центра одним из двух дырочных носителей, находящихся в этом примесном центре, приводит к уменьшению заряда Z примесного иона. В результате такая водородоподобная примесь будет иметь некий эффективный заряд Z^* и гамильтониан двухдырочного водородоподобного примесного центра имеет следующий вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \nabla_2^2 - \frac{Z^* e^2}{\varepsilon_0} \left[\frac{1}{|\vec{r}_1|} + \frac{1}{|\vec{r}_2|} \right] + \frac{e^2}{\varepsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|},\tag{3.3}$$

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

Далее энергия основного состояния водородоподобного примесного центра вычисляется с использованием пробной двухдырочной волновой функции $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$, содержащей вариационный параметр Z^* . Тогда энергия основного состояния рассматриваемой системы зависит только от Z^* и определяется из выражения

$$E(Z^*) = \iint \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) H \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3 r_1 d^3 r_2$$
 (3.4)

Для вычисления интеграла в (3.4), пробную волновую функцию можно выбрать в простой форме (без учета корреляции) в сферических координатах

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_I(\vec{r}_1)\psi_I(\vec{r}_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z^*}{a_H}\right)^3 exp\left[-\frac{Z^*(r_1 + r_2)}{a_H}\right],\tag{3.5}$$

где $a_H=\hbar^2 \varepsilon_0/m^*e^2$ - боровский радиус водородоподобного примесного центра, $m^*=m_1=m_2$ - эффективная масса дырочного носителя в легированном купрате.

После вычисления интегралов в (3.4) с использованием пробной волновой функции (3.5) и последующей минимизацией функционала $E(Z^*)$ по отношению Z^* , находим

$$Z^* = Z - \frac{5}{16}. (3.6)$$

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

$$U = \iint \psi_I^2(\vec{r}_1) \frac{e^2}{\varepsilon_0 |\vec{r}_{12}|} \psi_I^2(\vec{r}_2) d^3 r_1 d^3 r_2 = \frac{5}{4} \left(Z - \frac{5}{16} \right) E_I^H, \tag{3.7}$$

где $E_I^H = e^2/2 \, \varepsilon_0 a_H$ - энергия ионизации однодырочного водородоподобного примесного центра.

§3.3. Новые и универсальные критерии моттовских металл-диэлектрик переходов в легированных твердых телах

Теперь целесообразно найти адекватные критерии моттовских металлдиэлектрик переходов в легированных купратах. Условия локализации и делокализации носителей тока в твердых телах, позволяющие определить такие критерии моттовских металл-диэлектрик переходов, могут быть получены с использованием принципа неопределенности [104; c.163-164. 105; c.422. 106; c.423. 107; c.936. 108; c.704. 109; c.439. 110; c.3-6]

$$\Delta E \Delta t \ge \frac{\hbar}{2} \tag{3.8}$$

где ΔE и Δt , соответственно, неопределенности в полной энергии и времени. Для того, чтобы определить локализацию носителей тока Δx мы выражаем Δt через $\Delta t = \frac{\Delta x}{v} = \frac{\Delta x \cdot m}{p}$, тогда имеем $\Delta E \cdot \frac{\Delta x \cdot m}{p} \simeq \frac{\hbar}{2}$ и отсюда получаем выражение $\Delta x \simeq \frac{\hbar}{2m} \cdot p \cdot \frac{1}{\Delta E}$. С учетом $p = \hbar \cdot k$ получаем $\Delta x \simeq \frac{\hbar^2 \cdot k}{2m} \cdot \frac{1}{\Delta E}$, потом правую сторону неравенства умножаем и делим на Δk , при этом неопределенность в волновом векторе не превышает самого значения волнового вектора k в связанных системах, т.е. $\Delta k \leq k$ [111;c.496] и в итоге получаем следующую выражению [97;c.66-71.103;c.169-178]

$$\Delta x \cdot \Delta E \ge \frac{\hbar^2 k \, \Delta k}{2m^*} \cdot \frac{1}{\Delta k} \ge \frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*} \cdot \frac{1}{\Delta k},\tag{3.9}$$

где Δk - неопределенность в волновом векторе носителя.

Как показано в работах [111;с.496. 112;с.412. 113;с.288. 114;с.447] для гармонического осциллятора средняя полная энергия равна E сумме ее средней кинетической \overline{K} и средней потенциальной \overline{V} энергии, $\overline{E}=\overline{K}+\overline{V}$, причем, средняя кинетическая энергия равна средней потенциальной, т.е. $\overline{K}=\overline{V}$. Поэтому $\Delta E=\Delta \overline{K}+\Delta \overline{V}$ и можно написать $\Delta E=2\Delta \overline{K}=2\Delta \overline{V}$, т.е. полная энергия в два раза превосходит каждую из этих энергий. В нашем случае мы можем рассматривать движение носителя как гармонический осциллятор в окрестности точки минимума потенциальной энергии. Тогда уравнение (3.9) можно в виде

$$\Delta x \cdot \Delta \bar{V} \ge \frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*} \cdot \frac{1}{2\Delta k} \tag{3.10}$$

Как видно из правой части соотношения (3.10), записанное выражение $\frac{\hbar^2(\Delta k)^2}{2m^*}$ представляет неопределенность в кинетических энергиях носителей в их энергетической зоне.

Например, в примесной зоне неопределенность в кинетической энергии носителя можно определить как

$$\frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m^*} \simeq \frac{W_I}{2} \tag{3.11}$$

Тогда как неопределенность в волновом векторе носителя будет определена приблизительно как

$$\Delta k \simeq \frac{1}{a_I} \tag{3.12}$$

Учитывая соотношения (3.11) и (3.12), выражение (3.10) может быть переписано в виде

$$\Delta x \cdot \Delta \bar{V} \simeq \frac{W_I a_I}{4} \tag{3.13}$$

С другой стороны, неопределенность в потенциальной энергии носителя $\Delta \bar{V}$, находящегося на водородоподобном примесном центре, будет порядка энергии Хаббарда U, тогда как неопределенность в координате этого носителя будет порядка боровского радиуса водородоподобного примесного центра a_H . В этом случае условие локализации дырочного носителя можно записать в виде

$$U \cdot a_H \gtrsim \frac{W_I a_I}{4} \tag{3.14}$$

или в более удобном для дальнейшего анализа виде

$$\frac{W_I}{U} \lesssim \frac{4a_H}{a_I} \tag{3.15}$$

Это условие является очень важным фундаментальным результатом и позволяет найти более точные количественные критерии моттовского металл-диэлектрик перехода в легированных материалах. Из (3.15) следует, что моттовский металл-диэлектрик переход управляется отношениями W/U и a_H/a_I . Полученное соотношение (3.15) является еще одним и более явным доказательством металл-диэлектрик перехода, который согласно высказанной Моттом гипотезе зависит от двух параметров, характеризующих

водородоподобные атомы и их кристаллические решетки. Согласно гипотезе Мотта простая кубическая решетка водородоподобных атомов при температуре T=0 будет металлом лишь в том случае, если постоянная решетки меньше некоторого критического значения a_c , которое равно [1;c.184. 3;c.792]

$$a_c \approx 4a_H \tag{3.16}$$

Таким образом, соотношение (3.15) является убедительным доказательством критерия моттовского металл-диэлектрик перехода в твердом теле, который, в частности, в легированных материалах происходит при выполнении следующих двух условий:

$$\frac{W_l}{U} \lesssim 1 \tag{3.17}$$

И

$$a_I \gtrsim 4a_H \tag{3.18}$$

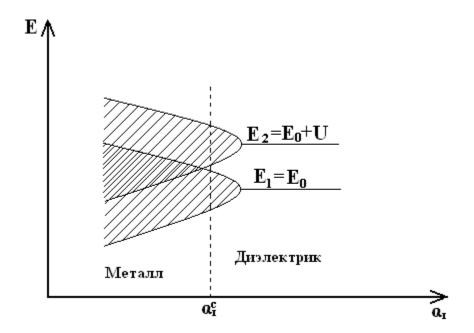
Кроме того, условие (3.15) является универсальным критерием моттовского металл-диэлектрик перехода, применимого не только для кубической решетки (с z=6) водородоподобных атомов или примесных центров как предполагал Мотт, но и других типов кристаллических решеток (с z=8 и z=12) водородоподобных атомов и примесных центров, которое будет рассмотрено ниже.

§3.4. Применимости моттовского металл-диэлектрик перехода в легированных купратах

Теперь исследуем пределы применимости моттовского металл-диэлектрик перехода в легированных купратных материалах, где в узких энергетических зонах водородоподобных примесей нельзя пренебрегать сильной электронной корреляций (т.е. кулоновским взаимодействием электронов или дырок),

которая становится существенной и резко изменяет зонную структуру, полученную на основе простого (одноэлектронного) приближения сильной связи. Когда постоянная примесной сверхрешетки a_I становится очень большой (т.е. при $a_I \to \infty$), примесная зона сужается и превращается в отдельный (дискретный) примесный уровень (см. рис.3.2). В этом предельном случае дырка локализована на акцепторном центре и металлическая каждая проводимость уже невозможна, хотя, согласно обычной одноэлектронной зонной модели, мы все еще имеем полузаполненную узкую зону. Это означает, что приближение одноэлектронной зонной модели рушится для узких примесных зон в легированных материалах (в частности, купратах). Таким образом, при $a_I \to \infty$ энергия, необходимая для связывания одного дырочного носителя на водородоподобном примесном центре, равна $E_1 = E_I^H = E_0$, тогда как энергия, необходимая для связывания второго дырочного носителя на том же примесном центре будет равна $E_2 = E_0 + U$, т.е. на каждом узле примесной сверхрешетки имеется два энергетических уровня E_1 и E_2 . При уменьшении a_1 эти два примесных состояния вследствие взаимодействия между дырочными носителями расщепляются в две зоны Хаббарда (рис.3.2).

Согласно сформулированному выше универсальному критерию (3.15), легированный купратный материал будет диэлектриком, если ширина примесной зоны W_I в обычной модели безэлектронной корреляции меньше, чем энергия Хаббарда U. Однако, при некотором критическом значении $a_I = a_I^c$ энергетическая щель (называемая моттовской щелью) между двумя примесными зонами исчезает и происходит переход диэлектрик-металл, который называется переходом Мотта.



При $a_I < a_I^c$ легированный материал является металлом, но при $a_I > a_I^c$ он является диэлектриком моттовского типа.

Рис. 3.2. Энергетические зоны водородоподобных примесных атомов в зависимости от периода примесной сверхрешетки a_I

Зная энергию Хаббарда U и ширину примесной зоны W_I можно найти критерий моттовского металл-диэлектрик перехода в легированных купратах из условия (3.15). Для случая водородоподобных примесных центров, значение U при Z=1 определяется из (3.7) и равно

$$U = \frac{55}{64} E_I^H \tag{3.19}$$

В то время, как величину ширины примесной зоны W_I можно определить из следующего выражения [8;с.368]

$$W_I = 2z \frac{e^2}{\varepsilon_0 a_H} exp \left(-\lambda R\right) \tag{3.20}$$

где $\lambda = a_H^{-1}$.

Как было сказано выше, при $a_I = 4a_H$, получаем из соотношения (3.15) известную картину о металл-диэлектрик переходе, описываемую критерием Мотта $W_I/U \simeq 1$ (см. условие (3.17)).

Если будем полагать $a_I \approx 3.4783 a_H$, то находим

$$\frac{W_I}{U} = 1.15,$$
 (3.21)

который известен как критерий Хаббарда для металл-диэлектрик перехода.

Как было описано во второй главе, примеси имеющие радиусы больше, чем радиусы ионов основной решетки, характеризуются отрицательными деформационными потенциалами (E_{dD} <0 и b_s <0) и могут образовать водородоподобные акцепторные центры в LSCO и LBCO, и модель Хаббарда, основанная на сильной электронной корреляции (U> W_I), применима к этим материалам. Тогда критерий моттовского металл-диэлектрик перехода можно записать в виде

$$\frac{W_I}{U} \simeq \frac{64z}{55} \exp\left(-\frac{R}{a_H}\right) = \frac{4a_H}{a_I} \tag{3.22}$$

Предположим, что водородоподобные примесные центры при их упорядочении образуют простую кубическую (z=6), объемно-центрированную кубическую (z=8) и гранецентрированную кубическую (z=12) сверхрешетки, постоянные решетки которых соответственно равны $a_I = R$, $a_I = 2\,R/\sqrt{3}$ и $a_I = \sqrt{2}R$. При этом плотности дырочных носителей, соответствующие таким сверхрешеткам водородоподобных примесных центров, будут равны

$$n = \frac{1}{a_I^3}$$
 для простой кубической сверхрешетки (3.23)

$$n = \frac{2}{a^3}$$
 для объемно-центрированной кубической сверхрешетки (3.24)

$$n = \frac{4}{a_I^3}$$
 для гранецентрированной кубической сверхрешетки (3.25)

Отсюда следует, что расстояния между ближайшими примесными центрами будут равны

$$R = \frac{1}{n^{1/3}}$$
 для z=6 (3.26)

$$R = \frac{\sqrt{3}}{(4n)^{1/3}}$$
 для z=8 (3.27)

$$R = \frac{2^{1/6}}{n^{1/3}}$$
 для z=12 (3.28)

Таким образом, уравнение (3.22) можно записать как

$$\frac{64z}{55n^{1/3}a_H}exp\left[\frac{-1}{n^{1/3}a_H}\right] = 1$$
 для z=6 (3.29)

$$\frac{64\sqrt[3]{2}z}{55n^{1/3}a_H} exp\left[\frac{-\sqrt{3}}{\sqrt[3]{4}n^{1/3}a_H}\right] = 1$$
 для z=8 (3.30)

$$\frac{64\sqrt[3]{4}z}{55n^{1/3}a_H}exp\left[\frac{-2^{1/6}}{n^{1/3}a_H}\right] = 1$$
 для z=12 (3.31)

После решения этих уравнений относительно $n^{1/3}a_H$ получаем следующие критерии моттовских металл-диэлектрик переходов:

$$n^{1/3}a_H \simeq 0.3265$$
 для z=6 (3.32)

$$n^{1/3}a_H \simeq 0.2968$$
 для z=8 (3.33)

$$n^{1/3}a_H \simeq 0.2504$$
 для z=12 (3.34)

Если выбираем $m^*=m_e$ и $\varepsilon_0=30$, то находим $a_H\simeq 15.87$ Å для LSCO, так что моттовские металл-диэлектрик переходы в этих материалах будут происходить при следующих концентрациях дырочных носителей

$$x_c = n_c/n_a \simeq 0.00075 - 0.00166,$$
 (3.35)

где n_a =1/ V_a - плотность атомов кристаллической решетки, V_a - объем приходящийся на формульную единицу CuO_2 в купратах (для LSCO V_a =190 ų). Эти значения x_c намного меньше, чем значение x_c =0.02, при котором разрушение АФ порядка наблюдается в LSCO [38;c.897-928]. Однако, примесь большого радиуса с E_{dD} <0 и большой полярон могут также образовать водородоподобный примесный центр в LSCO. Как было отмечено в главе II, примесь большого радиуса (с E_{dD} <0 или b_s <0) и автолокализованная дырка (большой дырочный полярон) отталкивают друг друга при близких расстояниях, но они притягивают друг друга на больших расстояниях. Поэтому, водородоподобное состояние такого большого полярона в LSCO имеет боровский радиус, определяемый из выражения

$$a_H = 0.529\varepsilon_0 \frac{m_e}{m_p} \mathring{A} \tag{3.36}$$

Если теперь выбираем $m_p=2.1m_e$ и $\varepsilon_0=28$, то находим $a_H\simeq7.06$ Å.

В этом случае моттовские металл-диэлектрик переходы будут происходить при x_c =0.0188 (для z=6) и x_c =0.0141 (для z=8), которые являются максимальными и минимальными значениями x_c . Эти значения x_c являются близкими к экспериментально определенным значениям x_c =0.02, при которых антиферромагнитный порядок разрушается в LSCO [20;c.1039-1263. 38;c.897-928. 115;c.539-564].

Выводы

1. Показано, что в дырочно-легированных купратах примеси, имеющие большие ионные радиусы по сравнению с радиусом ионов основной решетки, характеризуются отрицательными деформационными потенциалами (E_{dD} <0) и образуют водородоподобные примесные (т.е. акцепторные) центры. Процессы упорядочения таких примесных центров в дырочно-легированных купратах приводят к образованию их различных

- сверхрешеток и узких примесных зон между верхней зоной Хаббарда (которая является зоной проводимости в нелегированных купратах-диэлектриках типа Мотта-Хаббарда, называемые также диэлектриками переноса заряда) и валентной зоной кислорода.
- 2. Предложен точный метод определения энергии кулоновского отталкивания между двумя дырками, находящимися на одном и том же водородоподобном атоме или примесном центре, учитывающий эффект экранирования заряда водородоподобного иона или примесного иона одним из этих дырок.
- 3. Сформулированы и получены новые и универсальные критерии моттовского металл-диэлектрик перехода, применимые для изучения возможности таких металл-диэлектрик переходов, вызванных сильными электронными корреляциями (т.е. сильным кулоновским отталкиванием двух электронов или дырок, находящихся на одном и том же водородоподобном ионе или примесном центре) как в нелегированных, так и легированных твердых телах.
- 4. Установлены пределы применимости и специфические особенности моттовских металл-диэлектрик переходов в легированных купратах в условиях существования водородоподобных примесных центров и сильных электронных корреляций в узких примесных зонах.

ГЛАВА IV. НОВЫЕ МЕТАЛЛ- ДИЭЛЕКТРИК ПЕРЕХОДЫ И НАНОМАСШТАБНЫЕ РАЗДЕЛЕНИЯ ФАЗ В ДЫРОЧНО-ЛЕГИРОВАННЫХ ВТСП - КУПРАТАХ

Дырочно-легированные купратные соединения являются сложными оксидными материалами. В этих материалах явления локализации носителей и металл-диэлектрик переходы очень осложняются многими факторами, такими как неоднородные распределения дырочных носителей заряда не только в дефектных, но и в бездефектных участках кристаллической решетки, а также различные типы упорядочения дырочных носителей зарядов и особенно наиболее важные дырочно-решеточные взаимодействия, приводящие к образованию поляронных состояний, которые часто были проигнорированы в существующих теоретических подходах к проблеме локализации носителей и металл-диэлектрик переходов в легированных купратных ВТСП. Сильные электронные корреляции вызывают локализацию носителей и моттовского металл-диэлектрик перехода только в некоторых дефектных участках кристаллической решетки, содержащих примесные ионы больших радиусов Гл.III) легированных купратов. Однако, в бездефектных участках кристаллической решетки легированных купратов другие физические процессы будут ответственными за локализации дырочных носителей, металл-диэлектрик перехода и наномасштабное разделение диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз.

В дырочно легированных купратах поляронные эффекты играют важную роль в локализации дырочных носителей и новых металл-диэлектрик переходов, а также в наномасштабных разделениях диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз [87;с.322-335. 116;с.6-15. 117;с.187-196. 118;с.219-230. 119;с.282. 120;с.195-199. 121;с.42-43. 122;с.215].

§4.1. Локализации дырочных носителей в деформируемой решетке легированных ВТСП-купратов

Основная проблема легированных купратов состоит в том, что их диэлектрические, металлические и сверхпроводящие свойства зависят от природы и типа носителей заряда, введенных в кристаллическую решетку материнских купратов, которые были особенно предметом продолжительного спора после открытия легированных ВТСП-купратов и приписывались либо некоторым гипотетическим квазичастицам (например, холонам [66;с.352] и электрон- или дырка-подобным носителям неизвестной природы [115;с.539-564. 123;c.279-291. 124;c.8576-8595. 125;c.17-85. 126;c.1692-1695] автолокализованным квазичастицам (большой и малым поляронам) [38;с.897-928. 127;с.300]. В процессе дырочного легирования купратных соединений свободные дырки сначала появляются в валентной зоне кислорода, и эти дырочные носители будут взаимодействовать с акустическими и оптическими колебаниями решетки и становиться автолокализованными квазичастицамиполяронами в деформируемой решетке. Наиболее важной отличительной особенностью ВТСП-купратов является то, что они являются типичными поляронными материалами, где дырочно-решеточные взаимодействия будут довольно сильными и необычными. Большая степень ионности купратных соединений $\eta = \varepsilon_{\infty} / \varepsilon_{0} << 1$ усиливает полярное электрон-фононное взаимодействие и тенденции образования поляронов.

Действительно, автолокализации дырок обнаружены уже экспериментально в различных классах твердых тел, в частности щелочногалоидных кристаллах [128; с.264. 129; с.395-413] и легированных купратах [38; с.897-928. 130; с.76-79]. При автолокализации дырок в деформируемой кристаллической решетке легированных купратов энергия их основного состояния всегда уменьшается из-за поляронных эффектов. Это связано с тем, что дырка введенная в кристаллическую решетку полярного материала в процессе легирования взаимодействует с окружающими ионами решетки и

вызывает смещения этих атомов из их равновесных положений, создавая при этом притягательную потенциальную яму, в котором она, наконец, захватывается с образованием локализованного поляронного состояния. Энергия связи дырки в поляронной потенциальной яме связана с понижением полной энергии взаимодействующей системы дырка-кристаллическая решетка.

В легированных купратах локализации дырочных носителей В деформируемой решетки связаны с образованием больших Теоретические [116;c.6-15. 117;c.187-196. 118;c.219-230. 131;c.13628-13631] и экспериментальные [38;с.897-928. 127;с.300. 132;с.2625-2628] исследования показывают, что основными носителями заряда в легированных купратах являются большие поляроны, которые имеют эффективные массы $m_p \simeq (2-3) m_e$ 133;c.721-779] [38;c.897-928. 90;c.094504. И $m_p = (2-5)m_e$ [38;c.897-928. 131;с.13628-13631. 134;с.10049]. Относительно малые энергии связи поляронов $E_p \simeq 0.12$ эВ и $E_p \simeq 0.02$ эВ наблюдались экспериментально соответственно в оптимально легированных и недолегированных ВТСП-купратах [131;с.13628-13631]. Эти и другие эксперименты говорят о том, что основными носителями заряда в легированных купратах являются большие поляроны. В недавних экспериментальных наблюдениях [135; c.52-58. 136; c.10064. 137; c.011008], большие фононные аномалии В недолегированных ВТСП-купратах подтверждают существование сильного дырочно-фононного также взаимодействия, приводящего к сложной картине ионных смещений, связанных с образованием волны зарядовой плотности. Эти фононные аномалии напоминают аномальные эффекты смягчения и уширения фононов, которые вызваны образованием поляронов. Поэтому образование волны зарядовой плотности в легированных купратах является не что иное, как образование полярона в деформируемой решетке. В действительности, волна зарядовой плотности, связанная с искажением решетки является аналогичной поляронной картине.

§4.2. Возможные наномасштабные сверхструктурные упорядочения поляронных носителей и образование поляронных зон в легированных ВТСП-купратах

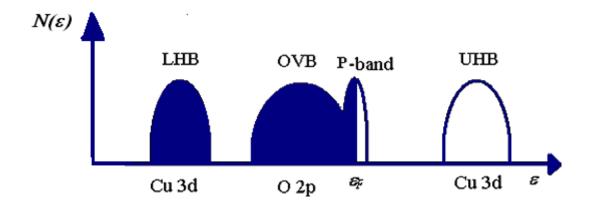
Неоднородные пространственные распределения легирующих примесей и дырочных носителей могут создать области с различными уровнями легирования и с пространственно изменяющейся локальной плотностью этих примесей и носителей заряда.

При этом в легированных ВТСП-купратах локальная неоднородность в распределении дырочных носителей и конкуренция между кинетической энергией дырочных носителей и энергией их притягательного взаимодействия с фононами создают наномасштабные самоорганизованные сверхструктуры в виде чередующихся и пространственно разделенных диэлектрических и металлических/сверхпроводящих полос, которые называются страйпами. Далее анизотропия диэлектрических констант (ε_{∞} и ε_{0}) и малая величина отношения $\eta = \varepsilon_{\infty}/\varepsilon_{0}$ в ВТСП-купратах способствуют таким разделениям фаз. Когда уровень легирования увеличивается в сторону оптимально легированного режима, различные виды упорядочения поляронных носителей в виде трехмерного (3D) динамических (металлических/сверхпроводящих) каркаса статических (диэлектрических) страйпов происходят в слабо легированных купратах и недолегированных ВТСП-купратах. Можно предположить, что большие подобно водородоподобным примесным поляроны центрам различные сверхрешетки с параметром решетки a_p и координационным числом z, причем возможные типы упорядочения поляронных носителей приводят к образованию простой кубической, объемно-центрированной кубической и гранецентрированной кубической сверхрешеток поляронов, соответственно с координационными числами z=6, 8 и 12, и к образованию различных поляронных зон в энергетической щели переноса заряда (т.е. запрещенной зоне) купратов (см. Рис.4.1). В приближении сильной связи ширины

энергетических зон больших поляронов подобно ширине примесной зоны можно определить из выражения

$$W_p = 2zJ_p (4.1)$$

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



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

Рис.4.1. Схематическая зонная структура (плотность состояний $N(\varepsilon)$ как функция энергии ε поляронов) недолегированных купратов [134]

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

§4.3. Критерии новых металл-диэлектрик переходов в легированных полярных материалах

В отличие от моттовского и андерсоновского механизмов локализации носителей, другие механизмы, такие как сильные дырочно-решеточные взаимодействия могут также вызвать локализации носителей и металл-диэлектрик переходы в легированных купратах. Условие локализации или делокализации дырочных поляронных носителей можно определить, используя соотношения неопределенности Гейзенберга (см. (3.8)) [104;c.163-164. 105;c.422. 106;c.423. 107;c.936. 108;c.704. 109;c.439. 110;c.3-6]. При этом соотношение неопределенности (3.10) для автолокализованной дырки можно переписать как

$$\Delta x \cdot \Delta \bar{V} \ge \frac{\hbar^2 (\Delta k)^2}{2m_p} \cdot \frac{1}{2\Delta k},$$
(4.2)

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

В поляронной зоне неопределенность в кинетической энергии поляронного носителя равна энергии Ферми в поляронной зоне и можно записана в виде

$$\frac{\hbar^2(\Delta k)^2}{2m_p} \sim \varepsilon_F$$
 и $\Delta k \sim \frac{1}{a_p}$ (4.3)

где энергия Ферми определяется из выражения

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2m_p},\tag{4.4}$$

n- концентрация поляронов.

Если неопределенность в волновом векторе Δk полярона составляет порядка $1/a_p$, соотношение (4.3) можно написать в виде

$$\Delta \chi \cdot \Delta \bar{V} \simeq \frac{\varepsilon_F a_p}{2} \tag{4.5}$$

Теперь, учитывая, что неопределенность в потенциальной энергии $\Delta \bar{V}$ полярона составляет порядок энергии образования полярона E_p и равна глубине потенциальной ямы, в котором находится автолокализованная дырка, и неопределенность в её координате Δx составляет порядок радиуса полярона R_p , соотношение неопределенности (4.5) можно записать в виде [138;с. 1345–1353]

$$\frac{E_p}{\varepsilon_F} \ge 0.5 \frac{a_p}{R_p} \tag{4.6}$$

Это неравенство является условием локализации поляронных носителей и универсальным критерием новых металл-диэлектрик переходов в твердых телах.

§4.4. Возможности новых металл-диэлектрик переходов и наномасштабного разделения диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в легированных купратах

Многие эксперименты (см. [50;c.L541-L546. 51;c.12018-12021. 52;c.629. 90;с.094504. 102;с.880-881. 139;с.225-260. 140;с.6116-6120]) свидетельствуют о носителей сегрегации дырочных В неоднородных ВТСП-купратах насыщенные и обедневшие дырками области. Когда легирование купратов дырочными носителями увеличивается, тогда процессы упорядочения дырок и вышесказанные сегрегации приводят к образованию динамических (металлических) (диэлектрических) полос/страйпов И статических насыщенных и обедневших дырочными носителями областях, где различные сверхрешетки больших поляронов образуются при неравномерном пространственном распределении таких носителей. Когда насыщенные и области обедневшие недолегированных ВТСП-купратах дырками В

сосуществуют, тогда возникает следующий важный вопрос: каким образом и при каких условиях (т.е. при каких условиях дырочного легирования $n=n_c$) ширина поляронной зоны достигает критического значения, выше которого поляронный транспорт становится металлическим и легированный купратный материал может испытывать фазовый переход из диэлектрического состояния в металлическое состояние? Критерий такого металл-диэлектрик перехода можно написать в виде вышеприведенного соотношения (4.6), из которого с учетом ур.(4.4) получаем

$$x = x_c = \frac{n_c}{n_a} = \frac{1}{3\pi^2 n_a} \left[\frac{4m_p E_p R_p}{\hbar^2 a_p} \right]^{3/2},$$
 (4.7)

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

Для простой кубической (z=6), объемно центрированной кубической (z=8) и гранецентрированной кубической (z=12) сверхрешетки поляронов, параметр решетки неперекрывающихся поляронов можно определить соответственно из соотношений:

$$a_p = 2R_p$$
 для (z=6), (4.8)

$$a_p = \frac{4}{\sqrt{3}} R_p$$
 для (z=8), (4.9)

И

$$a_p = 2\sqrt{2}R_p$$
 для (z=12). (4.10)

Однако, минимальное и максимальное значения безразмерной критической концентрации x_c поляронных носителей определяемых из соотношения (4.7), при которых происходят металл-диэлектрик переходы в дырочно легированных ВТСП-купратах, соответствуют гранецентрированной кубической и простой кубической сверхрешетки поляронов. Поэтому, применяя критерий (4.7) с учетом соотношений (4.8) и (4.10) для новых металл-диэлектрик переходов в 102

случаях простой кубической и гранецентрированной кубической сверхрешетки поляронов, получаем следующие критерии металл-диэлектрик переходов в дырочно легированных купратах:

$$x_{c1} = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3 n_a} \left[2m_p E_p \right]^{3/2} \tag{4.11}$$

И

$$x_{c2} = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3 n_a} \left(\sqrt{2}m_p E_p\right)^{3/2} \tag{4.12}$$

Теперь рассмотрим возможности новых металл-диэлектрик переходов в легированных ВТСП-купратах И вычислим критические значения концентрации поляронных носителей, при которых происходят такие металлдиэлектрик переходы. Согласно экспериментальным данным массы больших поляронов можно взять $m_p=(2.1-2.7)m_e$ в LSCO [38;c.897-928. 90;c.094504. 133;с.721-779] и m_p =(2.0-4.0) m_e в YBCO [38;с.897-928. 134;с.10049]. При этом мы используем теоретические значения E_p =(0.09-0.106) эВ при ε_{∞} =3.5 и η =0.02-0.08~ [78;с.484-494]. Значения $V_a~$ определяются приближенно следующим образом. Параметры решетки орторомбической LSCO могут быть взяты равными $a=b\simeq 5.4$ Å и $c\simeq 13$ Å [64;c.621]. Тогда объем элементарной ячейки LSCO будет составлять величину порядка $380 \ \mathring{A}^3$, тогда как объем приходящий на формульную единицу CuO_2 в этой ячейке будет равен V_a =190 \mathring{A}^3 . Далее параметры решетки YBCO выбираются приблизительно равными $a=b\simeq 4$ Å и $c \approx 12 \text{ Å } [64; c.621]$, так что объем, приходящий на формульную единицу CuO_2 в элементарной ячейке можно взять приблизительно равным V_a =100 \mathring{A}^3 . Тогда мы находим

$$n_a = \frac{1}{V_a} \simeq 0.53 \cdot 10^{22} c M^{-3}$$
 для LSCO (4.13)

И

$$n_a = \frac{1}{V_a} \approx 10^{22} c M^{-3}$$
 для YBCO (4.14)

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

$$x_{c1} \simeq 0.07 - 0.131$$
 и $x_{c2} \simeq 0.042 - 0.078$ для LSCO (4.15)

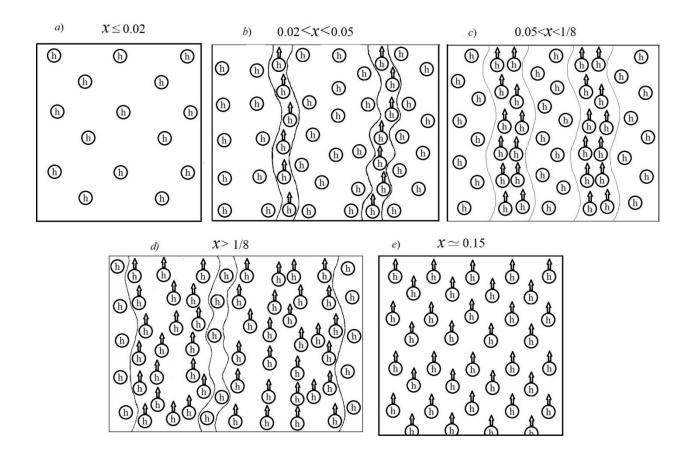
И

$$x_{c1} \simeq 0.035 - 0.125$$
 и $x_{c2} \simeq 0.021 - 0.074$ для YBCO (4.16)

Таким образом, нами обнаружено, что в недолегированных ВТСПкупратах LSCO металл-диэлектрик переходы и наномасштабное разделение диэлектрических и металлических фаз в насыщенных дырочными носителями металлических (при $x > x_{c1}$ и $x > x_{c2}$) областях и в обедневших дырочными носителями диэлектрических ($x < x_{c2}$ и $x < x_{c1}$) областях могут происходить в широких интервалах легирования от $x \approx 0.04$ (слабо легированная область) до $x \ge 0.13$ (умеренно недолегированная область, включающая также "магическое легирование x=1/8"), тогда как такие металл-диэлектрик переходы наномасштабное разделение диэлектрических и металлических фаз легированных купратах ҮВСО будут происходить в слабо легированных $(x \approx 0.02 - 0.05)$ и недолегированных режимах $(x \approx 0.05 - 0.125)$, т.е. в пределах легирования от $x \approx 0.02$ до $x \approx 1/8$. Эти результаты находятся в разумном согласии с существующими экспериментальными данными по металлдиэлектрик переходам и образование диэлектрических, металлических и сверхпроводящих полос/страйпов В недолегированных ВТСП-купратах [141;c.1188-1199. 142;c.2755-2761. 143;c.82-88. 144;c.45-50. 145;c.138-141]. B естественное частности, вышеприведенные результаты обеспечивают объяснение так называемой x=1/8 аномалии в недолегированных купратах. Согласно нашим результатам, уровень легирования x=1/8 должен быть специфическим и важным в различных недолегированных ВТСП-купратах, так

(металлических) полос/страйпов как часть динамических становится x < 1/8, статической (диэлектрической) при уровнях легирования металлические/сверхпроводящие области начинают уменьшаться именно при этих уровнях легирования. Здесь следует отметить, что в эксперименте полные результирующие эффекты различных сосуществующих (простой кубической, объемно-центрированной кубической и гранецентрированной кубической) сверхрешеток поляронных носителей проявляются, но вклад эффекта каждой из этих сверхрешеток отдельно не проявляется.

Нами установлена более ясная новая микроскопическая картина сосуществования конкурирующих диэлектрических и металлических фаз в легированных купратах при неравномерном пространственном распределении поляронных носителей. В этой более реалистической картине, металлическая фаза и страйпы отсутствуют в слабо легированном купратном материале (т.е. при x < 0.02), в котором дырочные носители являются неподвижными (рис.4.2.a) в узкой поляронной зоне, и это новое диэлектрическое поведение слабо легированного купратного материала необъяснимо на основе физики моттхаббардовского диэлектрика. Наши результаты свидетельствуют, что первые металлические фазы появляются в слабо легированных купратах при x>0.02 в соответствии полос/страйпов (рис.4.2.б) виде **УЗКИХ** полном [64;c.621. экспериментальными результатами 146;c.1738-1741]. Отсюда следует, что металлические и диэлектрические фазы в слабо легированных купратах (т.е. при $x \approx 0.02-005$) будут существовать на локальных масштабах. Отметим, что металл-диэлектрик переход, происходящий в этих материалах при $x \ge 0.05$ и T = 0, в эксперименте проявляется как сверхпроводник-диэлектрик (см. также [20;с.1039-1263]). Для уровней легирования превышающих x=0.05, конкурирующие диэлектрические, металлические и сверхпроводящие фазы сосуществуют виде чередующихся динамических И статических полос/страйпов в недолегированных ВТСП-купратах на глобальных масштабах (рис.4.2.с). Таким образом, можно ожидать сосуществование диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в недолегированных купратах.



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

Рис.4.2.Схематическое изображение металл-диэлектрик переходов, многомасштабное разделение фаз от наномасштабных до макромасштабных полос и эволюция сосуществующих диэлектрических и

металлических/сверхпроводящих фаз (страйпов) от слабо до оптимально легированных купратов

Выводы

Таким образом, на основе вышеприведенных результатов можно сделать следующие выводы:

- 1. Процесс локализации дырочных носителей в легированных ВТСПкупратах происходит не только возле легирующих примесей, но и в деформируемой кристаллической решетке, причем квазисвободные появляющиеся после легирования купратов дырки, сильно взаимодействуют окружающими ионами решетки, создавая деформированные участки решетки и притягательные потенциальные ямы, в которых они захватываются с образованием локализованных поляронных состояний.
- 2. Высказано предположение о возможности упорядочения больших поляронов, подобно водородоподобным примесным центрам, и образования различных сверхрешеток поляронных носителей, приводящих к образованию узких поляронных зон в запрещенной зоне купратов.
- 3. Сформулированы новые универсальные критерии металл-диэлектрик переходов в легированных полярных материалах, в которых металл-диэлектрик переходы отличаются от известных моттовских и андерсоновских металл-диэлектрик переходов.
- 4. Установлено, что новые металл-диэлектрик переходы и наномасштабное разделение диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз происходят в дырочно-легированных ВТСП-купратах при различных уровнях их легирования, начиная от слабо легированного режима (x=0.02-0.05) до оптимально легированного режима (x≥0.15).

5. Показано, что сначала диэлектрические и металлические фазы сосуществуют в слабо легированных купратах (x=0.02-0.05), а затем диэлектрические, металлические и сверхпроводящие фазы сосуществуют в недолегированных ВТСП-купратах (x=0.05-0.13).

ГЛАВА V. ВОЗМОЖНЫЕ ПРОЯВЛЕНИЯ МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК ПЕРЕХОДОВ И ЭФФЕКТЫ СОСУЩЕСТВОВАНИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ, МЕТАЛЛИЧЕСКИХ И СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ФАЗ В НОРМАЛЬНЫХ И СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВАХ СЛАБО ЛЕГИРОВАННЫХ И НЕДОЛЕГИРОВАННЫХ КУПРАТАХ

Для свойств понимания различных электронных (электрических, оптических, термодинамических и магнитных свойств) дырочно-легированных ВТСП-купратов и их механизма высокотемпературной сверхпроводимости, необходимо природу прежде выяснить возможных локализованных состояний дырочных носителей дефектных и бездефектных участков кристаллической решетки, а также механизмы спаривания этих носителей слабо легированных, недолегированных И оптимально легированных режимах, при которых наблюдаются различные аномалии электрических, магнитных, оптических и сверхпроводящих свойств ВТСПкупратов [20;с.1039-1263. 38;с.897-928 39;с.241. 69;c.473-541. 91;c.28-33. 125;c.17-85. 138;c.1345-1353. 142;c.2755-2761. 143;c.82-88].

Попытки объяснения необычных свойств ДЛЯ И нормальных недолегированных ВТСП-купратов (в частности, металл-диэлектрик переход, имеющий место в сверхпроводящей области, диэлектрическое поведение удельного электрического сопротивления вдоль c оси BTCП-купратов и зависящая от температуры магнитная восприимчивость в металлическом состоянии), их подавленная сверхпроводимость и псевдощелевые поведения привели к ряду спорных предложений (см. например, [20;с.1039-1263. 39;с.241. 143;c.82-88. 147;c.535-547. 115;c.539-564. 138;c.1345-1353. 148;c.605-616. 149;c.214535]. Предполагается, что необычные взаимодействия квазичастицами в недолегированных ВТСП-купратах могут приводить к их новым и неожиданным электронным состояниям. В действительности, необычные (т.е. сильные и промежуточные) электрон-фононные связи и полярные эффекты являются главными факторами, влияющими на электронные свойства (в частности, магнитную восприимчивость и удельное сопротивление) недолегированных ВТСП-купратов.

Хорошо известно, что восприимчивость магнитная И удельное электрическое сопротивление в нормальном состоянии недолегированных ВТСП-купратов существенно отличаются от таких электронных свойств, объясняемых обычной зонной теорией. Хотя некоторые авторы начали строить теории магнитной восприимчивости и электрической проводимости ВТСПкупратов [66;с.352. 124;с.8576-8595. 147;с.535-547. 148;с.605-616], тем не менее, магнитная восприимчивость и электрическая проводимость вдоль с-оси мало исследовались. Кроме того, причины подавления сверхпроводимости ВТСПкупратов в недолегированной области их фазовой диаграммы остаются также неясными. Теперь мы обсудим проблемы металл-диэлектрик перехода путем зависимостей магнитной изучения температурных восприимчивости сопротивления ВТСП-купратов удельного при различных уровнях их проблемы подавления легирования, также сверхпроводимости материалов в недолегированном режиме путем выяснения ключевой роли эффектов конкурирующих сосуществующих диэлектрических И сверхпроводящих фаз при переходе от оптимально легированного К недолегированному режиму дырочного легирования купратов [87;с.322-335. 138;c.1345-1353. 150;c.23-26. 151;c.1850312. 152;c.22-27. 153;c.42-45. 154;c.717].

§5.1. Проявление металл-диэлектрик переходов в температурной зависимости магнитной восприимчивости слаболегированных купратов и недолегированных ВТСП-купратов

Для изучения необычного поведения магнитной восприимчивости χ слаболегированных купратов и недолегированных ВТСП-купратов, нами будут использованы модели больших поляронов и биполяронов, модели примесных и полярных зон. Мы используем также необычную форму БКШ-подобной теории спаривания дырочных носителей. При этом считаем, что модифицированная 110

БКШ-подобная теория спаривания поляронов хорошо применима для описания куперовского спаривания больших поляронов в ВТСП-купратах. В этом разделе мы исследуем возможные проявления металл-диэлектрик переходов и эффекты сосуществования диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз в температурных зависимостях магнитной восприимчивости $\chi(T)$ слабо легированных купратов и недолегированных ВТСП-купратов в рамках подходящих теоретических подходов, учитывая реальные физические ситуации в этих материалах.

§5.1.1. Температурная зависимость магнитной восприимчивости слаболегированных купратов

В слаболегированных купратах (x< 0,05) как дефектные центры, так и поляроны (которые являются продуктами термического распада больших биполяронов) дают вклад в магнитную восприимчивость этих материалов. В этом случае полную магнитную восприимчивость можно определить из выражения [138;c.1345-1353. 151;c.1850312]

$$\chi_t(T) = \chi_D(T) + \chi_p^*(T) = \frac{\mu^2}{k_B T} n_D - 2\mu_B^2 \int_0^\infty D_p(\varepsilon) \frac{\partial f_p^*}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \qquad (5.1)$$

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

$$\partial f_p^* = \frac{1}{exp\left[(\varepsilon + E_{bB})/k_BT + 1\right]}$$

Функция Ферми распределения для больших поляронов, создаваемых при термической диссоциации биополяров, энергия связи которых равна $E_{bB} = |E_B - 2E_p|$ (см. Гл. II),

$$D_p(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}m_p^{3/2}}{\pi^2\hbar^2}\sqrt{\varepsilon}$$

плотность состояний поляронов, μ_B магнетон Бора, n_D плотность (или концентрация) дефектных центров.

Здесь естественно предположить, что плотность дефектных центров n_D уменьшается с увеличением уровня легирования купратов, т.е. в металлическом состоянии ВТСП-купратов. Потому что слаболегированные и недолегированные купраты являются более неоднородными, чем оптимально легированные купраты, как наблюдалось в экспериментах [102;с.880-881]. Далее нами учтено, что величины энергии связи больших биполяронов изменяются от 0.030 эВ до 0.0000242 эВ при уменьшении ε_{∞} от 5 до 3 и при изменении η от 0.08-0.14 (см. таблицы 2.1 и 2.2). Первый член в уравнении (5.1) есть не что иное, как закон Кюри

$$\chi_D(T) \sim \frac{1}{T} \tag{5.2}$$

для локализованных носителей заряда.

В то время, как вклад термически диссоциированных больших биполяронов к $\chi(T)$ определяется из выражения

$$\chi_p^*(T) = \frac{2\sqrt{2}\mu_B^2 m_p^{3/2} \sqrt{k_B T}}{\pi^2 \hbar^3} \times e^{E_{bB}/k_B T} \int_0^\infty \frac{\sqrt{y} e^y}{(e^{(E_{bB}/k_B T)} e^{y} + 1)^2} dy$$
 (5.3)

где $y = \varepsilon/k_BT$.

Подставляя уравнение (5.3) в (5.1), получаем

$$\chi_t(T) = \frac{\mu^2}{k_B T} \left[n_D + \frac{2\sqrt{2}\mu_B^2 (m_p k_B T)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{E_{bB}}{k_B T}} \times \int_0^\infty \frac{\sqrt{y} e^y dy}{[e^{(E_{bB}/k_B T)} e^{y} + 1]^2} \right]$$
(5.4)

Для того, чтобы сравнить вычисленные значения $\chi(T)$ с экспериментальными данными [155;с.16000-16008], определим магнитную восприимчивость материала как

$$\chi(T) = \frac{\chi_t(T)}{\rho_M},\tag{5.5}$$

где ρ_M плотность материала.

В результате теоретические значения $\chi(T)$, полученные с использованием (5.5), сравнены с экспериментальными данными для LSCO, приведенными в [155;c.16000-16008]. Значение ρ_M в купратах изменяется приблизительно от 4.0 ϵ/cm^3 до 6.4 ϵ/cm^3 [156;c.489-504].

Изменение $\gamma(T)$ в слаболегированных купратах LSCO показано на рис.5.1. Хорошее согласие между значениями вычисленной температурной зависимости $\chi(T)$ и экспериментально наблюденной температурной зависимости $\chi(T)$ в слаболегированных купратах LSCO получается при использовании выражения (5.1) для $\chi(T)$ и контролируется, в основном, параметрами n_D и E_{bB} . При этом лучшее согласие между теоретическим результатом и экспериментальным значением можно получить при следующих условиях: 1) значение n_D в слаболегированных купратах быть ЧУТЬ больше, должно чем В недолегированных ВТСП-купратах; и 2) величина E_{bB} должна быть довольно малой, порядка 10^{-3} эВ. Как видно из рис.5.1, $\chi(T)$ уменьшается в интервале температур Т $\simeq 60\text{-}400 \text{ K}$ с уменьшением температуры, достигает минимума при Т ~ 50 К, а затем резко увеличивается, проявляя диэлектрическое поведение при низких температурах Т<20 К в полном соответствии с экспериментальными данными, полученными для слаболегированного купрата LSCO (x = 0.05) [155;c.16000-16008]. На рис.5.1 наша теоретическая кривая $\chi(T)$ достаточно хорошо совпадает с экспериментальными точками и выражение (5.5) описывает довольно хорошо диэлектрическое поведение магнитной восприимчивости $\chi(T)$ в LSCO.

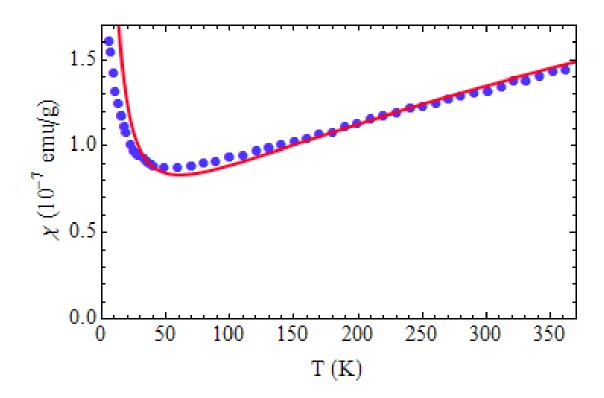


Рис. 5.1. Температурная зависимость χ в слабо легированных купратах $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ при x=0.05 с параметрами m_p = 4.3 m_e , n_D =0.145·10²⁰cm-3, ρ_M = 4.2 c/cm3, E_{bB} =0.0018 эВ. Теоретические результаты (сплошная кривая) сравнены с экспериментальными данными (кругы) [151]

§5.1.2. Температурная зависимость магнитной восприимчивости недолегированных ВТСП-купратов

Когда плотности легирующих примесей и больших поляронов увеличиваются, примесные и поляронные состояния образуют энергетические зоны в металлическом состоянии недолегированных ВТСП-купратов. Задолго до открытия ВТСП-купратов Иглосом утверждалось [157;с.456-463], что куперовские спаривания без сверхпроводимости могут происходить при низкой концентрации носителей тока в полупроводниках. Таким же образом куперовские спаривания больших поляронов могут происходить при некоторой

характерной температуре T^* выше температуры сверхпроводящего перехода T_c в вырожденном Ферми-газе поляронов (характеризующийся энергией Ферми $\varepsilon_F >> k_B T$), а именно в достаточно широкой поляронной зоне [157;с.456-463], тогда как дырочные носители в узкой примесной зоне (т.е. дырочные носители, захваченные примесями) остаются неспаренными [158;с.1201-1241].

Здесь мы обсуждаем БКШ-подобное куперовское спаривание больших T_c в недолегированных ВТСП-купратах. поляронов рассматриваем большие биполяроны и куперовские пары поляронов как связанные пары фермионных квазичастиц (поляронов) в соответственно реальном и импульсном пространствах. Поэтому с увеличением температуры большие биполяроны и куперовские пары поляронов диссоциируют в отдельные поляроны. Большие поляроны с энергией связи $E_{bB} << 0.1$ эВ могут существовать в обедневших (диэлектрических) областях между CuO_2 слоями, тогда как куперовские пары поляронов образуются в насыщенных дырками (металлических) областях, где энергия Ферми больших поляронов будет также относительно мала $\varepsilon_F \sim 0.1$ эВ. В недолегированных ВТСП-купратах дефектные центры, неспаренные носители в узкой примесной зоне, термические диссоциированные большие биполяроны и куперовские пары поляронов вносят вклад в $\chi(T)$. Таким образом, полную магнитную восприимчивость в недолегированных ВТСП-купратах можно записать как [138;с.1345-1353. 151;c.1850312]

$$\chi(T) = \chi_D(T) + \chi_p^*(T) + \chi_I(T) + \chi_C(T)$$
 (5.6)

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

вклад в $\chi(T)$, ожидаемый от неспаренных носителей в примесной зоне,

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

плотность состояний в этой зоне,

$$f_I(\varepsilon) = \frac{1}{[exp\left((\varepsilon + E_{bB})/k_BT\right) + 1]},$$

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

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

вклад поляронных компонент термический диссоциированных куперовских пар, $D_C(\varepsilon) = D_p(\varepsilon)/2$ плотность состояний поляронов на уровне Ферми для одной спиновой ориентации, рассматриваемой в теории БКШ [9;c.365],

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

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

Хотя БКШ, обычная теория предложенная для описания сверхпроводимости в простых металлах является неадекватной для объяснения сверхпроводящих свойств ВТСП-купратов, тем не менее необычная Фермижидкостная теория и БКШ-подобная теория спаривания поляронов могут быть использованы для изучения аномальных свойств недолегированных ВТСПкупратов в их нормальном состоянии. В частности, модифицированная БКШподобная теория может адекватно описать куперовские поляронных носителей в нормальном состоянии недолегированных ВТСПкупратов. Температурная зависимость БКШ-подобной щели может быть аппроксимирована как [138;с.1345-1353]

$$\Delta^*(T) \approx 1.76 k_B T^* \tanh \left[1.85 \sqrt{\frac{T^*}{T} - 1} \right]$$
 (5.7)

Это выражение для $\Delta^*(T)$ является более простым и лучшим аналитическим выражением, которое близко к БКШ-подобному уравнению для щели [158;c.1201-1241]

$$\frac{1}{\lambda^*} = \int_0^{\varepsilon_A} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2(T)}} \tanh \frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2(T)}}{2k_B T},\tag{5.8}$$

где λ^* -БКШ-подобная константа связи,

 ε_A -энергия обрезания для энергии притягательного взаимодействия поляронов. Можно предположить, что основной вклад как к $\chi_C(T)$, так и к БКШ-подобному спариванию поляронов ниже температуры образования псевдощели дают поляронные носители, энергии которых ближе к энергии Ферми ε_F . Тогда $D_C(\varepsilon)$ в выражение $\chi_C(T)$ можно заменить на $D_C(\varepsilon_F)$. В результате получим

$$\chi_C(T) \approx 2\mu_B^2 D_c(\varepsilon_F) [1 + exp(\frac{\Delta^*(T)}{k_B T})]^{-1}$$
 (5.9)

Для того, чтобы сравнить вычисленные значения магнитной восприимчивости с экспериментальными результатами для $\chi(T)$ [159;c.134-137], мы теперь определяем $\chi(T)$ из следующего выражения:

$$\chi(T) = \frac{\chi_{t}(T)M}{\rho_{M}} = \mu_{B}^{2} \left\{ \frac{n_{D}}{k_{B}T} + \frac{2\sqrt{2}m_{I}^{3/2}}{\pi^{2}\hbar^{3}k_{B}T} \int_{\varepsilon_{FI}}^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \frac{e^{\left(\varepsilon - \varepsilon_{FI(T)}\right)/k_{B}T}}{\left[e^{\left(\varepsilon - \varepsilon_{FI(T)}\right)/k_{B}T} + 1\right]^{2}} d\varepsilon + \frac{2\sqrt{2}m_{p^{3/2}}}{\pi^{2}\hbar^{3}k_{B}T} \int_{0}^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \frac{e^{\left(\varepsilon + E_{bB}\right)/k_{B}T}}{\left[e^{\left(\varepsilon + E_{bB}\right)/k_{B}T} + 1\right]^{2}} d\varepsilon + \frac{2m_{p}^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^{2}\hbar^{3}} \frac{1}{(1 + e^{\Delta^{*}(T)/k_{B}T})} \sqrt{\varepsilon_{F(T)}} \right\} \frac{M}{\rho_{M}} (5.10)$$

Для YBCO в наших расчетах выбраны плотность массы, равная $\rho_M = 6.4 \ \text{г/см}^3$ [156;c.489-504], и молярная масса M=670 г/моль [156;c.489-504].

В нормальном состоянии недолегированных ВТСП-купратов БКШподобная псевдощель $\chi^*(T)$ появляется в $\chi(T)$ ниже T^* , как показано на рис.5.2 для недолегированного ВТСП-купрата YВСО. При высоких температурах $T>>T^*$ магнитная восприимчивость $\chi(T)$ этих ВТСП-материалов слабо зависит от температуры. Согласно (5.9), $\chi(T)$ постепенно начинает уменьшаться с понижением температуры до T^* и затем уменьшение $\chi(T)$ с уменьшением T ниже T^* становится более быстрым (Рис.5.2) из-за появления псевдощели Δ^* в спектре возбуждения недолегированного ВТСП-купрата YВСО.

Ступенчатый кинк на рис.5.2 связан с появлением БКШ-подобной псевдощели вблизи характеристической температуры T^* при куперовском спаривании поляронов. Этот ступенчатый кинк на экспериментальной $\chi(T)$ кривой может размазываться неоднородностями образцов ВТСП-купратов и в действительности наблюдалось изменение или разрыв наклона $\gamma(T)$ вниз ниже $T^* \simeq 200$ K, потому что в эксперименте ожидаемый БКШ-подобный (т.е. ступенчатый) кинк вблизи $T^* \simeq 200 \mathrm{K}$ погребается в пределах шумов как БКШподобный скачок теплоемкости (см. [158;с.1201-1241]) и наблюдается как слабая псевдощелевая особенность из-за эффекта неоднородностей образцов ВТСП-материалов. Если эффекты неоднородности образцов ВТСП-купратов преобладают над эффектом псевдощели на $\chi(T)$, тогда БКШ-подобная псевдощелевая особенность вблизи T^* будет сильно подавлена или станет менее заметной. В обычных металлах $\chi(T)$ не зависит от температуры из-за отсутствия в них поляронного эффекта. В противоположность этому поляронный эффект появляется в температурной зависимости $\chi(T)$ как выше T^* , так и ниже T^* в недолегированных BTCП-купратах, где $\chi(T)$ сначала начинает медленно уменьшаться с уменьшением температуры до T^* и затем уменьшение в $\chi(T)$ с понижением T ниже T^* становится более быстрым (см. рис.5.2).

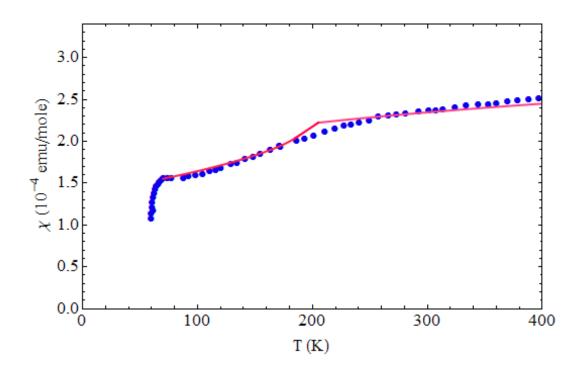


Рис. 5.2. Температурная зависимость χ в недолегированных купратах $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ при x=0.62 с параметрами m_p = $3m_e$, m_I = $4.7m_e$, n_D =0.08·10¹⁹ см⁻³, ε_F =0.145 эВ, ε_{FI} =0.1 эВ, ρ_M = 5.6 ε/cm^3 , E_{bB} =0.007 эВ. Теоретические результаты (сплошная кривая) сравнены с экспериментальными данными (кругы) [151]

§5.1.3. Температурная зависимость магнитной восприимчивости в оптимально легированных ВТСП-купратах

Рассмотрим поведение магнитной восприимчивости $\chi(T)$ в оптимально легированных ВТСП-купратах YВСО, где энергия связи E_{bB} больших биполяронов становится исчезающе малой и температура образования БКШ-подобной псевдощели Δ^* будет очень близкой к T_c . В оптимально легированных ВТСП-купратах также, как в недолегированных ВТСП-купратах дефектные центры, дырочные носители в достаточно уширенной зоне (где $\varepsilon_{FI} >> k_B T$), термически диссоциированные большие биполяроны и поляронные компоненты диссоциированных куперовских пар дают вклад в $\chi(T)$ и

выражение для полной безразмерной магнитной восприимчивости имеет следующий вид

$$\chi_{t}(T) = \chi_{D}(T) + \chi_{I}(T) + \chi_{p}^{*}(T) + \chi_{C}(T) = \mu_{B}^{2} \left\{ \frac{n_{D}}{k_{B}T} + \frac{2\sqrt{2}m_{I}^{3/2}}{\pi^{2}\hbar^{3}k_{B}T} \sqrt{\varepsilon_{FI(T)}} + \frac{2\sqrt{2}m_{p}^{3/2}}{\pi^{2}\hbar^{3}k_{B}T} \int_{0}^{\infty} \sqrt{\varepsilon} \frac{e^{(\varepsilon+E_{bB})/k_{B}T}}{\left[e^{(\varepsilon+E_{bB})/k_{B}T} + 1\right]^{2}} d\varepsilon + \frac{2m_{p}^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^{2}\hbar^{3}} \frac{1}{(1+e^{\Delta^{*}(T)/k_{B}T})} \sqrt{\varepsilon_{F}(0) - \frac{(\pi k_{B}T)^{2}}{12\varepsilon_{F}(0)}} \right\} (5.11)$$

Теперь запишем выражение магнитной восприимчивости для сравнения с экспериментальными данными [159;c.134-137] в виде

$$\chi(T) = \chi_t(T)M/\rho_M \tag{5.12}$$

В этом случае магнитная восприимчивость $\chi(T)$, вычисленная по формуле, почти не зависит от температуры (см. Рис.5.3), как это наблюдается также оптимально легированном ВТСП-купрате экспериментально В [145;c.138-141]. Из вышеприведенных результатов следует, что сосуществующие диэлектрические и металлические фазы проявляются в температурной магнитной восприимчивости $\chi(T)$ зависимости слаболегированных купратов, недолегированных и оптимально легированных ВТСП-купратов.

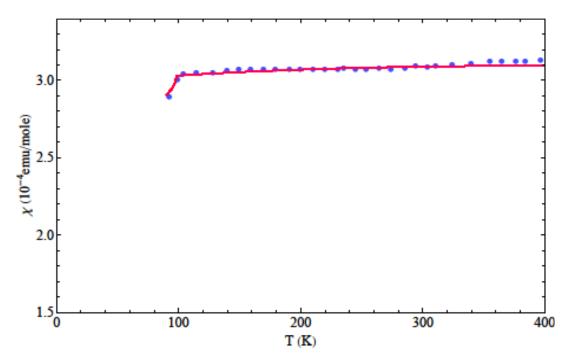


Рис. 5.3. Температурная зависимость χ в недолегированных купратах $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ при x=0.97 с параметрами $m_p=2.1m_e$, $m_I=4.1m_e$, $n_D=0.05\cdot 10^{19}$ см⁻³, $\varepsilon_F=0.18$ эB, $\varepsilon_{FI}=0.148$ эB, $\rho_M=5.9$ г/см³, $E_{bB}=0.0001$ эB. Теоретические результаты (сплошная кривая) сравнены с экспериментальными данными (круги) [151]

\$5.2. Проявление металл-диэлектрик переходов в температурной зависимости удельного электрического сопротивления вдоль c-оси ВТСП-купратов

Анализ транспортных свойств легированных ВТСП-купратов вдоль их cоси при различных уровнях легирования может дать также дополнительную информацию о диэлектрическом и металлическом поведении этих материалов. Рассмотрим 3D поляронный транспорт при термической диссоциации больших биполяронов, находящихся между CuO_2 слоями ВТСП-купратов, с целью изучения проблемы металл-диэлектрик перехода в объеме этих материалов. Предполагается, что в легированных купратах локализованные большие биполяроны образуются в обедневших дырочными носителями областях между

 CuO_2 слоями, и поляронный транспорт вдоль c-оси становится возможным при термической диссоциации неподвижных биполяронов в отдельные поляроны, которые затем движутся путем прыжка из одного положения в другое вдоль соси. Большие поляроны ведут себя как классические частицы при их низкой плотности, т.е. когда большие биполяроны образуются между CuO_2 слоями и термически диссоциируются в отдельные поляроны, которые образуют невырожденный Ферми-газ. В областях между CuO_2 слоями прыгающий поляронный носитель должен преодолеть некоторый потенциальный барьер, который имеет высоту E_a (в отсутствии электрического поля E) и проводимость вдоль c-оси ВТСП-купратов имеет активационное поведение. В случае биполяронов активационная локализованных энергия E_a (T.e. высота потенциального барьера) для прыжка поляронной компоненты большого биплярона из одной потенциальной ямы в другую ближайшую соседнюю потенциальную яму равна энергии связи этого биполярона E_{bB} .

Теперь рассмотрим случай одномерного поляронного транспорта и прыжковую проводимости вдоль c-оси в легированных купратах. В отсутствии электрического поля (E=0) вероятность прыжка при фононностимулированном прыжке поляронного носителя вдоль одного из возможных направлений определяется из выражения [116;c.6-15]

$$\omega = \frac{1}{2}\omega_0 exp[-E_{\rm bB}/k_B T],\tag{5.13}$$

где ω_0 частота оптического фонона.

При $E \neq 0$ потенциальная энергия поляронного носителя в электрическом поле определяется как работа eEa_h , совершенная электрической силой в движении поляронного носителя через смещение на расстояние его прыжка a_h , который будет порядка расстояния между CuO_2 слоями. В этом случае уменьшение высоты потенциального барьера будет равно $eEa_h/2$. Тогда дрейфовая подвижность поляронов при прыжковом движении в электрическом поле определяется из выражения их дрейфовой скорости

$$v_d = a_h(\omega_1 - \omega_2), \tag{5.14}$$

где

$$\omega_1 = \frac{1}{2}\omega_0 exp[-(E_{bB} - (eEa_h/2))/k_BT],$$

И

$$\omega_2 = \frac{1}{2}\omega_0 exp[-(E_{\rm bB} + (eEa_h/2))/k_BT],$$

соответственно вероятности прыжков поляронов вдоль и в противоположном электрическому полю E направлениях.

При $eEa_h/2k_BT\ll 1$ (т.е. в слабом электрическом поле) можно разложить экспоненты в выражениях для ω_1 и ω_2 в ряд Тейлора по степеням $\pm (eEa_h/2k_BT)$ и дрейфовую подвижность поляронов при их прыжковых движениях вдоль c-оси можно определить из уравнения

$$\mu_h(T) = \frac{ea_h^2 \omega_0}{2k_B T} exp\left[-\frac{E_{\text{bB}}}{k_B T}\right],\tag{5.15}$$

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

$$\sigma_c(T > T_c) = n_h e \mu_h(T) = \frac{n_h e^2 a_h^2 \omega_0}{2k_B T} exp\left[-\frac{E_{\text{bB}}}{k_B T}\right],\tag{5.16}$$

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

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

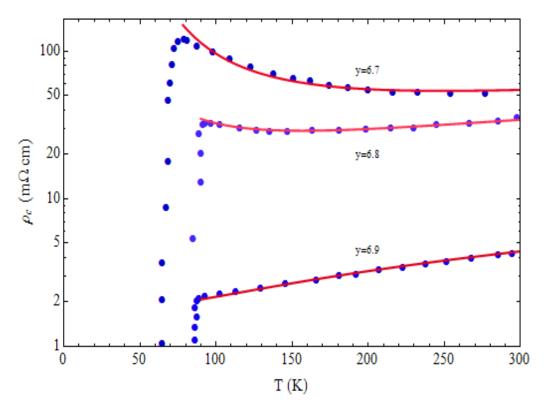
$$\rho_c(T > T_c) = \frac{1}{\sigma_c(T > T_c)} = \frac{2k_B T}{n_h e^2 a_h^2 \omega_0} exp\left[\frac{E_{\text{bB}}}{k_B T}\right]$$
 (5.17)

Всякие твердые тела имеют несовершенства кристаллической решетки, рассеяние на которых носителей тока характеризует остаточное сопротивление ρ_0 твердых тел. Поэтому учитывая остаточное сопротивление легированных ВТСП-материалов выражение (5.17) можно переписать как

$$\rho_c(T) = \rho_0 + \frac{2k_B T}{n_h e^2 a_h^2 \omega_0} exp\left[\frac{E_{\text{bB}}}{k_B T}\right]. \tag{5.18}$$

Из (5.18) видно, что удельное сопротивление легированных ВТСП-материалов является пропорциональным $exp/E_{bB}/k_BT$, и диэлектрическая температурная зависимость удельного сопротивления вдоль c-оси обусловлена активационным характером переноса больших поляронов вдоль этой оси, так что концепция, термо-активирующая их прыжковый транспорт, может объяснить естественно экспериментальные данные ПО $\rho_c(T)$. Другое возможное объяснение электрической проводимости легированных BTCП-купратов вдоль их c-оси в ҮВСО основаны на так называемом механизме резонансного туннелирования носителей тока между проводящими слоями CuO_2 через локализованные состояния в СиО-цепочках, предложенном Абрикосовым [145;с.605-616].

Теперь обсудим наши теоретические результаты по $\rho_c(T)$, которые сравнены с экспериментальными данными по $\rho_c(T)$, полученные для ВТСП-купратов YВСО при различных уровнях их легирования [160;с.6051-6060]. При этом сравнение наших вычисленных результатов с экспериментальными данными по $\rho_c(T)$ для разных образцов YВСО с различными уровнями легирования показаны на рис.5.4. Можно видеть, что рассчитанные значения $\rho_c(T)$ очень хорошо согласуются с экспериментальными данными для $\rho_c(T)$ до температуры T_c . Как видно из рис.5.4, диэлектрическое поведение $\rho_c(T)$ в недолегированных ВТСП-купратах постепенно изменяется в металлическое поведение $\rho_c(T)$ с уменьшением энергии связи больших биполяронов в оптимально легированном режиме.



Фитирование $\rho_c(T)$ данных для $YBa_2Cu_3O_y$ с y=6.7, 6.8 и 6.9 с использованием yp.(5.18) и различными параметрами (для y=6.7, 6.8 и 6.9 соответственно использованы следующие параметры $\rho_0=0.05$ м Ω см, $a_h=11.5$ $\cdot 10^{-8}$ см, $\omega_0=5.8\cdot 10^{13}$ s $^{-1}$, $n_i=1.77\cdot 10^{19}$ см $^{-3}$, $E_{bB}=0.0215$ эB; $\rho_0=0.03$ м Ω см, $a_h=11.5\cdot 10^{-8}$ см, $\omega_0=6.0\cdot 10^{13}$ s $^{-1}$, $n_i=2.0\cdot 10^{19}$ см $^{-3}$, $E_{bB}=0.0135$ эB и $\rho_0=0.02$ м Ω см, $a_h=11.5\cdot 10^{-8}$ см, $\omega_0=17.0\cdot 10^{13}$ s $^{-1}$, $n_i=7.35\cdot 10^{19}$ см $^{-3}$, $E_{bB}=0.005$ эB).

Рис.5.4. Экспериментальные данные $\rho_c(T)$ (круги) полученные для $YBa_2Cu_3O_y$ в различных уровнях легирования и фитирование с ур.(5.18) (сплошные кривые)

Наши теоретические результаты показывают, что энергия связи больших биполяронов, локализованных между CuO_2 слоями легированных ВТСП-купратов уменьшается с увеличением концентрации больших поляронов n_h в областях между CuO_2 слоями и становится равной нулю при некотором критическом значении n_h , при котором металл-диэлектрик переходы происходят в YВСО. С увеличением уровня легирования большие биполяроны начинают диссоциировать в отдельные поляроны и диэлектрик-металл переход

происходит при высоких уровнях легирования, при которых энергия связи больших биполяронов становится уже исчезающе малой.

Когда E_{bB} стремится к нулю, диэлектрическое поведение $\rho_c(T)$ меняется в металлическое поведение в YBCO при $n_h \ge 7.4 \cdot 10^{19} \text{см}^{-3}$.

§5.3. Проявление металл-диэлектрик переходов и сосуществующих диэлектрических и сверхпроводящих фаз в подавлении сверхпроводимости недолегированных ВТСП-купратов

Вышеприведенные результаты (см. Гл.IV) показывают, что металлдиэлектрик переходы происходят не только в слабо легированных купратах, но и в недолегированныхх ВТСП-купратах. В результате этого диэлектрические, металлические и сверхпроводящие фазы ВТСП-купратов сосуществуют в широком диапазоне их легирования, начиная с $x \approx 0.05$ вплоть до $x \approx 0.14$. При эффекты сосуществующих ЭТОМ конкурирующие диэлектрических сверхпроводящих фаз оказывают существенное влияние высокотемпературной сверхпроводимости недолегированных ВТСП-купратов ($x \approx 0.05 - 0.14$). Как известно, критическая температура сверхпроводящего перехода дырочно-ВТСП-купратов легированных достигает максимального значения оптимально легированном режиме $x \approx 0.15 - 0.16$ [20;c.1039-1263. 38;c.897-928. 91;с.28-33. 125;с.17-85. 138;с.1345-1353]. По нашему мнению это связано с тем, что в оптимально легированных ВТСП-купратах все диэлектрические области переходят в металлические состояние при $T > T_c$ или в сверхпроводящее состояние при $T < T_c$, т.е. диэлектрическая фаза больше не существует в оптимально легированном режиме. Однако, при x < 0.14 появляются уже зародыши диэлектрической фазы в виде узких полос (см. Рис.4.2.d) в некоторых решетки ВТСП-купратов и кристаллической при дальнейшем местах уменьшении уровня легирования увеличиваются диэлектрические области, а сверхпроводящие области начинают уменьшаться. Поэтому, сосуществование диэлектрических и сврехпроводящих областей (фаз) приводит к подавлению 126

сверхпроводимости (T_c начинает уменьшаться) при $x \le 0.13$ в недолегированных ВТСП-купратах. При этом заметное подавление сверхпроводимости недолегированных BTCП-купратах ожидается при $x \le 1/8$ из-за заметного увеличения доли диэлектрического объема за счет уменьшения объема сверхпроводящего недолегированных ВТСП-материалов. Действительно, экспериментальные результаты [142;с.2755-2761. 143;с.82-88] подтверждают наши теоретические предсказания И показывают, сверхпроводимость в недолегированных ВТСП-купратах заметно подавляется, динамических (металлических) полос/страйпов становится часть статической (т.е. диэлектрической) при $x \le 1/8$. Диэлектрические области (фазы) будут исчезать в оптимально легированных ВТСП-купратах, в которых весь объем становится сверхпроводящим с максимальным значением T_c (см. Рис.4.2.е).

Выводы

Полученные теоретические результаты позволяют сделать следующие основные выводы:

- 1. Установлено, что металл-диэлектрик переходы и конкурирующие эффекты сосуществующих диэлектрических, металлических и сверхпроводящих фаз управляют поведением нормальных и сверхпроводящих свойств легированных ВТСП-купратов.
- 2. Показано, что металл-диэлектрик переходы и конкурирующие эффекты сосуществующих диэлектрических и металлических фаз в слабо легированных (несверхпроводящих) купратах и недолегированных ВТСП-купратах проявляются в необычных температурных зависимостях их магнитной восприимчивости выше T_c .
- 3. Выяснено, что температурная зависимость магнитной восприимчивости $\chi(T)$ легированных купратов проявляет три различных поведения: 1) диэлектрическое поведение при слабо легированном режиме $\chi \lesssim 0.05$; 2) необычное металлическое поведение в недолегированном режиме

- $(0.05 < x \le 0.13)$ и 3) обычное металлическое поведение в оптимально легированном режиме ($x \ge 0.15$).
- 4. Показано, что переходы металл-диэлектрик проявляются температурных зависимостях удельного электрического сопротивления недолегированных ВТСП-купратов вдоль их c-оси $\rho_c(T)$ выше T_c и диэлектрическое поведение $\rho_c(T)$, связанное с термической диссоциацией больших локализованных биполяронов в отдельные поляроны между CuO_2 слоями и последующим прыжковым движением поляронов вдоль с-оси этих материалов, постепенно меняется в металлическое поведение в оптимально легированных ВТСП-купратах, когда энергия связи больших биполяронов, которые образуются в областях между CuO_2 слоями, становится равным нулю.
- 5. Установлено, что подавление сверхпроводимости (т.е. уменьшение T_c) в недолегированных ВТСП-купратах вызвано конкурирующими эффектами сосуществующих диэлектрических и сверхпроводящих фаз и увеличением доли диэлектрических областей за счет уменьшения доли сверхпроводящих областей, причем уменьшение доли сверхпроводящего объема в образцах недолегированных ВТСП-купратов сопровождается уменьшением T_c .

Заключение

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

- 1. Вычислены энергии основных состояний дырок в легированных купратных соединениях в континуальной модели и адиабатическом приближении и определены возможные энергетические уровни водородоподобных примесей, больших поляронов и биполяронов в диэлектрической щели (т.е. запрещенной зоне) нелегированных купратов.
- 2. Показано, что образованные локализованные примесные, поляронные и биполяронные состояния внутри запрещенной зоны купратных соединений являются ответственными за новые низкоэнергетические электронные структуры дырочно-легированных купратов, которые наблюдаются во многих экспериментах.
- 3. Показано, что в дырочно-легированных купратах примеси, имеющие большие ионные радиусы по сравнению с радиусом ионов основной решетки, отрицательные деформационные потенциалы $(E_{dD} < 0)$ образуют водородоподобные примесные (т.е. акцепторные) центры. Процессы упорядочения таких примесных центров приводят образованию их различных сверхрешеток и узких энергетических, которые лежат между верхней зоной Хаббарда и валентной зоной кислорода.
- 4. Построены адекватные количественные теории моттовских и новых металл-диэлектрик переходов, первая из которых, происходящая только в слабо легированных купратах при уровнях легирования $x < x_c = 0.02 0.03$, вызвана сильной корреляцией носителей в узкой примесной зоне ВТСП-купратов, тогда как вторая, происходящая в ВТСП-купратах в широком

- интервале легирования, начиная от слаболегированного до оптимально легированного режима, вызвана сильным электрон-фононным взаимодействием (поляронным эффектом).
- 5. На основе точного определения энергии кулоновского отталкивания дырками, находящимися на одном И между двумя TOM же водородоподобном атоме или примесном центре, получены новые количественные критерии моттовского металл-диэлектрик перехода, которые применимы для изучения возможности металл-диэлектрик переходов, вызванных сильными электронными корреляциями (т.е. сильным кулоновским отталкиванием двух электронов или дырок, находящихся на одном и том же водородоподобном ионе или примесном центре) как в нелегированных, так и легированных твердых телах.
- 6. Определены пределы применимости моттовских металл-диэлектрик переходов в легированных купратах в условиях существования водородоподобных примесных центров и сильных электронных корреляций в узких примесных зонах.
- 7. Показано, что квазисвободные дырки, появляющиеся после легирования купратов сильно взаимодействуют с окружающими ионами решетки, создавая деформированные участки решетки и притягательные потенциальные ямы, в которых они захватываются с образованием локализованных поляронных состояний. При этом большие поляроны подобно водородоподобным примесным центрам образуют различные сверхрешетки, приводящие к образованию узких поляронных зон в запрещенной зоне купратов.
- 8. Сформулированы новые универсальные критерии металл-диэлектрик переходов в легированных полярных материалах, в которых металл-диэлектрик переходы, вызванные сильными дырочно-решеточными взаимодействиями, отличаются от известных моттовских и андерсоновских металл-диэлектрик переходов, причем эти новые металл-диэлектрик переходы и наномасштабное разделение диэлектрических,

- металлических и сверхпроводящих фаз происходит в дырочнолегированных ВТСП-купратах при различных уровнях их легирования, начиная от слабо легированного режима (x=0.02-0.05) до оптимально легированного режима (x≥0.15).
- 9. Выяснено, что температурная зависимость магнитной восприимчивости $\chi(T)$ в легированных купратах проявляет три различных поведения: 1) диэлектрическое поведение при слабо легированном режиме $x \le 0.05$; 2) необычное металлическое поведение в недолегированном режиме $(0.05 < x \le 0.13)$ и 3) обычное металлическое поведение в оптимально легированном режиме $(x \ge 0.15)$.
- 10.Показано, ЧТО металл-диэлектрик переходы проявляются температурных зависимостях удельного электрического сопротивления недолегированных ВТСП-купратов вдоль их c-оси $\rho_c(T)$ выше T_c и диэлектрическое поведение $\rho_c(T)$, связанное с термической диссоциацией больших локализованных биполяронов в отдельные поляроны между CuO_2 слоями больших И последующим прыжковым движением поляронов вдоль с-оси этих материалов, постепенно меняется в металлическое поведение в оптимально легированных ВТСП-купратах, когда энергия связи больших биполяронов, которые образуются в областях между CuO_2 слоями, становится равной нулю.
- 11. Установлено, что подавление сверхпроводимости (т.е. уменьшение T_c) в недолегированных ВТСП-купратах вызвано конкурирующими эффектами сосуществующих диэлектрических и сверхпроводящих фаз и увеличением доли диэлектрических областей за счет уменьшения доли сверхпроводящих областей, причем уменьшение доли сверхпроводящего объема в образцах недолегированных ВТСП-купратов сопровождается уменьшением T_c .

БЛАГОДАРНОСТИ

Считаю своим приятным долгом выразить искреннюю и глубокую признательность моему научному консультанту доктору физиконаук, профессору Сафарали Джуманову за постоянную математических поддержку И помощь, своевременные консультации И плодотворное обсуждение результатов.

Я признателен д.ф.-м.н., доц. Б.Я. Явидову, к.ф.-м.н. П.Ж. Байматову за дискуссии и полезные советы при выполнении данной работы.

Также я выражаю благодарность президенту АН РУз академику Б.С. Юлдашеву, директору ИЯФ АН РУз д.т.н., с.н.с. И.И. Садыкову за постоянное внимание к моей работе и коллективам лабораторий 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. Маделунг О. Физика твердого тела. Локализованные состояния. М.: Наука, 1985. 184 с.
- 2. Аппел Дж. Поляроны // Поляроны/Под ред. Ю.А.Фирсова. М.: Наука, 1975. С. 13 204.
- 3. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Мир, 1978. 792 с.
- 4. Лущик Ч.Б., Лущик А.Ч. Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах. М.: Наука, 1989. 264 с.
- 5. Давыдов A.C. Теория твердого тела. M.: Наука, 1976. 640 c.
- 6. Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. Мир.: Москва, 1986. 304 с.
- 7. Toyozawa Y. Excitation lattice interaction, fluctuation, relaxation and defect formation// Technical Report ISSP, Ser.A. Japan, 1974.–№648.– P. 1–23.
- 8. Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. Т.1 – М.: Мир, 1982. – 368 с.
- 9. Dzhumanov S., Theory of Conventional and Unconventional Superconductivity in the High– T_c Cuprates and Other Systems. –Nova Science Publishers, New York, 2013. –365 p.
- 10.Мотт Н.Ф. Переходы металл–изолятор. –М.: Наука, 1979.–342 с.
- 11. Вонсовский С. В., Кацнельсон М. И. Квантовая физика твёрдого тела. М.: Наука, 1983. –336 с.
- 12. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. – М.: Высшая школа, 1985. – 384 с.
- 13. Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел. –М.: Мир, 1981. –574 с.
- 14. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т.5. Часть 1. Атомная физика.— Физматлит, 1986. С.426.

- 15.Dzhumanov S. Possible insulating, metallic and superconducting states in doped high– T_C superconductors // Solid State Communication– Elsevier, Amsterdam. 2000. –V.115.–P.155–160.
- 16. Фистуль В.И. Введение в физику полупроводников. М.: Высшая школа, 1975. 296 с.
- 17. Энциклопедия по машиностроению XXL. Электроны, атомы, кристаллы и твердые тела. https://mash-xxl.info/info/613304.
- 18. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М.: Высшая школа, 1978. 616 с.
- 19. Киреев П.С. Физика полупроводников. –М.: Высшая школа, 1975. –584 с.
- 20.Imada M., Fujimori A., Tokura Y. Metal–insulator transitions// Review Modern Physics Lancaster PA, 1998. V 70. –P. 1039–1263.
- 21. Wilson A.H. Transport theory of semiconductors based on systematic investigation// Proceedings of the Royal Society of London.— London, 1931.— A133.—P.458.
- 22.Mott N.F. The basis of the theory of electron metals, with special reference to the transition metals// Proceedings of the Royal Society of London. –London, 1937.– Ser. A49.– P.72.
- 23. Wigner E. Effects of the electron interaction on the energy levels of electrons in metals// Transaction of the Faraday Society.— The Royal Society of Chemistry, London, 1938.—V.34—P.678.
- 24. Пайерлс Р. Квантовая теория твердых тел. М.:ИЛ, 1956. 260 с.
- 25. Anderson P.W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices// Physical Review–USA, 1958.– V.109, № 5.– P. 1492–1505.
- 26.Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. II. The Degenerate Band Case // Proceedings of the Royal Society of London. Ser.A.–London, 1964.–V.277.–P.237–259.
- 27. Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. III. An Improved Solution // Proceedings of the Royal Society of London. Ser.A.—London, 1964.— V281.—P.401—419.

- 28.Walz F. The Verwey transition a topical review// Journal of Physics: Condensed Matter.–IOP Publishing, 2002.–V. 14.–P. R285–R340.
- 29.Slater J.C. Magnetic Effects and the Hartree–Fock Equation// Physical Review–USA, 1951.–V.82.–P.538–541.
- 30.Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. –М.: Наука, 1979. 416 с.
- 31. Шифф Л.И. Квантовая механика. М.: ИЛ, 1959. 473 с.
- 32.Slater J.C. Quantum theory of molecules and solids.—N.Y.: Mc Graw—Hill, 1963.—V.1.—P.483.
- 33.Hulthen L., Laurikainen K.V. Approximate Eigensolutions of $(d^2\phi/dx^2)+[a+b(e^{-x/x})]/\phi=0$ // Review Modern Physics– Lancaster PA,1951.–V.23.N.1–P.1–9.
- 34.Mott N.F. Metal-insulator transitions. 2 ed.-London.: Taylor and Francis, 1990.-P. 227.
- 35.Cieplak M. Z., Guha S., Kojima H., Lindenfeld P., Gang Xiao, Xiao J.Q. and Chien C. L. Superconductivity and the metal–insulator transition in La_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄ // Physica C.–Amsterdam, 1991.–V.185–189.–P.1233–1234.
- 36.Quemerias P. Crystallization of polarons in doped ionic materials// Modern Physics Letters Lancaster PA, 1995.–B 9, № 25.– 1665–1672.
- 37.Boebinger G. S., Ando Y., Passner A., Kimura T., Okuya M., Shimoyama J., Kishio K., Tamasaku K., Ichikawa N., Uchida S. Insulator–to–Metal Crossover in the Normal State of La_{2-x}Sr_xCuO₄ Near Optimum Doping// Physical Review Letters Lancaster PA, 1996.–V.77, №27.–P.5417–5420.
- 38.Kastner M.A., Birgeneau R.J., Shirane G. and Endoh Y. Magnetic, transport and optical properties of monolayer copper oxides// Review Modern Physics Lancaster PA, 1998.– V.70, № 3.– P. 897–928.
- 39.Лавров А.Н., Гантмахер В.Ф. Низкотемпературное сопротивление недодопированных купратов// Успехи физических наук-Москва,1998.— Т.168.—С.241.

- 40. Thomas G.A. Optical properties of insulators and metals with copper oxide planes// in High Temperature Superconductivity. D.P. Tunstall and W. Barford eds., –Adam Hilger, Bristol, 1991.– P. 169–206.
- 41. Chen C.Y., Birgenau R.J. Kastner M.A., Preyer N.M., Thio T. Frequency and magnetic field dependence of the dielectric constant and conductivity of La₂CuO_{4+v} // Physical Review B.—Ann Arbor, MI., 1991.—V.43, № 1.— P.392.
- 42.Mott N.F. High temperature superconductivity; the spin polaron theory// Contemporary Physics—Taylor and Francis, 1990.—V.31.—P.373.
- 43.Edwards P.P, Mott N.F., Alexandrov A.S. The Insulator–Superconductor Transformation in Cuprates// Journal of Superconductivity– New York, 1998.– V.111, №1.–P.151–154.
- 44.Gunnarsson O., Rösch O. Interplay between electron–phonon and Coulomb interactions in cuprates// Journal of Physics: Condensed Matter.–Bristol, 2008.– V.20, №4.– P.043201.
- 45.Мищенко А.С. Электрон-фононное взаимодействие в недопированных высокотемпературных сверхпроводниках// Успехи физических наук—Москва, 2009.—Т.179, №12.—С.1259—1280.
- 46.Capone M., Sangiovanni G. The effects of the electron–phonon interaction on a Mott insulator// Journal of Magnetism and Magnetic Materials–North Holland (Elsevier), 2004.– V.272–276.–P.e301– e302
- 47.Bulla R. Zero Temperature Metal–Insulator Transition in the Infinite–Dimensional Hubbard Model// Physical Review Letters– Lancaster PA, 1999.–V. 83, №1.–P.136–139.
- 48.Yun J.H., Kang H.S., Jeon G.S., Choi H.Y. Dynamical mean–field theory of Holstein model at half filling: Phonon frequency dependence of metal–insulator transition// Journal of Magnetism and Magnetic Materials–North Holland (Elsevier), 2007.–V.310.–P.916–918.
- 49. Sharma R.P., Ogale S. B., Zhang Z. H., Liu J. R., Chu W. K., Boyed Veal, Paulikas A., Zheng H., Venkatesan T. Phase transitions in the incoherent lattice

- fluctuations in YBa ₂Cu₃O_{7-\delta}// Nature–Springer, London, 2000.–V.404.–P.736–740.
- 50.Lanzara A., Zhao Guo–meng, Saini N.L., Bianconi A., Conder K., Keller H., Muller K. A. Oxygen–isotope shift of the charge–stripe ordering temperature in La_{2-x}Sr_xCuO₄ from *x*–ray absorption spectroscopy// Journal of Physics: Condensed Matter.–Bristol, 1999.–V.11.–P. L541–L546.
- 51.Bianconi A., Saini N. L., Rossetti T., Lanzara A., Perali A., Missori M., Oyanagi H., Yamaguchi H., Nishihara Y., and Ha D. H. Stripe structure in the CuO₂ plane of perovskite superconductors // Physical Review B.— Ann Arbor, MI., 1996.–V. 54, №17.–P. 12018–12021.
- 52.Zimmerman M.V., Vigliante A., Niemöller T., Ichikawa N., Frello T., Madsen J., Wochner P., Uchida S., Andersen N. H., Tranquada J. M., Gibbs D., Schneider J.R. Hard–X–ray diffraction study of charge stripe order in La_{1.48}Nd_{0.4}Sr_{0.12}CuO₄ // Europhysics Letters– IOP Science, 1998.–V.41,№6.–P.629.
- 53.Bianconi A., Saini N. L., Lanzara A., Missori M., Rossetti T., Oyanagi H., Yamaguchi H., Oka K., Ito T. Determination of the local lattice distortions in the CuO₂ plane of La_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄ // Physical Review Letters— Lancaster PA, 1996.— V.76, №18.—P. 3412–3415.
- 54.Saini N.L., Avila J., Bianconi A., Lanzara A., Asensio M.C., Tajima S., Gu G.D., Koshizuka N. Topology of the pseudogap and Shadow bands in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ at optimum doping // Physical Review Letters— Lancaster PA, 1997.–V.79.– P.3467–3470.
- 55.Джуманов С., Ганиев О.К., Джуманов Ш.С., Курбанов У.Т. Роль поляронных эффектов в необычных туннельных спектрах ВТСП купратов// Доклады Академии наук Республики Узбекистан.— Ташкент, 2013.— № 1.— С.30–33.
- 56.Явидов Б.Я., Курбанов У.Т., Джуманов С., Каримбаев Э.Х. Влияние одноосного напряжения на температуру Бозе–Эйнштейновской конденсации биполяронных носителей в слоистых ВТСП–купратах// Доклады Академии наук Республики Узбекистан.—Ташкент, 2016.— №3.— С.18–21.

- 57. Джуманов С., Курбанов У.Т., Худайбердиев З.С. Возможные металл— диэлектрик переходы и наноразмерное разделение фаз в дырочно— легированных купратах// Доклады Академии наук Республики Узбекистан.— Ташкент, 2018.—№6.—С.14—20.
- 58.Dzhumanov S., Ganiev O.K., Khudayberdiev Z.S., Kurbanov U.T. Carrier localization, metal—insulator transitions and stripe formation in inhomogeneous hole–doped cuprates// «Fundamental and applied questions of physics»: Book of Abstracts of the conference, dedicated to 80th anniversary of academician M.S. Saidov 24–25 November, 2010.– Tashkent– 2010.– pp. 337–339.
- 59.Dzhumanov S., Ganiev O.K., Djumanov Sh.S., Kurbanov U.T., Karimboev E.X. and Khudayberdiev Z.S. Normal–state charge transport properties of high– T_c cuprates// "Physics and Ecology": Book of Abstracts of the Republican scientific–practical conference 11–12 December 2013.– Nukus, 2013. –p.26–27.
- 60. Гинзберг Д.М. Введение, история открытия и обзор свойств высокотемпературных сверхпроводников. Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников /Под ред. Д.М. Гинзберга М.: Мир, 1990.—8–38 с.
- 61. Easterling K., Niska J. The microstructure and properties of high– T_c superconducting oxides// Science Progress Oxford– Oxford, 1990.–V.74.–P.69–90.
- 62.Ford P.J. and Saunders G.A. High–temperature superconductivity–ten years on// Contemporary Physics.—Taylor and Francis, 1997.—V.38.—P.63.
- 63.Norman M.R. and Pepin C. The electronic nature of high temperature cuprate superconductors// Reports on Progress in Physics– IOP Publishing, 2003.– V. 66.– P. 1547–1610.
- 64.Изюмов Ю.А., Плакида Н.М., Скрябин Ю.Н. Магнетизм в высокотемпературных сверхпроводящих соединениях// Успехи физических наук– Москва, 1989.–Т.159.–621 с.
- 65.Берсукер И.В. Эффект Яна-Теллера и выбранные взаимодействия в современной химии. М.:Наука, 1987. 343 с.

- 66.Anderson P.W. The theory of superconductivity in the high– T_c cuprates. (Princeton University Press, Princeton, 1997).–P.352.
- 67. Баллхаузен Ч. Введение в теорию поле лигандов. М.: Мир, 1964. 360 с.
- 68.Dagotto E. Correlated electrons in high-temperature superconductors// Review Modern Physics- Lancaster PA, 1994.-V.66.-P.763-840.
- 69.Damascelli A., Hussain Z., Shen Z.–X. Angle–resolved photoemission studies of the cuprate superconductors// Review Modern Physics– Lancaster PA, 2003.–V.75, No.2.–P.473–541.
- 70. Москвин А.С., Панов Ю.Д., Мельникова Н.В. Static and dynamic charge inhomogeneity and crystal–field fluctuations for 4f ions in high– T_c cuprates// Журнал экспериментальной и теоретической физики– Москва, 2004.– Т. 126. Вып. 5(11). С. 1267–1276.
- 71.Pickett W.E. Electronic structure of the high–temperature oxide superconductors// Review Modern Physics– Lancaster PA, 1989.–V.61.–P.433–512.
- 72. Pankaluoto R., Kaski K. Electronic Structure of the High– T_c Superconductor YBa₂Cu₃O₇: A detailed description// Physica Scripta– IOP Science, 1990.–V.1990.–P.227.
- 73. Horsh P., Stephan W. Electronic Properties of High– T_c Superconductors.– Springer, Berlin, 1993.– v. 113.– P. 351.
- 74. Аврамов П.В., Овчинников С.Г. Эффекты сильных электронных корреляций в рентгеновских и электронных спектрах ВТСП// Физика твердого тела Москва, 2000.—Т.42.—С.770.
- 75.Schwarz K. High temperature superconductors: Theory, Development, Perspectives// Microchimica Acta (Wien). –Springer, 1990.–V.101.–P.149–160.
- 76.Zaanen J., Sawatzky G.A., Allen J.W. Band gaps and electronic structure of transition-metal compounds// Physical Review Letters- Lancaster PA, 1985.– V.55.-P.418-421.
- 77. Toyozawa Y. Electron Induced Lattice Relaxation and defect Reactions// Physica B– North–Holland, 1983.–V.116.–P.7–17.

- 78.Dzhumanov S., Baimatov P.J., Ganiev O.K., Khudayberdiev Z.S., Turimov B.V. Possible mechanisms of carrier localization, metal—insulator transitions and stripe formation in inhomogeneous hole–doped cuprates // Journal of Physics and Chemistry of Solids.—Elsevier, 2012.—vol.73.—P. 484—494.
- 79. Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов.–Киев.: Наукова Думка, 1981.–327 с.
- 80. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь.—М.:Высшая школа, 1984.—295 с.
- 81.Emin D, Hillery M.S. Formation of a large singlet bipolaron: Application to high—temperature bipolaronic superconductivity// Physical Review B.—Ann Arbor, MI., 1989–V.39–P. 6575–6593.
- 82.Lushchik Ch., Kuusmann I., Feldbach E., Savikhin F., Bitov I., Kolk J., Leib T., Liblik P., Maaroos A. and Meriloo I. Radioactive and nonradioactive decay of electronic excitations in superconducting metal—insulators// Proc. Inst. Phys. Acad. Sci. Est. SSR. –V.63 (1989).–P. 137–176.
- 83.Lu J.P. and Si Q. Spin polarons in high– T_c copper oxides: Differences between electron–and hole–doped systems// Physical Review B.– Ann Arbor, MI.,1990.– V.42.–P.–950–953.
- 84. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М.: Наука, 1967. 491 с.
- 85.Weger M, Burlachkov L. Reduced screening at the Fermi surface of high– T_c cuprates// Physica C –Elsevier, 1994.–P. 2387–2388.
- 86.Baetzold R.C. Atomistic study of defects in YBa₂Cu₃O₇ // Physical Review B.– Ann Arbor, MI., 1990– V.42–P.56–66.
- 87.Dzhumanov S., Khidirov I., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Rashidov J.Sh. Distinctive features of metal-insulator transitions, multiscale phase separation, and related effects in hole-doped cuprates// Ukrainian Journal of Physics.-Kyiv, 2019.-vol.64, No.4.-P. 322-335.
- 88. Varyukhin S.V., Zakharov A.A. Anisotopic dielectric constant of La₂CuO₄ // Physica C –Elsevier, 1991.–V.185–189– P. 975–976.

- 89.Ino A., Mizokawa T., Kobayashi K., Fujimori A., Sasagawa T., Kimura T., Kishio K., Tamasaku K., Eisaki H and Uchida S. Doping dependent density of states and pseudogap behavior in La_{2-x}Sr_xCuO₄ // Physical Review Letters— Lancaster PA, 1998–V.81–P.2124–2127.
- 90.Ino A., Kim C., Nakamura M., Yoshida T., Mizokawa T., Fujimori A., Shen Z.– X., Kakeshita T., Eisaki H., Uchida S. Doping–dependent evolution of the electronic structure of La_{2-x}Sr_xCuO₄ in the superconducting and metallic phases // Physical Review B.– Ann Arbor, MI., 2002.– V.65.–P.094504.
- 91.Uchida S. Electronic structure of copper oxide superconductors Resent progress in the experimental study// Physica C–Amsterdam, 1991.–V.185–189.–P.28–33.
- 92. Verbist G., Peeters F.M., Devreese J.T. Possible (bi)polaron effects in the high–T_c superconductors // Physica Scripta– IOP Science, 1991.–V.39.–P.66-70.
- 93.Timusk T and Statt B. The pseudogap in high-temperature superconductors: an experimental survey//Reports on Progress in Physics- IOP Science, 1999.-V.62.- P.61-122.
- 94.Ekino T., Hashimoto S., Fujii H., Hori J., Nakamura F., Fujita T. Tunneling spectroscopy of the energy gap in semiconducting La_{1.98}Sr_{0.02}CuO₄ // Physica C–Amsterdam, 2001.– V.357–360.–P.158–161.
- 95. Suzuki M., Anagawa K., Lmouchter M., Watanabe T. Distinct superconducting gap and the pseudogap in the interlayer tunneling spectroscopy for $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ // Physica C-Amsterdam, 2001.-V.362.-P.164-168.
- 96.Dzhumanov S., Kurbanov U. Metal-insulator transitions in cuprate high-temperature superconductors// Eurasian Physical Technical Journal.— Karaganda, 2017.—Vol.14, No.1 (27).—pp. 49–55.
- 97.Dzhumanov S., Kurbanov U. The new metal—insulator transitions and nanoscale phase separation in doped cuprates// Superlattices and Microstructures.— Elsevier: Holland, 2015.— V. 84.—pp.66—71.
- 98. Kurbanov U.T., Ganiev O.K. Carrier localization and Mott metal-insulator transitions in hole-doped cuprates// Сборник тезисов докладов Республиканской научно-практической конференции молодых ученых

- посвященной 70-летию Академии наук Республики Узбекистан, 26 Декабря 2013.— Ташкент, 2013.— С.116.
- 99.Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S. Metal–insulator transitions in doped high temperature cuprate superconductors// «Nuclear Science and its Application»: Book of Abstracts of the VII Eurasian Conference October 21–24, 2014.– Baku, 2014.– pp. 255–256.
- 100.Dzhumanov S., Kurbanov U.T. Possible mechanisms of carrier localization and metal–insulator transitions in hole–doped cuprates// "Nuclear and radiation physics": Reports of the 10th International conference September 8–11, 2015. Kurchatov, 2016. p. 129–134.
- 101.Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Rashidov J.Sh. The coexisting insulating and metallic/superconducting phases and their manifestations in various underdoped cuprates// Book of Abstracts of the Seventh International Conference on Physical Electronics IPEC–7 May 18–19, 2018.— Tashkent, 2018.— pp. 129.
- 102.Kato T., Noguchi T., Saito R., Machida T., Sakata H. Gap distribution in overdoped La_{2-x}Sr_xCuO₄ observed by scanning tunneling spectroscopy// Physica C–Amsterdam, 2007.– V.460–462.–P.880–881.
- 103.Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Kurmantayev A. Possible quantitative criteria for the Mott and Anderson transitions in doped uncompensated systems // International Journal of Modern Physics, B.– World Scientific (Singapore), 2007.– V.21, №2.–P. 169–178.
- 104.Robertson H.P. The Uncertainty Principle// Physical Review-USA, 1929. -V.34.-P.163-164.
- 105. Шредингер Э. Избранные труды по квантовой механике. М.: Наука, 1976.- 422 с.
- 106. Соколов А.А., Тернов И.М. Квантовая механика и атомная физика. -М.: Просвещение, 1970.- 423 с.
- 107. Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А. Курс теоретической физики. Т.2.- М.: Наука, 1971.- 936 с.

- 108. Давыдов А.С.. Квантовая механика. М.: Наука, 1973 . 704 с.
- 109. Матвеев А.Н. Атомная физика. М.: Высшая школа, 1989. 439 с.
- 110. Тарасов В.Е. Вывод соотношения неопределенностей для квантовых гамильтоновых систем// Московское научное обозрение-Москва, 2011.- № 10.-С.3-6.
- 111. Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В. Квантовая физика. -М.: Наука, 2004.-496 с.
- 112. Фейнман Р. Статистическая механика.-М.: Мир, 1975.-412 с.
- 113. Ноздрев В.Ф., Сенкевич А.А. Курс теоретической физики.-М.: Высшая школа, 1965.-288 с.
- 114. Шпольский Э.В. Атомная физика. Т.2.-М.: Наука, 1974.-447 с.
- 115. Садовский М. В. Псевдощель в высокотемпературных сверхпроводниках// Успехи физических наук –Москва, 2001.–Т.171.–С.539–564.
- 116.Dzhumanov S., Karimboev E.X., Kurbanov U.T., Ganiev O.K., Djumanov Sh.S. Temperature–independent pseudogap and thermally activated *c*–axis hopping conductivity in layered cuprate superconductors// Superlattices and Microstructures.– Elsevier: Holland, 2014.– vol.68.–pp.6–15.
- 117.Dzhumanov S., Karimboev E.X., Kurbanov U.T., Ganiev O.K., Djumanov Sh.S., Khudayberdiev Z.S. Nanoscale phase separation and thermally activated *c*–axis hopping conductivity in layered cuprate superconductors// Uzbek Journal of Physics. –Ташкент, 2014.– Vol.16, №3.–C.187–196.
- 118.Dzhumanov S., Kurbanov U.T. Metal—insulator transitions and nanoscale phase separation in various underdoped cuprates// Eurasian Journal of Physics and Functional Materials.— Astana, 2018.—vol.2, No.3.—pp.219–230.
- 119.Dzhumanov S., Ganiev O.K., Khudayberdiev Z.S. Karimboev E.X., Kurbanov U.T. Metal-insulator transitions and stripe formation in cuprates// "Nuclear Science and Its Applications": Book of Abstracts of the International Conference September 25–28, 2012. Samarkand, 2012. p.282.
- 120. Курбанов У., Худайбердиев З.С., Каримбаев Э., Джуманов С. Возможные металл—диэлектрик переходы и наноразмерное разделение фаз в дырочно—легированны купратах// «Современные материалы и технологии»: Сборник

- докладов Международной конференции 21–23 Октября, 2015.–Тбилиси, 2015.–С.195–199.
- 121.Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Imamberdiyev S.S. The metal—insulator transitions and nanoscale phase separation and their manifestations in electronic properties of doped high— T_c cuprate cuperconductors// «Хозирги замон аник ва техник фанлар муаммолари ва уларнинг ечимлари» Республика илмий—назарий анжуман Материаллари II бўлим, Нукус, 2017й.—6.42—43.
- 122.Dzhumanov S., Kurbanov U.T. The metal–insulator transitions and nanoscale phase separation and their manifestations in electronic properties of doped high– T_c cuprate superconductors// «Nuclear Science and Technologies»: Book of Abstracts of the International Scientific Forum dedicated t the 60^{th} anniversary of the Institute of Nuclear Physics, September 12–15, 2017.— Almaty, 2017.— pp.215.
- 123.Raninger J., Robin J.M. The boson–fermion model of high– T_c superconductivity, Doping dependence// Physica C–Amsterdam, 1995.–V. 253.–P.279–291.
- 124. Stojkovic B.P., Pines D. Theory of the longitudinal and Hall conductivities of the cuprate superconductors// Physical Review B— Ann Arbor, MI., 1997—I.— V.55.— P.8576—8595.
- 125.Lee P.A., Nagaosa N., Wen X. G. Doping a Mott insulator: Physics of the cuprate superconductors// Review Modern Physics– Lancaster PA, 2006.–V.78.–P.17–85.
- 126.Sonier J.E., Brewer J.H., Kiefl R.F., Miller R.I., Morris G.D., Stronach C.E., Gardner J.S., Dunsiger S.R., Bonn D.A., Hardy W.N., Liang R., Heffner R.F. Anomalous weak magnetism in superconducting YBa₂Cu₃O_{6+x} // Science–USA, 2001.–V. 292.–P.1692–1695.
- 127.Alexandrov A.S. Theory of Superconductivity: From Weak to Strong Coupling Bristol: Institute of Physics publishing, 2003.–P.300.
- 128. Лущик Ч.Б., Лущик А.Ч. Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах. М.: Наука, 1989. 264 с.
- 129.Dzhumanov S and Khabibullaev P.K. Microscopic theory of single particle and pair condensation of an attacting Bose gas as the basis for superfluidity and 144

- superconductivity // Physica Status Solidi B- John Wiley&Sons,1989.-V.152.-P.395-413.
- 130.Sugai S. Local distortion specifying the superconductor phases observed by Raman Scattering// Physica C. –Amsterdam, 1991.–V. 185–189.–P.76–79.
- 131.Alexandrov A.S., Kabanov V.V. Parameter–free expression for superconducting T_c in cuprates // Physical Review B– Ann Arbor, MI., 1999.–V.59.–P.13628–13631.
- 132.Bi X.X., Eklund P.C. Polaron contribution to the infrared optical response of $La_{2-x}Sr_xCuO_{4+\delta}$ and $La_{2-x}Sr_xNiO_{4+\delta}$ // Physical Review Letters–USA, 1993.–V.70.– P.2625–2628.
- 133.Basov D.N., Timusk T. Electrodynamics of high– T_c superconductors// Review Modern Physics– Lancaster PA, 2005.–V.77.–P.721–779.
- 134.Puchkov A.V., Basov D.N. and Timusk T. The pseudogap state in high–superconductors: an infrared study// Journal of Physics: Condensed Matter–Bristol, 1996.–V.8.–P. 10049.
- 135.Le Tacon M., Bosak A., Souliou S.M., Dellea G., Loew T., Heid R., Bohnen K–P., Ghiringhelli G., Krisch M., Keimer B. Inelastic *X*–ray scattering in YBa₂Cu₃O_{6.6} reveals giant phonon anomalies and elastic central peak due to charge–density–wave formation// Nature Physics– Springer, London, 2014.–V.10.–P.52–58.
- 136.Forgan E.M., Blackburn E., Holmes A.T., Briffa A.K.R., Chang J., Bouchenoire L., Brown S.D., Liang Ruixing., Bonn D., Hardy W.N., Christensen N.B., Zimmermann M.V., Hucker M., Hayden S.M. The nature of the charge density waves in under–doped *YBa*₂*Cu*₃*O*_{6.54} revealed by x–ray measurements of the ionic displacements// Nature Communications– Nature Publishing Group, 2015.–V.6.–P.10064.
- 137.Miao M, Ishikawa D, Heid R, Le Takon M, Fabbris G, Meyers D. Incommensurate phonon anomaly and the nature of charge density waves in cuprates// Physical Review X–USA, 2018.–V.8.–P.011008(1)–011008(9).

- 138.Джуманов С., Курбанов У.Т., Худайбердиев З.С., Хафизов А.Р. Металл—диэлектрик переходы и магнитная восприимчивость в легированных купратных соединениях// Физика низких температур.—Харьков, 2016.—Т.42.—С.1345—1353; Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Hafizov A.R. Metal—insulator transitions and magnetic susceptibility in doped cuprate compounds// Low Temperature Physics.—USA, 2016.— V.42, №11.—pp.1057—1062.
- 139. Tranquada J.M. Phase separation, charge segregation, and superconductivity in layered cuprates. In "Neutron Scattering in layered Copper—Oxide Superconductors". Ed. by A. Furrer. Dordrecht.: Kluwer. The Netherlands. 1998.—pp.225–260.
- 140.Mihailovic D., Mertelj T., Muller K.A. a–b plane optical conductivity of YBa₂Cu₃O_{7– δ} above and below T^* // Physical Review B– Ann Arbor, MI., 1998–II.–V.57.–P.6116–6120.
- 141. Anshukova N.V., Golovashkin A.I., Ivanova L.I., Rusakov A.P. The effect of superstructural ordering on the properties of high–temperature oxide superconductor systems// Журнал экспериментальной и теоретической физики–Москва, 2003.–Т.123.–С.1188–1199.
- 142.Sakita Sh., Nakamura F., Suzuki T., Fujita T. Structural transitions and localization in $La_{2-x-y}Nd_ySr_xCuO_4$ with p similar to 1/8 // Journal of Physical Society of Japan–Japan, 1999.–V.68.–P.2755–2761.
- 143.Koike Y., Akoshima M., Aoyama M., Nishimaki K., Kawamata T., Adachi T., Noji T., Kato M., Watanabe I., Ohira S., Higemoto W., Nagamine K., Kimura H., Hirota K., Yamada K., Endoh Y. *Cu*–site–substitution effects on the 1/8 anomaly in the high– T_c cuprates and on the anomaly at x=0.21 in La_{2-x}Sr_xCuO₄ // Physica C–Amsterdam, 2001.–V.357–360.–P.82–88.
- 144.Fink J., Nucker N., Alexander M., Romberg H., Knupeer M., Merkel M., Adelmann P., Claessen R., Mante G., Buslaps T., Harm S., Manzke R., Skibowski M. High–energy spectroscopy studies of high– T_c superconductors// Physica C–Amsterdam, 1991.–V.185–189.–P.45–50.

- 145.Ono S., Ando Y., Murayama T., Balakirev F.F., Betts J.B., Boebinger G.S. Low-temperature normal state of $Bi_2Sr_{2-x}La_xCuO_{6+d}$: comparison with La_{2-x}Sr_xCuO₄//Physica C-Amsterdam, 2001.-V.357-360.-P.138-141.
- 146.Ichikawa N., Uchida S., Tranquada J.M., Niemöller T., Gehring P.M., Lee S–H., Schneider J.R. Local magnetic order vs superconductivity in a layered cuprate// Physical Review Letters–USA, 2000.–V.85.–P.1738–1741.
- 147.Pines D. Spin fluctuations and $d_{x^2-y^2}$ pairing in high–temperature superconductors// Turkish journal of Physics–Turkey, 1996.–V.20.–P.535–547.
- 148. Abrikosov A.A. Resonant tunneling in high– T_c superconductors// Physics–Uspekhi Moskow, 1998.–V.41.–P.605–616.
- 149.Komiya S., Ando Y., Sun X.F., Lavrov A.N. *c*–axis transport and resistivity anisotropy of lightly to moderately doped La2–xSrxCuO4 single crystals:Implications on the charge transport mechanism// Physical Review B–Ann Arbor, MI., 2002.– V.65.–P.214535.
- 150.Джуманов С., Курбанов У.Т., Явидов Б.Я. Механизмы локализации носителей заряда и магнитная восприимчивость в легированных купратах// Доклады Академии наук Республики Узбекистан—Ташкент, 2017.— №3.—С. 23–26.
- 151.Dzhumanov S., Kurbanov U.T. The coexistence of insulating and metallic/superconducting phases and their competing effects in various underdoped cuprates// Modern Physics Letters B.— World Scientific (Singapore), 2018.–V.32.–P.1850312 (1–10).
- 152.Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Rashidov J.Sh. Coexisting insulating and metallic/superconducting phases and their role in normal state properties of underdoped cuprates// Доклады Академии наук Республики Узбекистан.— Ташкент, 2018.— №3.—С.22—27.
- 153. Джуманов С., Курбанов У.Т. Сосуществующие диэлектрические и металлические/сверхпроводящие фазы и их конкурирующие эффекты в различных недолегированных купратах// «Физика твердого тела, Функциональные материалы и новые технологии (ФТТ–2018)» Материалы

- XIV Международной научной конференции, посвященной 80-летию основателя конференции профессора Т.А. Кукетаева, 1–4 августа 2018 г. Бишкек–Караганда, 2018. С.42–45.
- 154.Dzhumanov S., Kurbanov U.T., Khudayberdiev Z.S., Rashidov J.Sh. Nanoscale phase separation and coexisting insulating, metallic and superconducting phases in underdoped cuprates// Materials and Mechamisms of superconductivity and high temperature superconductors— Book of Abstracts of the 12th International Conference August 19–24, 2018. –Beijing, China, 2018.–P.717.
- 155.Nakano T., Oda M., Manabe C., Momono N., Miura Y., and Ido M. Magnetic properties and electronic conduction of superconducting $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ // Physical Review B– Ann Arbor, MI., 1994.–V.49.–P.16000–16008.
- 156.Roulin M., Revas B., Junod A., Erb A., and Walker E. in Physics and Material Science of Vortex States, Flux Pinning and Dynamics. Eds. Kossowsky R., Bose S., Durusoy Z., and Pan V.–Springer, New York, 1999.–P.489–504.
- 157.Eagles D.M. Possible Pairing without Superconductivity at Low Carrier Concentrations in Bulk and Thin–Film Superconducting Semiconductors // Physical Review–USA, 1969.–V.186–P.456–463.
- 158.Kivelson S.A., Bindloss I.P., Fradkin E., Oganesyan V., Tranquada J.M., Kapitulnik A., and Howald C. How to detect fluctuating stripes in the high–temperature superconductors// Review Modern Physics– Lancaster PA, 2003 V.75, №4 –P.1201–1241.
- 159.Loram J.W., Mirza K.A., Wade J.M., Cooper J.R., and Liang W.Y. The electronic specific heat of cuprate superconductors// Physica C –Amsterdam, 1994.–V.235–240.–P.134–137.
- 160. Tajima S., Schütsmann J., Miyamoto S., Terasaki I., Sato Y., Hauff R. Optical study of *c*–axis charge dynamics in YBa₂Cu₃O_y: Carrier self–confinement in the normal and the superconducting states// Physical Review B– Ann Arbor, MI., 1997.–V.55.–P.6051–6060.