

POLARON MASSASINING TARANGLIK (BOSIM) BO'YICHA HOSILALARI

D.G'Xajibayev – tayanch doktorant

B.Yavidov – fizika-matematika fanlari doktori

Ajiniyoz nomidagi Nukus davlat pedagogika instituti

Tayanch so'zlar: kengaytirilgan Holstein modeli, tarang kristal, polaron massasi, bir o'qli taranglik (bosim).

Ключевые слова: расширенная модель Холстейна, упругий кристалл, масса полярона, одноосная упругость (давление).

Key words: extended Holstein model, strained crystal, mass of polaron, uniaxial strain (pressure).

I. **Kirish.** Qattiq jismning issiqlik, elekt va optikaviy xossalari zaryad tashuvchisi va kristal panjara dinamikasi bilan aniqlanadi. Zaryad tashuvchisi holati va dinamikasining o'zi ham zaryad tashuvchisi va kristal panjara orasidagi o'zaro ta'sirlashuvga bog'liq. Bu ta'sirlashuv kvant fizikasida elektron-fonon ta'sirlashuvi (EFT) deb ataladi. EFT natijasida zaryad tashuvchisi avtolokallashgan holatga o'tishi birinchi bo'lib Landau tarafidan bashorat qilingan [1]. Qutbli kristal panjarada zaryad tashuvchisi avtolokallashgan holatini *polaron* deb atashni esa Pekar taklif qilgan [2,3]. Qariyb, bir asrlik davr mobaynida polaron fizikasi keng qamrovda rivojlandi [4,5]. Hozirda, ko'pchilik modda va birikmalarda zaryad tashuvchisi polaron xossalriga ega ekanligi tajribalarda tasdiqlangan [6]. Polaron tamoyili qattiq jismlar fizikasida muhit ahamiyat kasb etishi ko'pchilik tomonidan tan olingan va hatto yirik kashfiyotlarga yetaklagan. Xususan, XX asrning 1986-yilidagi yuqori haroratli o'tao'tkazuvchanlik (YHO'O') hodisasi kashfiyoti [7] ham aynan polaron tamoyili negizida sodir bo'lgan edi [8]. Keyinchalik bajarilgan tajribalar kuprat birikmalarida kechuvchi elektr, magnit va optik jarayonlarda polaron o'zini namoyon etishini ko'rsatdi. Shu asnoda, YHO'O' hodisasini polaron tamoyili negizida tushuntirishga qaratilgan ko'plagan nazariy modellar yaratildi. Ana shunday modellardan biri kengaytirilgan Holstein modeli (KHM) hisoblanadi [9]. KHM negizida, noadiabatik yaqinlashuvda va EFT yetarlicha kuchli bo'lganda, kuprat kristalida polaron massasi, "o'tao'tkazuvchanlikning polaron nazariyasi" tanqidchilari bashoratlari kabi, juda katta bo'lmasligi ko'rsatildi. KHM negizida hisoblangan polaron massasining an'anaviy Holstein modeli negizida hisoblangan polaron massasidan, adiabatik yaqinlashuvda ham, kichik bo'lishi [10] ishda ko'rsatilgan. KHM polaroni xossalari o'rganish bo'yicha ancha ishlar borligiga qaramasdan[11-20], YHO'O' birikmalarida polaron massasining tashqi omillarga bog'liq ravishda o'zgarishi haligacha yetarlicha yoritilmay qolmoqda. Xususan, kristal panjara bir o'qli tarangligi (deformatsiyasi) va tashqi bir o'qli bosimlarining KHM polaroni massasining nisbiy o'zgarishi miqdoriy o'rganilmagan. Shu sabab, biz ushbu maqolada aynan o'sha masalaning, $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ kuprat birikmasi misolida, miqdoriy tomonlarini yoritamiz. Olingan natijalar YHO'O' moddalar kritik harorati T_c qiymatining tashqi omil, jumladan, tasqi borim (taranglik)ga bog'liqligini talqin qilishda ishlatilishi mumkin.

II. **Nazariy model.** Polaron massasi EFT doimiysi $\lambda = E_p / zW$ (bu yerda E_p - polaron energiyai, D - o'tkazuvchanlik zonasini yarim e'ni) ga bog'liq. Biz ushbu maqolada $\lambda \geq 0.5$ tengsizlik, ya'ni kuchli EFT, bilan tavsiflanuvchi panjara polaroni massasining kristal panjara tarangligiga bog'liqligini kengaytirilgan Holstein modeli (KHM) negizida o'rganamiz [9]. KHM negizida polaron

massasi $m_p = m^* \cdot \exp[g^2]$ ifoda bo'yicha aniqlanadi.

Bunda m^* - zaryad tashuvchisining o'tkazuvchanlik zonasidagi massasi (keyinchalik $m^* = 1$ deb qabul qilamiz) va g^2 - polaron massasi eksponensial ortishi koeffitsienti.

Kupratlarning zanjir panjarasi modelida g^2 - polaron massasi eksponensial ortishi koeffitsienti quyidagicha aniqlandi:

$$g^2 = \frac{1}{2M\hbar\omega^3} \sum_{\vec{m}} [f_{\vec{m}}^2(\vec{n}) - f_{\vec{m}}(\vec{n}) \cdot f_{\vec{m}}(\vec{n} + \vec{a})] \quad (1)$$

Oxirgi formuladagi M - apikal kislorod massasi, $\hbar\omega$ - kupratlarga xos fonon energiyasi bo'lib, odatda u 75 meV deb qabul qilinadi, $f_{\vec{m}}(\vec{n})$ - EFT kuchi bo'lib, qandaydir ma'noda kuprat tarkibidagi CuO_2 tekisligining $\vec{n}$ - tugunidagi zaryad tashuvchisining $\vec{m}$ - tugundagi apikal kislorod ioni bilan ta'sirlashuvini tavsiflaydi va uning analitik ifodasi quyidagi formula bilan aniqlanadi:

$$f_{\vec{m}}(\vec{n}) = \frac{kc(1 - \varepsilon_c)}{(|(\vec{n} - \vec{m})a(1 - \varepsilon_i)|^2 - (c(1 - \varepsilon_c))^2)^{3/2}}. \quad (2)$$

Bu yerda, k - qandaydir doimiy, a - CuO_2 tekislidagi a -yoki b -o'qlar bo'yicha panjara davri, c - esa, kuprat kristal

panjarasining ab -tekislikka tik yo'nalishdagi davri, ε_a (ε_c) - panjaraning a - (c -) davri nisbiy deformatsiyasi (tarangligi). Kristal panjara davrlari tarangliklari

$$\varepsilon_a = \frac{a_0 - a_t}{a_0} \text{ va } \varepsilon_c = \frac{c_0 - c_t}{c_0}. \quad (3)$$

formula bo'yicha aniqlanadi. Bu yerda, a_0 - va c_0 (a_t - va c_t)-panjaraning taranglashmagan (taranglashgan) davrlari. Ya'ni musbat taranglik siqilishini, manfiy taranglik esa cho'zilishni anglatadi. Yuqoridagi munosabatlardan polaron massasidan bir o'qli taranglik bo'yicha olingan hosilasini aniqlash mumkin ($i=a,c$):

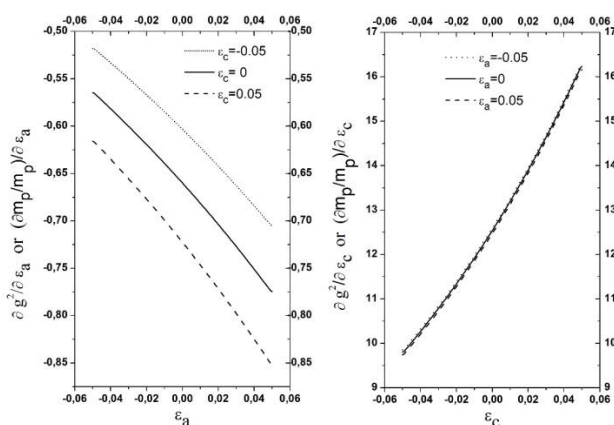
$$\frac{1}{m_p} \frac{\partial m_p}{\partial \varepsilon_i} = \frac{\partial g^2}{\partial \varepsilon_i}. \quad (4)$$

Polaron massasidan bir o'qli bosim bo'yicha olingan hosilasini aniqlash uchun yuqoridagi munosabatlarda

$\varepsilon_i = \kappa_i P_i$ almashtirish bajarish kerak (κ_i - i -o'qi

bo'yicha panjara davri siqiluvchanligi, P_i - i -o'qi bo'yicha qo'yilgan bosim).

III. **Hisoblash natijalari va muhokama.** $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ kuprat birikmasi tetragonal kristal strukturaga ega deb qaraymiz: $a=3.8370 \text{ \AA}$ va $c=27.1844 \text{ \AA}$ [21]. CuO_2 tekisligidan tashqaridagi apikal kislorod vaziyati $z=0.0522$ [21] bilan aniqlanadi. U holda Cu-O_{ap} masofa $h_0=1.4190 \text{ \AA}$ ga teng bo'ladi. Yuqoridagi (2) va (3) formulalarda biz c o'rniga h_0 ni ishlatamiz. Bir o'qli taranglik bo'yicha polaron massasidan olingan hosilaviy


 1-rasm. Bir o'qli taranglik ε_i ($i=a,c$) bo'yicha

polaron massasidan olingan hosilalar.

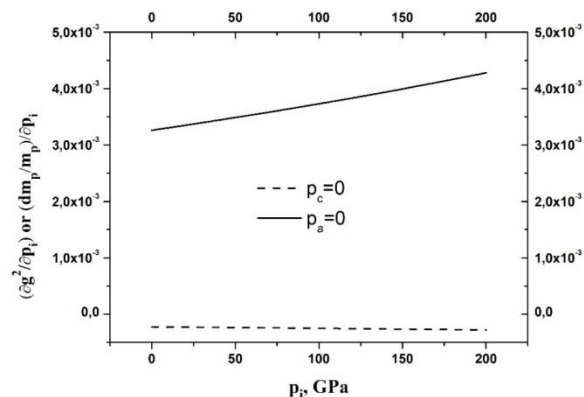
qiyamatlar 1-rasmda aks ettirilgan. Rasmdan ko'rinib turganidek bir o'qli taranglik bo'yicha polaron massasidan olingan hosilalarning o'zlari tarangliklar funksiyalaridir. Kristal panjaraning a-o'qining siqilishi (cho'zilishi), $(1/m_p)\partial m_p / \partial \varepsilon_a < 0$ bo'lganlikdan, polaron massasining kamayishi (ortishi) ga olib keladi. Xuddi, shunday, c-o'qining siqilishi (cho'zilishi), $(1/m_p)\partial m_p / \partial \varepsilon_c > 0$ bo'lganlikdan, polaron massasining ortishi (kamayishi) ga olib keladi. Bu hosilalarning a- va c-o'qlarga mos ifodalari uchun quyidagilar son qiymatlarni topamiz: $(1/m_p)\partial m_p / \partial \varepsilon_a \approx -2$ va $(1/m_p)\partial m_p / \partial \varepsilon_c \approx 6.5$.

Bir o'qli bosim p_i ($i=a,c$) bo'yicha polaron massasidan olingan hosilalarning son qiymatini hisoblash uchun, misol tariqasida qarayotgan $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ kuprat birikmasining mos o'qlar bo'yicha siqiluvchanligini inobatga olish dardkor. $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ kuprat birikmasining a- va c-o'qlar bo'yicha siqiluvchanligi son qiymatlari, mos ravishda, $\kappa_a = 3.05 \cdot 10^{-3} \text{ GPa}^{-1}$ va $\kappa_c = 4.00 \cdot 10^{-3} \text{ GPa}^{-1}$ [22]. Bu son qiymatlarni inobatga olib aniqlangan $(1/m_p)\partial m_p / \partial p_a$ va $(1/m_p)\partial m_p / \partial p_c$ larning taranglik ε_i ($i=a,c$) larga bog'liqlik funksiyasi grafiklari 2-rasmda keltirilgan. Rasmdan ko'rinib turganidek, polaron massasidan a- va c-o'qlar bo'yicha olingan hosilalar farqlanadi. Xususan, $(1/m_p)\partial m_p / \partial p_a < 0$ va $(1/m_p)\partial m_p / \partial p_c > 0$.

Shuningdek

$|(1/m_p)\partial m_p / \partial p_c| > |(1/m_p)\partial m_p / \partial p_a|$. Xuddi yuqoridagidek, kristal panjaraning a-o'qi bo'yicha tashqi bosim bilan ta'sir qilish (siqilish), $(1/m_p)\partial m_p / \partial p_a < 0$ sabab, polaron massasining kamayishi ga olib keladi, c-o'q bo'yicha ta'sir etgan tashqi bosim (siqilishi), $(1/m_p)\partial m_p / \partial p_c > 0$ sabab, polaron massasining ortishiga olib keladi. Bir o'qli tashqi bosim a-o'qi (c-o'qi) bo'yicha 0 dan 200 GPa ga orttirilganda $(1/m_p)\partial m_p / \partial p_a$

$((1/m_p)\partial m_p / \partial p_c)$ ning son qiymati $-22 \cdot 10^{-5} \text{ GPa}^{-1}$ dan $-28 \cdot 10^{-5} \text{ GPa}^{-1}$ gacha ($32 \cdot 10^{-4} \text{ GPa}^{-1}$ dan $42 \cdot 10^{-4} \text{ GPa}^{-1}$ gacha) o'zgaradi. Hosilaviy miqdorlarning son qiymatlari kristal panjara kuchli anizotropiya xossasiga ega ekanligini ko'rsatadi. Anizotropiya koeffitsienti $\gamma = (\partial m_p / \partial p_c) / (\partial m_p / \partial p_a)$ son qiymati taxminan 10 ga teng.


 2-rasm. Bir o'qli bosim p_i ($i=a,c$) bo'yicha polaron massasidan olingan hosilalar.

Qarayotgan kristal panjara tashqi gidrostatik bosim ostida bo'lganida polaron massasining o'zgarishi yuqoridagi hosilaviy miqdorlarga hamda o'qlar bo'yicha mos panjara davrlari nisbiy deformatsiyalari o'zaro munosabati ya'ni Puasson koeffitsientiga bog'liq bo'ladi. Olingan natijalar $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ va boshqa kuprat birikmalarining tashqi bosim ta'siridagi xossalarini, xususan magnit maydoni singish chuqurligining tashqi bosim ta'sirida o'zgarishini [23], talqin qilishda ishlatilishi mumkin.

IV. **Xulosa.** Biz ushbu maqolada KHM negizida polaron massasining bir o'qli taranglik va tashqi bosim ta'sirida o'zgarishini o'rgandik. Buning uchun $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ birikmasi kupratlarining zanjir panjarasi modeli qaraldi. Hisoblash natijalari polaron massasi a- va c-o'qlar bo'yicha yo'nalgan bir o'qli taranglik va bosim ta'sirida o'zgarishini ko'rsatadi. Polaron massasining nisbiy o'zgarishlari uchun $(1/m_p)\partial m_p / \partial p_a < 0$, $(1/m_p)\partial m_p / \partial p_c > 0$ natijalar topildi.

Shuningdek

$|(1/m_p)\partial m_p / \partial p_c| > |(1/m_p)\partial m_p / \partial p_a|$. Panjaraning a-o'qi bo'yicha qo'yilgan tashqi bosim polaron massasining kamayishiga, c-o'q bo'yicha qo'yilgan tashqi bosim esa polaron massasining ortishiga olib kelishi aniqlandi. Tashqi gidrostatik bosim ta'sirida polaron massasining qanday o'zgarishi topilgan hosilaviy miqdorlarga hamda o'qlar bo'yicha mos panjara davrlari nisbiy deformatsiyalarini o'zaro bog'lovchi Puasson koeffitsientiga bog'liqligi ta'kidlangan. Topilgan natijalar $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ va boshqa kuprat birikmalarining tashqi bosim (taranglik) ta'siridagi xossalarini talqin qilishda ishlatilishi mumkin.

Adabiyotlar

1. Landau L.D. Sow. Phys. **3** (1933) 664.
2. Pekar S.. Zh. Eksp. Teor. Fiz. **16** (1946) 341.
3. Pekar. S.I. Journal of Physics USSR **10** (1946) 341.
4. Emin D. Polarons, Cambridge University Press, 2013.
5. Chatterjee A., Mukhopadhyay S.. Polarons and Bipolarons: An Introduction, Taylor & Francis, 2019.
6. Polarons in Advanced Materials, A.S.Alexandrov (editor), Springer, 2007.
7. Bednorz J.G., Müller K.A. Z. Phys. B **64** (1986) 189.

8. Bednorz J.G., Müller K.A. Rev. Mod. Phys. **60** (1988) 585.
9. Alexandrov A.S. and Kornilovitch P.E. Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 807.
10. Alexandrov A.S. and Yavidov B.Ya. Phys. Rev. B **69** (2004) 073101.
11. Feshke H., Loos J., Wellein G. Phys. Rev. B **61** (2000) 8016.
12. Bonca J., Trugman S.A. Phys. Rev. B **64** (2001) 094507.
13. Trugman S.A., J.Bonç'a, L.-C.Ku. Int. J. Modern Phys. B **15** (2001) 2707.
14. Perroni C.A., Cataudella V., DeFilippis G., J. Phys.: Condens. Matter B **16** (2004) 1593.
15. Hohenadler M., Evertz H.G., W. von der Linden. Phys. Rev. B **69** (2004) 024301.
16. Yavidov B. Physica B **404** (2009) 3756.
17. Monoddeep Chakraborty, B. I. Min. Phys. Rev. B **88** (2013) 024302.
18. F.Hébert et al., Phys. Rev. B **99** (2019) 075108.
19. W.H.Sio et al., Phys. Rev. Lett. **122** (2019) 246403.
20. W.H.Sio et al., Phys. Rev. Rev. B **99** (2019) 235139.
21. E.Kaldis et al., Physica C **159** (1989) 668.
22. A.L.Cornelius, S.Klotz, J.S.Schilling. Physica C **197** (1992) 209.
23. R.Khasanov, J.Karpinski, H.Keller. J.Phys.: Condens. Matter **17** (2005) 2453.

РЕЗЮМЕ. Мақоллада панжара поларони массаси масаласи таранг кристал панжарада қаралган. Поларон массасини ҳисоблаш учун Кенгайтирилган Holstein модели қўлланилган. Кристал панжара сифатда купратларниг занжир модели қабул қилинган. Ташқи босим та'сирда купратларниг CuO_2 текислиги a - ва b - даврлари қисқарishi натижасида поларон массаси камайиши, c - даври қисқарishi эса поларон массасиниг ортishi кў'рсатилган. Олинган натижалар купратларга оид тајриба натижаларини таққин қилишда ишлатилиши мумкин.

РЕЗЮМЕ. В статье рассмотрена задача о массе решеточного полярона в упругой кристаллической решетке. Для вычисления массы полярона использована расширенная модель Холстейна. В качестве решетки принята цепочечная модель купратов. Показано, что сжатие, внешним давлением, a - и b - периодов CuO_2 плоскости приводит к уменьшению, а сжатие c - периода приводит к увеличению массы полярона. Полученные результаты могут быть использованы в интерпретации экспериментальных данных по купратам.

SUMMARY. In this article is considered a problem of mass of a lattice polaron. Extended Holstein model is used in order to calculate the mass of polaron. A chain model is accepted for a lattice. It is shown that compression by external pressure a - and b - periods of CuO_2 plane gives rise a reduction of polaron's mass, while compression by external pressure c - period gives rise an increase of polaron's mass. The obtained results might be used in interpretation of experimental data on cuprates.

ЗАДАЧА С КОНОРМАЛЬНОЙ ПРОИЗВОДНОЙ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ТИПА С ОДНОЙ ЛИНИЕЙ ВЫРОЖДЕНИЯ

Х.Исламов – преподаватель

Педагогический институт Термезского государственного университета

Таянч сўзлар: конормал ҳосила, бузилиш чизиги, эгри чизик, Гёльдер шарти, гипергеометрик функция.

Ключевые слова: конормальное производные, линия вырождения, краевые линия, условия Гёльдера, гипергеометрическая функция.

Key words: conormal derivatives, deterioration line, edge lines, Gelder terms, hypergeometric function.

Краевые задачи с условиями Пуанкаре или с конормальной производной для уравнения Трикоми Лаврентьева – Бицадзе Геллерстедта и более общих уравнений изучены в работах [1,10].

Краевые задачи с конормальной производной для уравнений эллиптического типа с одной линией вырождения, в случае когда на линии вырождения задается, след или производная от искомой функции а также их линейный комбинации изучении сравнительно мало. Отметим работу М.А.Усанаташвили [9]. В настоящей работе изучается краевая задача с конормальной производной для уравнения эллиптического типа с одной линией вырождения. Задача Дирихле и Неймана для вырождающегося уравнения эллиптического типа были исследованы в работах [1-2], в задача Трикоми и ее аналоги для уравнения смешанного типа с одной линией вырождения изучены работах [3, 9].

Рассмотрим уравнение

$$y^m u_{xx} + u_{yy} = 0, m = \text{const} > 0. \quad (1)$$

Пусть D -конечная односвязная область в плоскости (x, y) ограниченная при $x > 0, y > 0$ кривой σ с концами в точках $A(0,0)$ и $B(1,0)$

Отрезками AB .

Введем обозначения $J = \{(x, y) : 0 < x < 1, y = 0\}$,

$$\partial D = \overline{\sigma} \cup \overline{AB} \quad 2\beta = \frac{m}{m+2} \quad \text{причем} \quad 0 < \beta < \frac{1}{2}. \quad (2)$$

В области D уравнения (1) исследуем следующую задачу.

Задача СК. Найти функцию $u(x, y)$ обладающую следующими свойствами:

1) $u(x, y) \in C(\overline{D}) \cap C^1(D \cup \sigma \cup J)$ причем u_x и u_y соответственно могут обращаться бесконечность порядка меньше единицы в $1-2\beta$ в точках $A(0,0)$ и $B(1,0)$,

2) $u(x, y)$ - дважды непрерывно дифференцируемое решение уравнения (1) в области D ,

3) $u(x, y)$ удовлетворяет краевым условиям

$$(\delta(s)A_s[u] + \rho(s)u)|_{\sigma} = \varphi(s), \quad 0 \leq s \leq l, \quad (3)$$

$$a_0(x)u_y(x,0) + \sum_{j=1}^n a_j(x)D_{0x}^{a_j} u(x,0) + a_{n+1}(x)u(x,0) = b(x) \quad (x,0) \in J, \quad (4)$$

где $\delta(s), \rho(s), \varphi(s), a_0(x), a_j(x) (j=1, n)$

$a_{n+1}(x), b(x)$ заданные функции, причем

$$b(0) = 0, a_0(0) \neq 0$$

$$\delta^2(s) + \rho^2(s) \neq 0, \quad \forall x \in [0, l]. \quad (5)$$

$$\sum_{i=0}^{n+1} a_i^2(x) \neq 0 \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (6)$$

$$\delta(s), \rho(s), \varphi(s) \in C[0, l] \quad (7)$$

$$a_j(x), b(x) \in C(\overline{J}) \cap C^2(J) \quad j = 0, n+1 \quad (8)$$

$$\text{здесь } A_s[u] \equiv y^m \frac{dy}{ds} \cdot \frac{\partial}{\partial x} - \frac{dx}{ds} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \quad (9)$$

$$\frac{dy}{ds} = \cos(n, x), \quad \frac{dx}{ds} = -\cos(n, y) \quad n - \text{внешняя}$$