

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.945

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.02.006

## **ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА СИЛЬНОВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННЫХ СИСТЕМ С ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА**

**Станислава Валерьевна Доронкина<sup>1</sup>, Роланд Рудикович Арутюнян<sup>2</sup>,  
Анна Эдуардовна Мясникова<sup>3†</sup>**

<sup>1, 2, 3</sup> Южный федеральный университет, ул. Большая Садовая, 105/42, 344006, Ростов-на-Дону, Россия

<sup>1</sup> doronkina1234@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-0546-8740>

<sup>2</sup> rarutyunyan@sfedu.ru

<sup>3</sup> myasnikova67@yandex.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0001-7262-8292>

**Аннотация.** В данной работе исследуется фазовая диаграмма допирование-температура систем с сильным дальнедействующим (фрёлыховским) электрон-фононным взаимодействием с целью демонстрации единой природы фаз сверхпроводимости, зарядового упорядочения и псевдощели высокотемпературных сверхпроводников на основе оксида меди (купратов). Обычно фазы псевдощели и зарядового упорядочения купратов рассматривались как конкурирующие со сверхпроводящей фазой. Однако, результаты недавних экспериментальных исследований позволили сделать предположение о единой природе трех указанных фаз. В данной работе для проверки этого предположения была рассчитана свободная энергия двухжидкостной системы носителей заряда, включающей жидкость биполяронов большого радиуса и Ферми-жидкость делокализованных носителей. Фазовая диаграмма системы с сильным электрон-фононным взаимодействием строилась путем минимизации свободной энергии системы относительно радиуса биполяронов (связанного с периодом зарядового упорядочения). Сравнение полученной энергии со свободной энергией системы без биполяронов определяет температуру распада биполяронной жидкости. Для расчета свободной энергии использовалась функция распределения носителей заряда по автолокализованным и делокализованным состояниям, полученная методом Гиббса, для расчета температуры сверхтекучего (сверхпроводящего) перехода использовался стандартный метод Бозе-жидкости Ландау. В результате продемонстрировано, что фазы сверхпроводимости, зарядового упорядочения и псевдощели имеют общую природу, связанную с существованием жидкости биполяронов большого радиуса. Рассчитанное расположение областей, соответствующих этим фазам на фазовой диаграмме сильнодействующих электрон-фононных систем, совпадает с положением этих фаз на экспериментальной диаграмме купратов.

**Ключевые слова:** купратные высокотемпературные сверхпроводники, фазовая диаграмма купратов, биполяроны, электрон-фононное взаимодействие, волна зарядовой плотности, псевдощель.

---

**Для цитирования:** Доронкина С.В., Арутюнян Р.Р., Мясникова А.Э. Фазовая диаграмма сильнодействующих электрон-фононных систем с высокой плотностью носителей заряда // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 2. С. 192–200. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.02.006.

---

Original article

## PHASE DIAGRAM OF STRONGLY INTERACTING ELECTRON-PHONON SYSTEMS WITH HIGH DENSITY OF CHARGE CARRIERS

Stanislava V. Doronkina<sup>1</sup>, Roland R. Arutyunyan<sup>2</sup>, Anna E. Myasnikova<sup>3†</sup>

<sup>1,2,3</sup> Southern Federal University, Bolshaya Sadovaya Str., 105/42, Rostov-on-Don, 344006, Russia

<sup>1</sup> doronkina1234@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-0546-8740>

<sup>2</sup> rarutyunyan@sfnedu.ru

<sup>3</sup> myasnikova67@yandex.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0001-7262-8292>

**Abstract.** In this article, in order to demonstrate the common nature of superconducting, charge ordering and pseudogap phases of high-temperature copper-oxide-based superconductors (cuprates) we study the temperature-doping phase diagram of systems with strong long-range (Fröhlich) electron-phonon interaction. Conventionally, the pseudogap and charge ordering phases of cuprates were considered as competing with the superconducting phase. However, the results of recent experimental studies have made it possible to suggest the common nature of the three mentioned phases. To test this assumption, we calculate the free energy of a two-liquid system of charge carriers, which includes a large bipolaron liquid and Fermi-liquid of delocalized carriers. The phase diagram of a system with a strong electron-phonon interaction is constructed by minimizing the free energy of the system with respect to the bipolaron radius (related to the charge ordering period). Comparison of the obtained energy with the free energy of the system without bipolarons determines the temperature of decay of the bipolaron liquid. To calculate the free energy, we use the distribution function of charge carriers over autolocalized and delocalized states, obtained by the Gibbs method. To calculate the temperature of the superfluid (superconducting) transition, we use the standard Landau Bose-liquid method. As a result, it was demonstrated that the superconducting, charge ordering, and pseudogap phases have a common nature associated with the existence of large bipolaron liquid. The calculated position of the regions corresponding to these phases in the phase diagram of strongly interacting electron-phonon systems coincides with the location of these phases in the experimental diagram of cuprates.

**Keywords:** hole-doped cuprate high temperature superconductors, phase diagram of cuprate superconductors, bipolarons, Fröhlich electron-phonon interaction, charge density wave, pseudogap.

**For citation:** Doronkina, S. V., Arutyunyan, R. R. & Myasnikova, A. E. (2023). Phase diagram of strongly interacting electron-phonon systems with high density of charge carriers. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(2), 192–200. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.02.006.

### Введение

Фазовая диаграмма дырочно-допированных купратных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) обладает большим разнообразием фаз, среди которых фазы сверхпроводимости, зарядового упорядочения и псевдощели [1, 2]. Фаза зарядового упорядочения (ЗУ), или волны зарядовой плотности (ВЗП), является наиболее изученной среди упомянутых выше фаз. Как было обнаружено [3], в фазе ВЗП купратов наблюдается большая замороженная деформация решетки. Следует подчеркнуть, что деформация, наблюдаемая в купратах, не переходящая, как в куперовской паре, а «классическая», с ненулевыми средними значениями координаты, как в поляроне [4]. Деформация решетки формируется носителями заряда и в то же время создает для них множе-

ственные потенциальные ямы. Если ямы достаточно глубоки для наличия в них дискретного уровня, то в основном состоянии системы часть носителей оказывается в автолокализованном состоянии (АС) [5]. Если такой дискретный уровень существует в купратах, то в них формируется «ВЗП сильной связи». При высокой плотности носителей в купратах автолокализованными состояниями являются биполярны большого радиуса (с радиусом много больше постоянной решетки), а «ВЗП сильной связи» образована жидкостью биполяронов большого радиуса.

Поскольку длина волны ЗУ в купратах намного больше размеров элементарной ячейки, для изучения таких состояний подходит гамильтониан Фрëлиха. Действительно, сильное дальнедействующее (фрëлиховское) электрон-фононное

взаимодействие (ЭФВ) приводит к АС с размером, много большим, чем элементарная ячейка. Поскольку максимальный импульс носителя в АС много меньше импульса, соответствующего границе первой зоны Бриллюэна (ПЗБ), при достаточной плотности носителей оставшиеся состояния в ПЗБ занимают делокализованные носители. Таким образом, в рассматриваемых системах имеет место сосуществование автолокализованных и делокализованных носителей.

После интерпретации ВЗП в купратах как проявления жидкости биполярнов большого радиуса другие упомянутые фазы оказываются естественным образом связанными с ней. Периодический потенциал, создаваемый автолокализованными носителями, приводит к отсутствию стационарных состояний вблизи границ ПЗБ, которое проявляется как псевдощель в спектре носителей [6]. Сверхпроводящая фаза в исследуемой систем возникает ниже температуры сверхтекучего перехода, для расчета которой мы применяем стандартный метод теории Бозе-жидкости Ландау [7] и спектр элементарных возбуждений биполяронной жидкости [8].

Ниже мы рассмотрим, какое место занимают области расположения псевдощели, ЗУ и СП на фазовой диаграмме в координатах «допирование-температура», и сравним результат с фазовой диаграммой купратных ВТСП.

### Распределение носителей заряда по автолокализованным и делокализованным состояниям при $T > 0$

Рассмотрим распределение носителей в системах с сильным ЭФВ. Очевидно, что нельзя пользоваться стандартными функциями распределения по состояниям носителей с определенным импульсом, так как импульс носителя в АС имеет неопределенность порядка величины самого импульса. По соотношению неопределенностей можно определить максимальное значение  $k_0$  импульса носителя в АС:

$$2R_{bip}^2 \pi (\hbar k_0)^2 = (2\pi\hbar)^2, \quad (1)$$

откуда  $k_0 = \frac{\sqrt{2\pi}}{R_{bip}}$ . Поскольку в купратах подвижность носителей в направлении, перпендикулярном проводящей плоскости, пренебрежимо мала, в дальнейших расчетах мы будем рассматривать двумерное пространство импуль-

сов. В (1) форма биполярона предполагается квадратной с диагональю  $2R_{bip}$ .

Необходимо учесть, что возможность автолокализации накладывает ограничения на заполнение состояний носителей со средним импульсом носителей  $k < k_0$  (которые будем называть «холодными»). Функция распределения для них была построена ранее [9, 10] с использованием метода Гиббса. Для ее получения условие нормировки записывалось для подсистемы, имеющей в координатном пространстве размер, равный размеру биполярона, и соответствующий размер в пространстве импульсов, определяемый из (1). Чтобы найти энергию связи биполярона  $E_{bip}$ , входящую в функцию распределения, мы применили вариационный метод с условием фиксированного радиуса, разработанный в [11], в котором вычисляется минимум среднего значения биполяронного гамильтониана Фрелиха. В качестве пробной волновой функции была выбрана функция, предложенная Эмином в [12], которая была модифицирована для трехмерного пространства. В настоящем вариационном методе используется условие фиксированного радиуса биполярона, определяемого как половина стороны такого квадрата, в котором сосредоточено 90 % плотности поляризационного заряда.

Поскольку ВЗП создает потенциальные ямы одинаковой глубины для носителей заряда обоих знаков, то если существует дискретный уровень для дырок, он будет существовать и для электронов. Следовательно, в фазе ВЗП биполяронная жидкость образована биполяронами обоих знаков – электронными и дырочными. На рис.1 показана область биполяронной жидкости, в которой имеет место ближний порядок, размером порядка длины когерентности ВЗП в купратах (3 периода ЗУ, где период ЗУ совпадает с диагональю квадрата  $2R_{bip}$ ). Энергия связи дырочных поляронов совпадает с энергией связи электронных при сделанном предположении о равенстве эффективных масс электрона и дырки вблизи минимума их энергии и при использовании подхода [13].

Используя полученные концентрации, можно определить свободную энергию системы  $F$ , состоящей из холодных и горячих носителей заряда. Однако, необходимо заметить, что псевдощель, то есть отсутствие состояний делокализованных носителей с импульсами вблизи антинода (границ ПЗБ), влияет на вели-

чину свободной энергии  $F$ . Поэтому перед нахождением свободной энергии вычислим поправку  $\Delta E^{PG}$  к ней, определяемую размером псевдощели.

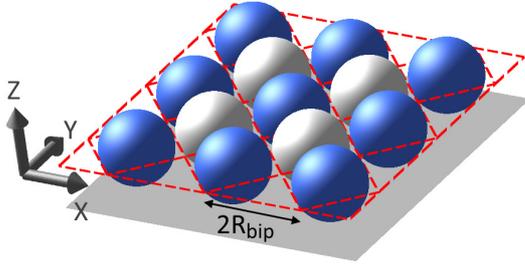


Рис.1. Расположение электронных и дырочных биполяронов на проводящей плоскости

Fig.1. Arrangement of electron and hole bipolarons on the conducting plane

### Дисперсия дырочнодопированных купратов и изменение свободной энергии вследствие образования псевдощели

Для вычисления приращения свободной энергии системы вследствие открытия псевдощели, рассмотрим дисперсию носителей заряда, характерную для дырочнодопированных купратов. Дисперсию вблизи минимума в точке  $\Gamma$  можно считать параболической:

$$\varepsilon_{эл}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \text{ Состояния дырок с минимальной}$$

энергией лежат на четырех арках с центрами в точках  $(\mp\pi/a, \mp\pi/a)$  в ПЗБ, одна из которых показана на рис.2б. Вблизи минимума энергии

дырок будем пользоваться смоделированной в [6] дисперсией, учитывающей известные из эксперимента особенности дисперсии в купратах:

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

где  $k'$  – радиус кривой постоянной энергии, которая представляет собой дугу окружности с центром в  $(\pi/a, \pi/a)$ ,  $k'_{min}$  – радиус кривой постоянной энергии, соответствующей минимуму постоянной энергии, который будет найден ниже,  $c$  и  $d$  – параметры, мы используем  $d = 2$  и  $c = 3,89$  (для энергии в эВ и  $k'$  в  $\text{\AA}^{-1}$ ), что соответствует параболической дисперсии с единичной эффективной массой дырки вблизи ее минимальной энергии.

Вид функции (2) позволяет учесть плоский характер дисперсии дырок вблизи антинода [14], наблюдаемый в купратах, и легко рассчитать энергии связи дырочных поляронов и биполяронов. Рис.2а демонстрирует дисперсию (2) вместе с параболической дисперсией электронов вблизи дна зоны. Следует отметить, что энергии допированных дырок, а также энергии электронов, учитываемые при изменении свободной энергии системы, не выходят за пределы изображенных на рис.2а областей их параболической (для электронов, линия 1) и квазипараболической (для дырок, линия 2) дисперсии.

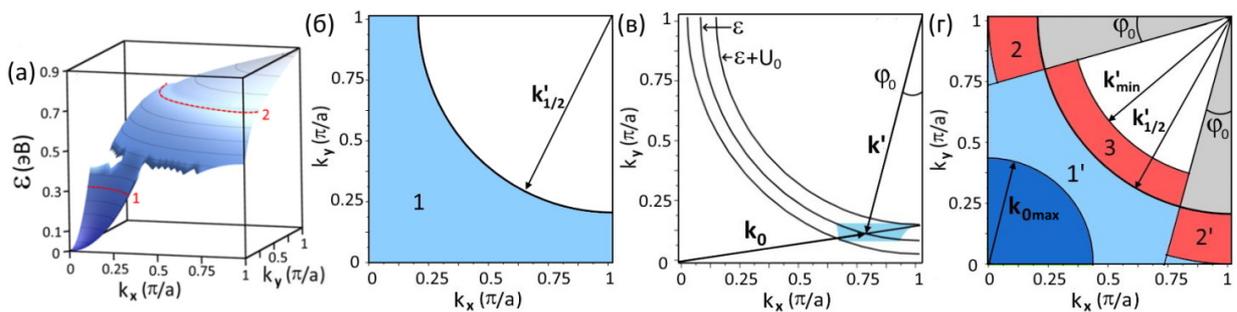


Рис.2. а) модель дисперсии, характерной для дырочно-допированных купратов; б) заполнение состояний в первой зоне Бриллюэна при  $p = 0$  в отсутствие псевдощели; в) определение угла  $\phi_0$ ; г) смещение поверхности Ферми при  $p = 0$ . Синим цветом выделена область пространства импульсов, которую могут занимать автолокализованные электроны

Fig.2. a) dispersion model characteristic of hole-doped cuprates; b) occupation of states in the first Brillouin zone at  $p = 0$  in the absence of a pseudogap; c) definition of the angle  $\phi_0$ ; d) the Fermi surface shift at  $p = 0$ . The region of the momentum space that can be occupied by autolocalized electrons is highlighted in blue

При нулевом допировании в купратах заполнена половина зоны Бриллюэна, показанная голубым цветом на рис.2б. Для учета изменения свободной энергии системы вследствие открытия псевдощели вычислим угол  $\varphi_0$ , ограничивающий область в ПЗБ, в которой нет стационарных состояний в присутствии дополнительного потенциала биполярона [6]. Как было показано ранее [6],  $\varphi_0$  можно приближенно вычислить как угловую координату пересечения кривой постоянной энергии  $E$  и линии, проходящей через начало координат и точку, где кривая постоянной энергии  $E+U_0$  пересекает границу ПЗБ (рис.2в). Значение  $\varphi_0$  зависит от дисперсии носителей, определяющей расстояние между кривыми постоянной энергии  $E$  и  $E+U_0$ , и от амплитуды  $U_0$  потенциала ЗУ. Величина  $U_0$  получается как амплитуда суммы потенциалов, создаваемых несколькими (8 в данном расчете) проводящими слоями с гармоническим распределением плотности заряда и с полным зарядом биполярона  $2e/\varepsilon_0$ . Очевидно, что величина  $U_0$  зависит от длины волны ВЗП, т.е. от размера биполярона. Полученное значение  $U_0$  практически совпадает с потенциалом в

$$\Delta E^{PG} = \frac{2}{(2\pi)^2} \left( \int_{k'_{min}}^{k'_{1/2}} \varepsilon_d(k') k' dk' (2\pi - 8\varphi_0) - \int_{k'_{1/2}}^{\pi/a} \varepsilon_d(k') k' dk' 8\varphi_0 \right) \quad (4)$$

(2 из-за спина), и определить максимальный импульс  $k'_{0h}$  дырки в дырочном биполяроне из соотношения неопределенностей:

$$(\pi - 4\varphi_0) [(k'_{min} + k'_{0h})^2 - k'^2_{min}] 2R^2_{bip} = (2\pi)^2.$$

Из-за дисперсии, определяющей положение дуг постоянной энергии, значение  $\varphi_0$  зависит от энергии [6], для простоты мы используем среднее значение  $\varphi_0$ , рассчитанное для среднего значения энергии носителя из области дырочной дисперсии  $\bar{E}$ . Выбор  $\bar{E}$  влияет на получаемые  $\varphi_0(R_{bip})$  и, таким образом, на  $\Delta E^{PG}$ . Однако произвол выбора  $\bar{E}$  компенсируется произволом выбора решеточной поляризуемости, задаваемой параметром  $(\varepsilon^*)^{-1} = (\varepsilon_\infty)^{-1} - (\varepsilon_0)^{-1}$ .

$$F = \frac{(n^h_{bip} + n^{el}_{bip})E_{bip} + E^h_{colddel} + E^{el}_{colddel}}{4R^2_{bip}} + E^h_{hot} + E^{el}_{hot} + \Delta E^{PG} + E_{int}$$

включает плотность энергии холодных и горячих дырок, плотность энергии холодных и горячих электронов с импульсами до  $k_{0max}$ , приращение (4) плотности энергии электронов при

центре однородно заряженного шара радиуса  $R_{bip}$  с полным зарядом  $2e/\varepsilon_0$ .

Поскольку значение  $\varphi_0$  зависит от значения  $U_0$ , приращение энергии системы за счет открытия псевдощели должно зависеть от радиуса биполярона. Это приращение легко вычислить, используя функцию (8) для области дырочной дисперсии. Открытие псевдощели приводит к отсутствию стационарных состояний носителей со средними импульсами в областях 2 и 2', показанных серым цветом на рис.2г. Вместо этого носители занимают область над поверхностью Ферми (отмеченную цифрой 3). Вычисляя площадь  $S_2 + S_2'$ , занимаемую состояниями, исчезающими при открытии псевдощели, и приравнявая ее к площади  $S_3$ , получаем положение  $k'_{min}$  поверхности Ферми при нулевом допировании в присутствии псевдощели:

$$k'_{min} = \left( k'^2_{1/2} - \left[ \left( \frac{\pi}{a} \right)^2 - k'^2_{1/2} \right] \frac{8\varphi_0}{2\pi - 8\varphi_0} \right)^{1/2}. \quad (3)$$

Тогда можно рассчитать приращение энергии системы за счет псевдощели, используя дисперсию (2):

Теперь перейдем к расчету свободной энергии системы с сильным ЭФВ и высокой плотностью носителей заряда. Площадь  $2R^2_{bip}$ , занимаемая электронным биполярном, вместе с площадью  $2R^2_{bip}$ , занимаемой дырочным биполярном, образуют «элементарную ячейку» ближнего порядка биполяронной жидкости площадью  $4R^2_{bip}$ . Это наименьшая площадь, плотность свободной энергии которой должна быть минимизирована. Таким образом, плотность свободной энергии системы, которую необходимо минимизировать при фиксированной температуре,

наличии псевдощели и плотность энергии межбиполяронного взаимодействия. Радиус области импульсного пространства, которую могут занимать автолокализованные электроны, есть

наибольшее возможное значение максимально-го импульса носителя  $k_0$  в биполяроне  $k_{0max} = \frac{\sqrt{2\pi}}{R_{min}}$ , где  $R_{min}$  – минимально возможный радиус биполярона, при котором энергия связи  $E_{bip}(R_{min})$  близка к нулю, но еще отрицательна.

### Спектр возбуждений биполяронной жидкости и расчет температуры сверхпроводящего перехода

Для определения температуры бозеконденсации биполяронной жидкости применим стандартный метод теории Бозе-жидкости [7]. Сначала вычисляется импульс  $P_n$  (на единицу площади проводящего слоя в рассматриваемой квазидвумерной системе) нормальной части Бозе-жидкости при малой скорости жидкости  $v$ . Импульс зависит от спектра элементарных возбуждений  $\zeta(k)$  Бозе-жидкости и температуры [7]:

$$P_n = \int \hbar k n(\zeta - \hbar(kv)) \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \quad (5)$$

$$\approx -\frac{v\hbar^2}{2} \int k^2 \frac{\partial n}{\partial \zeta} \frac{d^2k}{(2\pi)^2},$$

где используется разложение бозераспределения  $n(\zeta - pv)$ , допустимое при малых  $v$ , и система предполагается изотропной. Отношение импульса (5) к скорости жидкости  $v$  представляет собой массу нормальной компоненты жидкости (на единицу площади одного слоя CuO). Разделив ее на эффективную массу биполярона  $M_{bip}^*$ , получим плотность (в одном слое) биполяронов в Бозе-паре при данной температуре:

$$n_{vap} = \frac{\hbar^2}{4\pi M_{bip}^* k_B T} \int_0^{K_{CO}} \frac{e^{\zeta/k_B T}}{(e^{\zeta/k_B T} - 1)^2} k^3 dk. \quad (6)$$

Если плотность биполяронов в слое CuO превышает их количество в Бозе-паре, избыточные биполярны конденсируются. Таким образом, сравнивая плотность биполяронов в Бозе-паре (6) с их полной плотностью  $n_{bip}(p, T)$ , определяемой из функции распределения для размера биполярона, соответствующего наименьшей свободной энергии системы, получаем температуру сверхтекучего перехода.

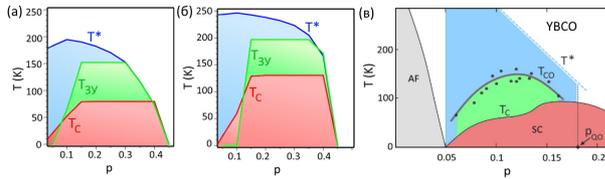
Для применения этого метода необходим спектр элементарных возбуждений жидкости биполяронов большого радиуса. Ранее спектр элементарных возбуждений биполяронной жидкости был получен [8] для системы биполяронов одного знака стандартным методом расчета низкоэнергетических возбуждений Бозегаза низкой плотности [7] посредством фурье-преобразования межбиполяронного взаимодействия. Межбиполяронные взаимодействия, рассмотренные в [8], представляли собой кулоновское отталкивание и короткодействующее отталкивание биполяронов вследствие принципа Паули. В исследуемой системе присутствуют биполярны с противоположным зарядом. Учет этого приводит к компенсации кулоновских отталкивания и притяжения, и единственным членом, остающимся в межбиполяронном взаимодействии, является короткодействующее отталкивание. В результате спектр возбуждений биполяронной жидкости имеет вид:

$$\zeta(k) = \sqrt{\frac{2\pi n_{bip} (\hbar k)^2}{M_{bip}^*} \left( \frac{2e^2 R_{bip}}{\epsilon_\infty} \right) \frac{1}{[1 + (2kR_{bip})^2]^{3/2}}}.$$

### Построение фазовой диаграммы и расчет плотности сверхтекучей компоненты и волнового вектора зарядового упорядочения

Расчет показывает, что ниже определенной температуры и в определенном интервале допирования система, в которой присутствует жидкость биполяронов большого радиуса, имеет свободную энергию ниже, чем свободная энергия системы без биполяронной жидкости. Таким образом, на фазовой диаграмме рассматриваемой системы в координатах температура-допирование имеются три физически различные фазы, расположенные в той области допирования, где существует сверхпроводимость ( $p > 0,05$ ): фаза без биполяронной жидкости с наличием только ферми-жидкости (область выше и правее линии  $T^*$  на рис.3а и рис.3б), фаза с нормальной компонентой биполяронной жидкости и ферми-жидкостью делокализованных носителей (область между линиями  $T_c$  и  $T^*$ ), и фаза с присутствием нормальной и сверхтекучей компонент биполяронной жидкости вместе с ферми-жидкостью делокализованных носителей (область ниже кривой  $T_c$ ).

Область, в которой наблюдается псевдощель, совпадает с областью существования биполяронной жидкости пока уровень допирования соответствует дырочноподобной дисперсии. Область, в которой наблюдается ЗУ, меньше области существования биполяронной жидкости, поскольку необходимо некоторое минимальное число биполяронных капель для экспериментального наблюдения ЗУ. На рис.3 показано рассчитанное положение областей на фазовой диаграмме, где наблюдаются псевдощель, зарядовое упорядочение и сверхпроводимость при двух различных наборах параметров системы и трех разных средних энергиях носителя, использованных для расчета угла открытия псевдощели  $\phi_0$ . Рассчитанное положение областей согласуется с тем, что наблюдается в купратах.



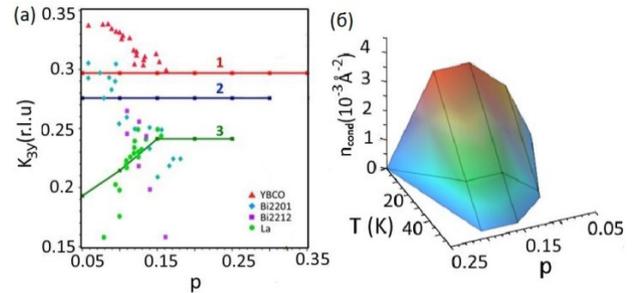
**Рис.3.** Рассчитанная зависимость критических температур  $T^*$ ,  $T_{3y}$  и  $T_c$  от  $p$  в системах с сильным ЭФВ, построенная для  $\epsilon_0=30$  (а, б); а)  $(\epsilon^*)^{-1}=0,26$ ; б)  $(\epsilon^*)^{-1}=0,3$ ; (в) экспериментальная фазовая диаграмма [2] ВТСП на основе иттрия

**Fig.3.** Calculated doping dependence of critical temperatures  $T^*$ ,  $T_{CO}$  and  $T_c$  on  $p$  in systems with strong EPI, built for  $\epsilon_0=30$  (a, b); а)  $(\epsilon^*)^{-1}=0.26$ ; б)  $(\epsilon^*)^{-1}=0.3$ ; (c) experimental phase diagram [2] for HTSC based on yttrium

Мы также рассчитали плотность сверхтекучей компоненты биполяронной жидкости  $n_{cond}(p, T)$  как разность плотности биполяронов, полученной из функции распределения, и их плотности в Бозе-паре (б). В области допирования  $p$  выше оптимального рассчитанная плотность сверхтекучей компоненты биполяронной жидкости  $n_{cond}(p, T)$ , показанная на рис.4б, линейно убывает с ростом  $p$ , что идет вразрез с положениями теории БКШ, но находится в согласии с результатами эксперимента на купратах [15].

Зависимость от допирования волнового вектора зарядового упорядочения  $K_{3y}$  (линии 1, 2, 3) в сравнении с экспериментальными данными [2] (символы) показана на рис.4а. Все параметры системы одинаковы для всех трех ли-

ний, различие в зависимости  $K_{3y}(p)$  возникает вследствие использования различных значений энергии  $\bar{E}$ , при которой рассчитывается угол открытия псевдощели  $\phi_0$ , фактически это соответствует различным законам дисперсии носителей. Из рис.4 видно, что место линий 1 и 2 согласуется с экспериментальными данными для семейств  $YBCO$  и  $BSCO$ , а восходящая часть линии 3 при  $p = 0,1 - 0,15$  находится в соответствии с  $K_{3y}(p)$ , полученным для ВТСП на основе лантана.



**Рис.4.** а) Волновой вектор зарядового упорядочения  $K_{3y}(p) = \frac{a}{2R_{bip}}(r. l. u.)$ , (r. l. u.) =  $\frac{2\pi}{a}$ ,  $a$  – постоянная

решетки, при  $(\epsilon^*)^{-1}=0,26$ ,  $\bar{E} = 0,56, 0,577, 0,59$  эВ (линии 1-3), символы – данные экспериментов [2]; б) плотность биполяронного конденсата  $n_{cond}(p, T)$ , рассчитанная для  $(\epsilon^*)^{-1}=0,26$ ,  $\bar{E} = 0,59$

**Рис.4.** а) Doping dependence of the charge ordering wave vector  $K_{3y}(p) = \frac{a}{2R_{bip}}(r. l. u.)$ , (r. l. u.) =  $\frac{2\pi}{a}$ ,

$a$  – is the lattice constant  $(\epsilon^*)^{-1}=0.26$ ,  $\bar{E} = 0.56, 0.577, 0.59$  eV (lines 1-3), symbols are experimental data [2]; б) density of the bipolaronic Bose-condensate

$n_{cond}(p, T)$ , for  $(\epsilon^*)^{-1}=0.26$ ,  $\bar{E} = 0.59$

### Выводы

Полученные результаты позволяют сделать вывод, что фазы псевдощели, зарядового упорядочения и сверхпроводимости сверхпроводящих купратов имеют единую природу, связанную с формированием двухжидкостной системы носителей заряда, включающей биполяронную жидкость и Ферми-жидкость делокализованных носителей.

### Список литературы

1. Loret B., Auvray N., Gallais Y., Cazayous M., Forget A., Colson D., Julien M.-H., Paul I., Civelli M., Sacuto A. Intimate link between charge

density wave, pseudogap and superconducting energy scales in cuprates // *Nat. Phys.* 2019. V. 15. P. 771–775.

2. Comin R., Damascelli A. Resonant X-Ray Scattering Studies of Charge Order in Cuprates // *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 2016. V. 7. P. 369–405.

3. Forgan E., Blackburn E., Holmes A.T., Briffa A.K.R., Chang J. et al. The microscopic structure of charge density waves in underdoped  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.54}$  revealed by X-ray diffraction // *Nat. Commun.* 2015. V. 6. P. 10064.

4. Myasnikov E.N., Myasnikova A.E., Kusmartsev F.V. Coherence of the lattice polarization in large-polaron motion // *Physical Review B.* 2005. V. 72. P. 224303.

5. Landau L.D. The Movement of Electrons in the Crystal Lattice // *Phys. Zs. Sowjet.* 1933. V. 3. P. 504.

6. Doronkina S.V., Myasnikova A.E., Dzhantemirov A.H., Lutsenko A.V. Topological pseudogap in highly polarizable layered systems with 2D hole-like dispersion // *Physica E: Low-dimensional systems and nanostructures.* 2022. V. 136. Art. No. 115052 (11 p.).

7. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физматгиз, 1962. 446 с.

8. Emin D. In-plane conductivity of a layered large-bipolaron liquid // *Philosophical Magazine.* 2015. V. 95. P. 918.

9. Мясников Э.Н., Мясникова А.Э. Об условиях существования поляронов Ландау-Пекара // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.* 1999. V. 116. P. 1386.

10. Myasnikova A.E., Myasnikov E.N., Moseykin D.V., Zuev I.S. Distribution of charge carriers at strong electron-phonon interaction and «vertical dispersion» in ARPES spectra of cuprates // *Physics Letters A.* 2015. V. 379. P. 458.

11. Myasnikova A.E., Nazdracheva T.F., Lutsenko A.V., Dmitriev A.V., Dzhantemirov A.H., Zhileeva E.A., Moseykin D.V. Strong long-range electron-phonon interaction as possible driving force for charge ordering in cuprates // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2019. V. 31. P. 235602.

12. Emin D. Effect of electronic correlation on the shape of a large bipolaron: Four-lobed planar large bipolaron in an ionic medium // *Physical Review B.* 1995. V. 52. P. 13874.

13. Luttinger J.M., Kohn W. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields // *Phys. Rev.* 1955. V. 97. P. 869.

14. Abrikosov A.A., Campuzano J.C., Gofron K. Experimentally observed extended saddle point singularity in the energy spectrum of  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.9}$  and  $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$  and some of the consequences // *Physica C.* 1993. V. 214. P. 73.

15. Božović I., He X., Wu J. et al. Dependence of the critical temperature in overdoped copper oxides on superfluid density // *Nature.* 2016. V. 536. P. 309–311.

### Информация об авторах

С. В. Доронкина – аспирант Южного федерального университета.

Р. Р. Арутюнян – студент Южного федерального университета.

А. Э. Мясникова – доктор физико-математических наук, профессор Южного федерального университета.

### References

1. Loret, B., Auvray, N., Gallais, Y., Cazayous, M., Forget, A., Colson, D., Julien, M., Paul, I., Civelli, M. & Sacuto, A. (2019). Intimate link between charge density wave, pseudogap and superconducting energy scales in cuprates. *Nature Physics*, 15, 771–775.

2. Comin, R. & Damascelli, A. (2016). Resonant X-Ray Scattering Studies of Charge Order in Cuprates. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 7, 369–405.

3. Forgan, E. M., Blackburn, E., Holmes, A. T., Briffa, A. K. R. & Chang, J. et al. (2015). The microscopic structure of charge density waves in underdoped  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.54}$  revealed by X-ray diffraction. *Nature Communications*, 6, 10064.

4. Myasnikov, E. N., Myasnikova, A. E. & Kusmartsev, F.V. (2005). Coherence of the lattice polarization in large-polaron motion. *Physical Review B*, 72, 224303.

5. Landau, L. D. (1933). The Movement of Electrons in the Crystal Lattice. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, 3, 504.

6. Doronkina, S. V., Myasnikova, A. E., Dzhantemirov, A. H. & Lutsenko, A. V. (2022). Topological pseudogap in highly polarizable layered systems with 2D hole-like dispersion. *Physica E: Low-dimensional systems and nanostructures*, 136, 115052.

7. Abrikosov, A. A., Gor'kov, L. P. & Dzyaloshinskij, I. E. (1962). *Metody kvantovoj teorii polya v statisticheskoj fizike*. Moscow: Fizmatgiz. P. 446. (In Russ.).
8. Emin, D. In-plane conductivity of a layered large-bipolaron liquid. (2015). *Philosophical Magazine*, 95, 918.
9. Myasnikov, E. N. & Myasnikova, A. E. (1999). Ob usloviyah sushchestvovaniya pol-yaronov Landau-Pekara. *Zhurnal Eksperimental'noj i Teoreticheskoj Fiziki*, 116, 1386. (In Russ.).
10. Myasnikova, A. E., Myasnikov, E. N., Moseykin, D. V. & Zuev, I. S. (2015). Distribution of charge carriers at strong electron-phonon interaction and «vertical dispersion» in ARPES spectra of cuprates. *Physics Letters A*, 379, 458.
11. Myasnikova, A. E., Nazdracheva, T. F., Lutsenko, A. V., Dmitriev, A. V. & Dzhantemirov, A. H. et al. (2019). Strong long-range electron-phonon interaction as possible driving force for charge ordering in cuprates. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 31, 235602.
12. Emin, D. Effect of electronic correlation on the shape of a large bipolaron: Four-lobed planar large bipolaron in an ionic medium. (1995). *Physical Review B*, 52, 13874.
13. Luttinger, J. M. & Kohn, W. (1955). Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields. *Physical Review*, 97, 869.
14. Abrikosov, A. A., Campuzano, J. C. & Gofron, K. (1993). Experimentally observed extended saddle point singularity in the energy spectrum of  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,9}$  and  $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$  and some of the consequences. *Physica C*, 214, 73.
15. Božović, I., He, X. & Wu J. (2016). Dependence of the critical temperature in overdoped copper oxides on superfluid density. *Nature*, 536, 309–311.

#### **Information about the authors**

*S. V. Doronkina – Graduate Student of the Southern Federal University.*

*R. R. Arutyunyan – Student of the Southern Federal University.*

*A. E. Myasnikova – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Southern Federal University.*

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 28.04.2023; одобрена после рецензирования 11.05.2023; принята к публикации 17.05.2023.

The article was received by the editorial board on 28 Apr. 23; approved after reviewing 11 May 23; accepted for publication 17 May 23.