

На правах рукописи

Мазур Евгений Андреевич

Специальность 01.04.02 – Теоретическая физика

**СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОН-ФОНОННЫХ СИСТЕМ,
ОБУСЛОВЛЕННЫЕ ЛОКАЛЬНЫМИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИМИ ПОЛЯМИ
И СТРУКТУРОЙ ЭЛЕКТРОННЫХ ЗОН**

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва 2020

Работа прошла апробацию в федеральном государственном бюджетном учреждении «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт»)

Научный консультант: **Каган Максим Юрьевич**, член-корреспондент РАН, профессор, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник федерального бюджетного учреждения науки Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН (ИФП РАН).

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им.П.Н. Лебедева Российской академии наук.

Защита состоится 29.12.2020 в 10:00 на заседании диссертационного совета ЛФИ.01.04.02.005 по адресу 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Московского физико-технического института (национального исследовательского университета) <https://mipt.ru/education/post-graduate/soiskateli-fiziko-matematicheskie-nauki.php>

Работа представлена «18» сентября 2020 г. в Аттестационную комиссию федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» для рассмотрения советом по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, доктора наук в соответствии с п.3.1 ст. 4 Федерального закона «О науке и государственной научно-технической политике».

Общая характеристика работы

Объектом исследования диссертационной работы является взаимодействие быстрых и медленных заряженных частиц с электрон-фононной системой кристалла. Результаты исследования применяются для интерпретации и предсказания процессов и эффектов, встречающихся в физике и в технически важных высокотехнологичных процессах, таких как сверхпроводимость в условиях высоких давлений и допирования, очистка пучка быстрых заряженных частиц и управление прохождением быстрых заряженных частиц через кристаллы. При этом в качестве электрон-фононной системы принимаются во внимание сильно взаимодействующие электронная подсистема кристалла и совокупность ионов кристалла, участвующих в коллективных колебаниях – фононах.

Такие системы возникают при описании несверхпроводящих (нормальных) и сверхпроводящих свойств новых классов веществ, таких как купраты, пниктиды, металлический сероводород и металлический водород под давлением, сверхпроводящие кристаллы в условиях меняющихся уровней допирования и радиационных повреждений. Аналогичные задачи возникают также при описании прохождения быстрых заряженных частиц через идеальные и изогнутые кристаллы.

Существующие физические теории, рассматриваемые ранее, не учитывали зонную структуру и ширину электронных зон таких электрон-фононных систем, а также не учитывали трансляционную неинвариантность таких систем при сдвиге, не совпадающем с вектором трансляций кристалла. Ранее проведенные исследования в данном направлении использовали физические модели, в которых электрон-фононная система кристалла полагалась пространственно-однородной. При расчетах не учитывалась также в полной мере и трансляционная неинвариантность электрон-фононных систем, индуцированная внешним воздействием, например, пространственно-периодическим лазерным импульсом, потоком налетающих на поверхность кристалла быстрых частиц, изгибом кристалла в условиях налетающего

потока ориентированных быстрых заряженных частиц. Такие недостатки существующих физических моделей приводили к утрате возможности адекватного описания и расчета явлений в электрон-фононных системах. Разработка адекватной обобщенной физической теории взаимодействий быстрых и медленных заряженных частиц с электрон-фононной системой кристалла с учетом реальной зонной структуры кристалла, отказ от приближения пространственной однородности кристалла и последующие физические расчеты таких систем позволяют добиться количественного согласия результатов расчетов с экспериментально наблюдаемыми результатами. Разработанные физические теории позволяют обеспечить возможность делать на основе расчетов предсказания свойств кристаллов, не синтезированных или не открытых до настоящего времени, что позволит прийти к технологическим прорывам по целому ряду направлений. В диссертации, исходя из первых принципов при рассмотрении электрон-фононных систем, изучены различные вещества, перспективные для проявления высокотемпературной сверхпроводимости, идеальные трансляционно-неинвариантные, конечнозонные или содержащие примеси электрон-фононные системы, а также электрон-фононные системы изогнутых кристаллов при прохождении в них быстрых заряженных частиц и электрон-фононные системы, в которых внешними возмущениями создаются неоднородности с пространственными масштабами, соизмеримыми с постоянными трансляции кристалла.

Актуальность темы диссертации определяется открытием принципиально новых явлений при сильном взаимодействии быстрых и медленных заряженных частиц с электрон-фононной (ЭФ) системой кристалла, необходимостью создания соединений с заранее заданными свойствами, необходимостью объяснения явления высокотемпературной сверхпроводимости в металлическом сероводороде, металлическом водороде, купратах и пниктидах; обнаружением ряда перспективных сверхпроводящих свойств в кристаллическом металлическом сероводороде,

фосфидах и металлическом водороде, стабильных при высоком давлении; необходимостью изучения нормальных и сверхпроводящих свойств кристаллов в условиях изменяющих концентраций примесей и радиационных повреждений, обнаружением эффекта объемного захвата при взаимодействии ориентированного изогнутого монокристалла с быстрыми налетающими частицами и ряда других; проявлением зонной структуры кристалла в спектре излучения быстрой заряженной ориентированной относительно кристаллографических осей или плоскостей частицы, а также широким применением в научных исследованиях и промышленности устройств, основанных на свойствах сверхпроводящих и высокочувствительных материалов. Все вышеперечисленные явления могут быть описаны в рамках близких по своей формулировке физических моделей.

В настоящее время поиск новых сверхпроводящих материалов является одной из важных научных проблем. После экспериментального открытия в 2015 году высокотемпературной сверхпроводимости сероводорода при давлениях 220 ГПа возникает вопрос определения свойств фазы сероводорода при высоких давлениях, а также свойств металлического водорода при высоких давлениях и некоторых других материалов, перспективных с точки зрения практического применения явления сверхпроводимости. Становится крайне актуальной задача определения нормальных и сверхпроводящих свойства металлического сероводорода, металлического водорода и некоторых других металлов с помощью расчетов из первых принципов.

Решетки релаксирующих неравновесных носителей заряда (ННЗ) в условиях наведенной извне пространственной неоднородности в кристаллах могут применяться в интегральной оптике для управления светом в полупроводниковых волноводах и в ряде процессов адаптивной и нелинейной оптики. Изучение распада динамической решетки в кристаллах необходимо для определения зависимости времен релаксации электронов и дырок от их концентрации, значения коэффициентов диффузии, скорости

примесной и поверхностной рекомбинаций и т. д.

Физические теории, позволяющие описать взаимодействие электронов низкой энергии с фононной системой во многом аналогичны физическим теориям, позволяющим описывать взаимодействие быстрых заряженных частиц и ориентированных пучков быстрых частиц с электрон-фононной системой кристалла. Поэтому в диссертационной работе в рамках единого формализма изучены процессы генерации фононов и плазмонов быстрыми заряженными ориентированными частицами в кристаллах, явления объемного захвата быстрых заряженных частиц в объеме изогнутого кристалла. Изучены также процессы релаксации неоднородных концентрационных профилей возбуждений и концентрационных профилей имплантированных примесей в кристаллах. Применение ориентированных пучков быстрых частиц в качестве средств измерения физических величин кардинальным образом изменило экспериментальную технику и многократно повысило возможности экспериментатора и информативность получаемых результатов. За счет высокой спектральной яркости, значительно превосходящей тепловые источники электромагнитного излучения, уникальной временной и пространственной когерентности, малой расходимости, близкой к дифракционному пределу, использование ориентированных пучков быстрых частиц в качестве источников зондирующего излучения позволяет обеспечить метрологические характеристики, ранее недоступные диагностике в физике конденсированного состояния. Все это определило актуальность выполнения диссертационной работы, заключающейся в разработке физических теорий и моделей описания процессов взаимодействия частиц различной энергии с электрон-фононной системой трансляционно-неинвариантного как идеального, так и неидеального кристалла с конечной шириной электронных зон, создании комплексов программ и разработке численных методов, обеспечивающих возможность реализации разработанных физических моделей для проведения расчетов в широком

классе применяемых на современном уровне теоретических и экспериментальных методов изучения конденсированного состояния.

Целью диссертационной работы являлось исследование взаимодействия частиц различной энергии с электрон-фононной системой конденсированных тел.

Для достижения цели в диссертационной работе поставлены и решены следующие задачи:

1. Разработана обобщенная теория нормального состояния высокотемпературных материалов таких как купраты, сероводород, металлический водород, а также соединений с высоким содержанием водорода при наличии конечной ширины электронных зон с учетом переменного характера плотности электронных состояний в зоне, перенормировки химического потенциала и самосогласованного метода определения реконструированной плотности электронных состояний, в условиях высоких давлений;
2. Исследовано нормальное (несверхпроводящее) состояние в купратах, сероводороде, металлическом водороде, проведен анализ полученных результатов;
4. Построен обобщенный вариант теории Элиашберга для описания высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в медесодержащих соединениях (купратах);
5. Исследовано явление сверхпроводимости в купратах, проведен анализ полученных результатов;
6. Построена физическая модель, описывающая свойства высокотемпературного сверхпроводящего состояния вещества в металлическом сероводороде, фосфидах и металлическом водороде; исследовано явление сверхпроводимости в различных кристаллических фазах сероводорода и металлического водорода, выполнен анализ полученных результатов;
7. Построена теория, описывающая межзонное спаривание в двухзонных

материалах;

8. Разработана теория изменения плотности фононных состояний и спектральной функции электрон-фононного взаимодействия в зависимости от концентрации дефектов;

9. Теоретически исследованы изменения фононного спектра и спектральной функции электрон-фононного взаимодействия в кристаллах при различных концентрациях дефектов, выполнен анализ полученных результатов;

10. Построен обобщенный вариант теории сверхпроводимости материалов с переменной плотностью электронных состояний, содержащих немагнитные примеси, теоретически исследованы свойства электрон-фононной системы содержащих дефекты кристаллов;

14. Теоретически описан эффект изменения температуры сверхпроводящего перехода в интерметаллидах в зависимости от концентрации дефектов, проведен анализ полученных результатов;

15. Разработана теория возбуждения электронной и фононной подсистем монокристалла импульсом быстрых ориентированных заряженных частиц;

16. Создана обобщенная теория объемного захвата быстрых заряженных частиц в изогнутом монокристалле с учетом квантовых дифракционных эффектов и потерь поперечной энергии быстрой заряженной частицы, исследован эффект объемного захвата быстрых заряженных частиц в изогнутых кристаллах, проведен анализ полученных результатов;

17. Развита теория взаимовлияния эффектов излучения и возбуждения кристалла при прохождении быстрых ориентированных относительно кристаллографических осей или плоскостей частиц, выполнен расчет таких эффектов, проведен анализ полученных результатов;

18. Разработана физическая модель релаксации динамических решеток в кристаллах, изучены эффекты релаксации динамических решеток в кристаллах, выполнен анализ полученных результатов.

20. Построена физическая модель радиационного-индуцированного

перераспределения неоднородного профиля примеси в кристаллах, проведены теоретические и численные расчеты таких процессов, выполнен анализ полученных результатов;

Постановка задач для изучения нормальных и сверхпроводящих свойств кристаллов состоит из исследования электронных свойств, фононных свойств, а также электрон-фононного взаимодействия наиболее термодинамически выгодных кристаллических фаз изучаемых соединений. Выбор термодинамически выгодной фазы кристалла проводился путем расчета энергии E кристалла в расчете на один ион, энтальпии $H = E + PV$ в расчете на один ион, термодинамического потенциала Гиббса $H = E + PV - TS$ в расчете на один ион, а также квантового параметра порядка в случае сверхпроводимости.

Физическое описание электронных свойств состоит в диссертации из исследования и расчетов электронного зонного спектра, законов дисперсии электронов в каждой зоне, изучения зонного спектра как при малых энергиях электронов, так и при больших энергиях электронов и позитронов в случае каналирования, исследования и расчетов парциальных и полной плотности электронных состояний. Физическое описание фононных свойств состоит в диссертации из исследования и расчетов фононного спектра изучаемых кристаллов, плотности фононных состояний, энергии как нулевых так и температурных фононных колебаний в кристалле.

Для изучения эффектов взаимодействия электронов и фононов теоретически исследована спектральная плотность электрон-фононного взаимодействия $\alpha^2 F(\omega)$, а также изучены и рассчитаны константы электрон-фононного взаимодействия λ .

В диссертации учитывались особенности узких электронных зон купратов, а также широких электронных зон с переменной плотностью электронных состояний в металлическом сероводороде, фосфиде, металлическом водороде, соединениях A-15 (Nb_3Sn), учитывалась пространственная неоднородность кристалла, обусловленная локальными

внутрикристаллическими полями, созданная примесями в кристалле, а также созданная лазерным импульсом, пространственная неоднородность в кристалле при имплантации ионов, а также проводился явный учет потенциалов кристаллографических осей и плоскостей кристалла в случае каналирования.

Исследование эффектов взаимовлияния электронной и фононной подсистем кристалла проводилось с помощью обобщенной системы уравнений Мигдала-Элиашберга, состоящей из системы нелинейных интегро-дифференциальных уравнений для зависящей от частоты эффективной массы электрона, перенормированной сильным электрон-фононным взаимодействием, для величины, обычно именуемой перенормировкой химического потенциала, также зависящей от частоты, а также для комплексного параметра порядка сверхпроводящей системы. Полученные решения данной системы уравнений позволяют установить такие характеристики вещества, как поведение сверхпроводящего параметра порядка, как функцию частоты, критическую температуру сверхпроводящего перехода, величину энергетической щели в сверхпроводнике, а также характеристики носителей заряда - электронов - в сверхпроводящих веществах.

Исследование трансляционно-неинвариантных с учетом локальных внутрикристаллических полей и конечнозонных электрон-фононных систем потребовало применения таких математических методов расчета как метод функционала электронной плотности (DFT), метод решения уравнений Элиашберга на действительной оси, метод решений уравнений Элиашберга на мнимой оси, метод функций Грина электронов и фононов. Исследование нормальных и сверхпроводящих свойств кристаллов привело к установлению общих свойств материалов с конечной шириной электронных зон; установлению свойств купратов, кристаллических структур различной симметрии металлического сероводорода, фосфидов, металлического водорода под давлением; позволило изучить свойства интерметаллических

соединений со структурой A-15 (Nb_3Sn) при различных концентрациях примесей, а также привело к установлению новых сверхпроводящих свойств материалов со взаимодействующими зонами.

Научная новизна результатов диссертационной работы заключается в том, что:

1. Исследованы свойства электрон-фононной системы с конечной шириной электронной зоны. Предсказан эффект реконструкции поверхности Ферми в электрон-фононных системах с конечной шириной электронной зоны.
2. Построена обобщенная теория Мигдала нормального состояния кристаллов с учетом конечной ширины электронной зоны, переменной плотности электронных состояний, а также с учетом электрон-дырочной неэквивалентности и электронной корреляции. Выполнены исследования нормальной электронной функции Грина нодальной фракции купратов, сероводорода и металлического водорода с учетом перенормировки электронного спектра фононами. Получено согласие с экспериментальными результатами.
3. Установлены причины появления высокоэнергетических и низкоэнергетических особенностей (кинков) в частотном поведении электронной функции Грина купратов. Показано, что кинки обязаны своим происхождением множественному взаимодействию электронов с фононами.
4. Развита обобщенная теория Элиашберга зависящих от температуры сверхпроводящих свойств в случае сильной связи для материалов с конечной шириной электронной зоны и переменной плотностью электронных состояний, а также с учетом электрон-дырочной неэквивалентности и электронной корреляции.
5. Построена теория, выполнено исследование и проведены расчеты сверхпроводящих свойств купратов, сероводорода, металлического водорода.
6. Создана физическая теория сверхпроводимости со спариванием носителей, принадлежащих различным зонам. Предсказано существование еще одного

семейства высокотемпературных материалов со спариванием носителей, принадлежащих различным зонам.

7. Разработана обобщенная физическая теория изменения фононного спектра и спектральной функции ЭФ взаимодействия в зависимости от концентрации дефектов.

8. Разработана теория сверхпроводимости неидеальных кристаллов методом функций Грина и проведено исследование изменения температуры сверхпроводящего перехода в зависимости от концентрации дефектов.

9. Показано, что все характерные черты спектров кристаллов проявляются в спектре излучения квантовой каналированной частицы. Предсказан эффект плазмонных «крыльев» в спектре излучения квантовой каналированной частицы.

10. Разработана квантовая обобщенная теория объемного захвата быстрых заряженных частиц в режим каналирования в изогнутом монокристалле с учетом дифракции и затухания недиагональных элементов матрицы плотности быстрых заряженных частиц, а также с учетом потерь поперечной энергии быстрых налетающих заряженных частиц. Исследованы эффекты объемного захвата в изогнутых кристаллах.

11. Разработана физическая модель радиационно-индуцированного перераспределения примесей в кристалле. Установлены основные закономерности таких процессов. Исследованы и установлены качественные закономерности релаксации динамических решеток в кристаллах.

Вышеуказанные результаты являются новыми, поскольку физические причины появления высокой температуры сверхпроводящего перехода после обнаружения эффекта ВТСП до настоящего момента не изучены, несмотря на научную значимость и важность проблемы. На базе эффекта реконструкции объема Ферми в диссертации разработана физическая модель, являющаяся обобщенным вариантом модели Мигдала - Элиашберга, лежащей в основе теории сверхпроводимости. Результаты опубликованы в известных и авторитетных журналах с высоким импакт-фактором,

индексированных сетью Web of Science и Scopus. Доклады с результатами исследований были представлены на авторитетных мировых конференциях, посвященных проблеме сверхпроводимости и нового состояния вещества.

На защиту выносятся следующие основные положения и результаты:

1. Теория нормальных свойств электрон-фононной системы в случае сильной электрон-фононной связи с учетом локальных внутрикристаллических полей и с учетом спонтанного нарушения трансляционной инвариантности, создаваемой инфинитезимальными источниками.
2. Эффект реконструкции поверхности Ферми для сильно связанной электрон-фононной системы с конечной шириной электронных зон.
3. Обобщенная теория Мигдала, описывающая нормальное состояние купратов. Результаты расчетов, описывающих нормальное состояние купратов.
4. Обобщенная теория Элиашберга, описывающая сверхпроводящее состояние купратов. Результаты исследования, описывающие сверхпроводящее состояние купратов: три фактора критическим образом влияют на T_c в электрон-фононной системе, а именно: 1. наличие в математической модели вкладов, пропорциональных $\text{Im} \Delta(\omega)$, 2. наличие «обрезающего» фактора $\Xi(z)$ и 3. наличие «логарифмического» вклада $\Lambda(z)$.
5. Обобщенная теория Мигдала, описывающая нормальное состояние сероводорода, фосфидов и металлического водорода, описывающих реконструкцию сильным электрон-фононным взаимодействием нормального состояния электрон-фононных систем сероводорода, фосфидов и металлического водорода с учетом резких изменений плотности электронных состояний и перенормировки химического потенциала в зависимости от давления и температуры. Результаты исследования нормального состояния в сероводороде, фосфидах и металлическом водороде,.
9. Обобщенная теория Элиашберга, описывающая параметр порядка и

сверхпроводимость электрон-фоонных систем сероводорода и металлического водорода с учетом зависимости от температуры, резких изменений плотности электронных состояний и частотного поведения перенормировки химического потенциала в зависимости от давления и температуры. Результаты исследования, описывающие параметр порядка и сверхпроводимость электрон-фоонных систем сероводорода и металлического водорода с учетом резких изменений плотности электронных состояний и частотного поведения перенормировки химического потенциала в зависимости от давления и температуры.

10. Теория, описывающая эффект спаривания электронов, принадлежащих различным зонам. Результаты теоретического исследования эффекта сверхпроводимости в двухзонных системах: эффект спаривания электронов, принадлежащих различным зонам, является важным фактором для появления эффекта высокого T_c в двухзонных материалах.

11. Обобщенная теория изменения плотности фоонных состояний и спектральной функции электрон-фоонного взаимодействия в зависимости от концентрации дефектов. Результаты теоретического исследования спектральной функции электрон-фоонного взаимодействия и сверхпроводимости в кристаллах с дефектами.

12. Теория генерации фоонов и плазмонов квантовой каналированной частицей в монокристалле. Теория потерь энергии каналированных релятивистских электронов, протонов и позитронов с учетом эффектов локальных кристаллических полей.

13. Обобщенная теория объемного захвата быстрых заряженных частиц в режим каналирования в изогнутом монокристалле с учетом дифракционных эффектов и потерь поперечной энергии быстрой заряженной частицы.

14. Теория эффекта проявления особенностей спектра возбуждений кристалла в спектре излучения фотонов квантовой каналированной частицы.

15. Предложенная в диссертации физическая модель влияния радиационно-индуцированных дефектов на диффузионное перераспределение

имплантированных ионов позволяет адекватно описать эволюцию концентрационного профиля ионов. Перераспределение фотоиндуцированных зарядов в полупроводниках с собственной проводимостью в случае металлических контактов приводит к установлению распределений электронов и дырок с максимумами, величины и координаты которых определяются параметрами образца, приложенным напряжением и интенсивностью фотогенерации. Результаты аналитического и численного исследования эволюции динамических решеток в полупроводниках при высоких уровнях возбуждения.

Практическая ценность результатов работы. Совокупность результатов в области трансляционно-неинвариантных с учетом локальных кристаллических полей и конечнозонных кристаллов, в том числе для систем с сильным электрон-фононным взаимодействием, имеет важное научное и практическое значение для развития сверхпроводящих и радиационных технологий нового поколения и создания прецизионной диагностической техники, связанной с эффектами генерации и релаксации возбуждений в кристалле импульсами быстрых ориентированных частиц. Практическая значимость результатов диссертационной работы состоит в том, что:

1. Проведенные исследования нормальных и сверхпроводящих свойств высокотемпературных купратов позволяют делать предсказания свойств купратов с целью создания высокотемпературных материалов с заранее заданными свойствами.
2. Эффект реконструкции поверхности Ферми для сильно связанной электрон-фононной системы с конечной шириной электронной зоны уточнил физическое описание кристаллических конденсированных сред и вошел в основные руководства по теории конденсированных сред и сверхпроводимости.
3. Модифицированная автором теория нормальных и сверхпроводящих свойств проводящих кристаллов под названием «продвинутая (advanced) теория

Мигдала- Элиашберга» применяется рядом авторов в мире для дальнейшей разработки математических моделей и выполнения расчетов.

4. Разработанная обобщенная теория нормальных свойств металлического сероводорода и металлического водорода может быть применена для создания новых классов высокотемпературных материалов, что может привести к коренным изменениям в технологиях силовой и слаботочной электропередачи.

5. Созданная теория сверхпроводимости в случае спаривания носителей из различных зон может привести к созданию нового класса высокотемпературных материалов с заранее заданными и регулируемыми свойствами.

6. Построенная обобщенная теория зависимости плотности фононных состояний, электронной плотности состояний, спектральной функции электрон-фононного взаимодействия и температуры сверхпроводящего перехода металлов от концентрации немагнитных примесей может найти применение для проектирования установок и сверхпроводящих устройств, работающих в условиях радиационного воздействия.

7. Развита теория возбуждения плазмонной и фононной подсистем кристалла быстрыми пролетающими ориентированными частицами и исследование эффектов релаксации в такой системе могут быть применены для создания нового неразрушающего метода диагностики кристаллов и для изучения коротковолнового диапазона возбуждений в кристалле.

8. Полученные результаты могут быть применены при создании полупроводниковых детекторов для измерения времен жизни носителей тока и для получения высокого пространственного разрешения, а также для постановки экспериментов по генерации и пролету в кристалле сверхкоротких импульсов фононов больших энергий.

9. Теоретическое предсказание эффекта плазмонных и фононных крыльев в излучении каналированной частицы стимулирует постановку новых экспериментов и может служить основой для создания нового метода диагностики пучка частиц, ориентированных относительно осей или

плоскостей кристалла.

10. Изученный распад динамической решетки в кристаллах позволяет определить зависимости времен релаксации электронов и дырок от их концентрации, значения коэффициентов диффузии носителей тока, скорости примесной и поверхностной рекомбинаций и т. д. Точные значения концентрации ННЗ необходимы для анализа механизмов релаксации высоковозбужденных состояний, определения параметров твердотельной плазмы и корректного расчета характеристик дифракции зондирующего лазерного излучения на кристаллах.

11. Разработанная обобщенная теория объемного захвата быстрых заряженных частиц в изогнутом кристалле может применяться для увеличения эффективности поворота пучка, для очистки пучка быстрых частиц и коллимации широких пучков быстрых частиц.

12. Результаты численного изучения профиля концентрации замедлившихся ионов под радиационным воздействием в кристалле в условиях как неориентированных, так и ориентированных пучков, могут применяться в современной технологии изготовления элементов полупроводниковых приборов, а также для изучения вопросов радиационной стойкости полупроводниковых приборов.

Результаты исследования свойств купратов, двухзонных сверхпроводников и сверхпроводников с дефектами, результаты изучения концентрационных профилей ионов могут быть использованы Институтом сверхпроводимости и физики твердого тела РНЦ "Курчатовский институт", государственной корпорацией по атомной энергии "Росатом" на АО "ТВЭЛ", входящем в состав ГК Росатом, на дочернем предприятии корпорации ГК Росатом АО "Чепецкий механический завод", а также во ВНИИ неорганических материалов им. Бочвара (г. Москва) при разработке новых сверхпроводящих устройств и образцов. Результаты исследования свойств сероводорода, фосфидов и металлического водорода под давлением могут быть использованы в институте физики высоких давлений им. Л. Ф.

Верещагина РАН и в Российском федеральном ядерном центре — Всероссийском научно-исследовательском институте экспериментальной физики, при постановке экспериментов по созданию таких материалов в условиях высоких давлений. Результаты теоретического изучения свойств каналированных частиц могут быть применены на сверхпроводниковом ускорителе - Большом адронном коллайдере для очистки, тестирования и поворота пучков быстрых заряженных частиц.

Личный вклад автора. Все выносимые на защиту результаты и положения диссертационной работы получены и разработаны автором или при его непосредственном участии. Автору принадлежит как постановка задач теоретических исследований, так и разработка новых физических подходов и методов, исходя из первых принципов, и проведение сравнения предсказаний теории и расчетов с экспериментом. Автором разработана обобщенная теория как нормальных, так и сверхпроводящих свойств электрон-фононных систем. Практическая реализация некоторых расчетов в рамках разработанных автором физических моделей, а также проведение сравнения с отдельными результатами экспериментальных исследований с их помощью выполнены в соавторстве с сотрудниками, аспирантами и дипломниками под его руководством.

Апробация работы. Результаты работы прошли апробацию на следующих российских, Всесоюзных и международных конференциях: Международная конференция «Materials and Mechanisms of Superconductivity M2S 2018», Пекин, Китай, 23 августа-28 августа 2018; 6-th International Conference on Superconductivity and Magnetism, ICSM-2018, 29 April-04 May 2018, Antalya, Turkey ; 8-th International Conference Charged and Neutral Particles Channeling Phenomena «Channeling 2018», Ischia, Italy, 23-28 September, 2018; 48 Международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, МГУ имени М.В. Ломоносова, Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына, 29 мая -31 мая 2018), International Conference of numerical

analysis and applied mathematics «ICNAAM 2016», 19-25 сентября 2016, Родос Пэлас Отель, Родос, Греция, V International Conference on "Problems of Mathematical and Theoretical Physics and Mathematical Modelling", 5–7 April 2016, Moscow, RF; Charged and Neutral Particles Channeling Phenomena «Channeling 2016», Desenzano del Garda, Italy, 23-28 September, 2016, III Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии ЛаПлаз-2017», 24-27 января 2017, Международная конференция «Materials and Mechanisms of Superconductivity M2S 2015», Женева, Швейцария, 23 августа-28 августа 2015; Международная конференция «Materials and Mechanisms of Superconductivity M2S 2012», Washington, USA, 29 July-3 Aug 2012; Charged and Neutral Particles Channeling Phenomena «Channeling 2012», Alghero, Italy, 23-28 September, 2012; Charged and Neutral Particles Channeling Phenomena «Channeling 2014», Capri, Italy, 05-10 October, 2014; International Conference on Superconductivity and Magnetism, ICSM-2012, 29 April-04 May 2012, Stambul-Kumburgaz, Turkey; 4-th International Conference on Superconductivity and Magnetism, ICSM-2014, 30 April-05 May 2014, Antalya, Turkey; International conference on New Theories, Discoveries and Applications of Superconductors and Related Materials (New 3-SC-9 conference), 16-20 September 2012, Rome, Italy; International Conference on Innovative Materials and Techniques CIMT 2012, Hammamet, Tunisia, November 12-15, 2012; X11, X111, X1Y, XY, XY11, XY111, XY1 Всесоюзные совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (ВСФВЗЧКМ), МГУ; 45 Тулиновская конференция по взаимодействию заряженных частиц с кристаллами, Москва, МГУ, 26-28 мая 2015 г.

Публикация результатов исследования. Основные положения диссертационного исследования содержатся в 41 публикации автора, из них 39 статей в изданиях, рекомендованных ВАК, охватываемых сетью WebOfScience, а также Scopus, в том числе в журналах «Письма в Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики» (7 статей), «Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики» (11 статей), «Журнал

Технической Физики», «Europhysics Letters», «Journal of Superconductivity and Novel Magnetism», «Nuclear Instruments and Methods. Ser. B», «European Physical Journal, ser.B», «International Journal of Modern Physics, ser. A», «Solid State Communications», «Physics Procedia» (5 статей), «Novel Superconducting Materials», AIP Conference Proceedings (2 статьи), два свидетельства о регистрации комплексов программ.

Структура работы predetermined логикой исследования и поставленными задачами. Диссертация состоит из Введения, семи глав и Заключения, содержит 126 рисунков. Список цитируемой литературы включает 251 наименование. Общий объем диссертации 303 стр. В конце каждой главы приводится список полученных результатов.

Содержание диссертации

Во введении обсуждается актуальность темы исследований, сформулированы цели, научная новизна, практическая ценность работы и защищаемые положения.

В гл.1. дается краткий обзор литературы по теме диссертации. На основе анализа литературы показана необходимость разработки обобщенной физической теории и проведения расчетов нормальных и сверхпроводящих свойств кристаллов, учитывающих переменный характер плотности электронных состояний, а также внутрикристаллические поля. Приведен анализ существующих физических теорий электрон-фоонных систем, не учитывающих внутрикристаллические поля и конечность ширин зон.

В гл.2. разработана обобщенная теория, описывающая нормальные свойства электрон-фоонных систем с конечной шириной электронной зоны с переменным характером плотности электронных состояний в зоне без псевдощели. Значения собственно-энергетической части запаздывающей ФГ

электрона при дискретных фоонных частотах $i\omega_m = i(2m+1)\pi T, m = 0, \pm 1, \pm 2..$ на

мнимой оси записаны в виде $\hat{\Sigma}(i\omega_m) = i\omega_m [1 - Z(\vec{p}, i\omega_m)] \hat{\tau}_0 + \chi(\vec{p}, i\omega_m) \hat{\tau}_3.$

Затухание электронов на поверхности Ферми определяется выражением

$\text{Im} \Sigma(\omega = 0) = \text{Im} \chi(\vec{p}, \omega = 0) \neq 0$. Показано, что эта величина отлична от нуля при конечных температурах, что определяет затухание на поверхности Ферми при $T \neq 0$.

Предсказан эффект реконструкции поверхности Ферми для сильно связанной электрон-фононной системы с конечной шириной электронной зоны. В результате решения нелинейных уравнений с использованием разработанного комплекса программ показано, что если учесть конечность ширины электронной зоны D , то реконструкция Ферми-поверхности возникает при $\lambda > 1$ в рамках стандартного рассмотрения электрон-фононного взаимодействия, основанного на значительном различии электронных энергий ($\ll D$) и характерных фононных частот $\omega_D \ll D$. Выражение для собственно-энергетической части (СЧ) $\Sigma(\varepsilon)$ функции Грина электрона G в кристалле приведено к следующему виду:

$$\text{Re} \Sigma(\varepsilon) = P \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' N(\varepsilon') \int_0^{\infty} d\Omega \alpha^2 F(\Omega) \left[\frac{n(\Omega) + f(-\varepsilon')}{\varepsilon - \Omega - \varepsilon'} + \frac{n(\Omega) + f(\varepsilon')}{\varepsilon + \Omega - \varepsilon'} \right], \quad (1)$$

$$\text{Im} \Sigma(\varepsilon) = -\pi \int_0^{\infty} d\Omega \alpha^2 F(\Omega) \times \\ \times \left[N(\varepsilon - \Omega)(n(\Omega) + f(\Omega - \varepsilon)) + N(\varepsilon + \Omega)(n(\Omega) + f(\varepsilon + \Omega)) \right] \text{sign}(\varepsilon),$$

где $\Sigma(\varepsilon)$ - аналитическое продолжение $\Sigma(k, i\omega_n)$ на вещественную ось $i\omega_n \rightarrow \varepsilon + i\eta$, $f(\varepsilon)$, $n(\Omega)$ - фермиевская и бозевская функции, соответственно,

$\alpha^2 F(\Omega)$ и $B(q, \Omega)$ - спектральные плотности электрон-фононного (ЭФ) взаимодействия и фононной функции Грина, соответственно; ξ_k - энергетический спектр. «Голая», то есть перенормированная электрон-фононным взаимодействием плотность электронных состояний в идеальной решетке кристалла $N_0(\xi)$ модифицируется ЭФ взаимодействием, что приводит к перенормированной самосогласованным образом одночастичной плотности электронных состояний $N(\varepsilon)$

$$N(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi N_0(\xi) \text{Im} G(\xi, \varepsilon),$$

$G^{-1}(\xi, \varepsilon) = \varepsilon - \xi + \Sigma(\varepsilon)$. Результаты численного расчета системы уравнений (1)

по итерационной схеме в приближении эйнштейновской модели фононного спектра и нулевой температуры $T=0$ приведены на рис. 1.а. ($D=10\omega_D$). На рис. 1.б. приведена перенормированная электрон-фононным взаимодействием ширина зоны $\tilde{D}$, определяемая как функция константы электрон-фононной связи λ по ширине переменной составляющей линии $N(\varepsilon)$ на полувывсоте.

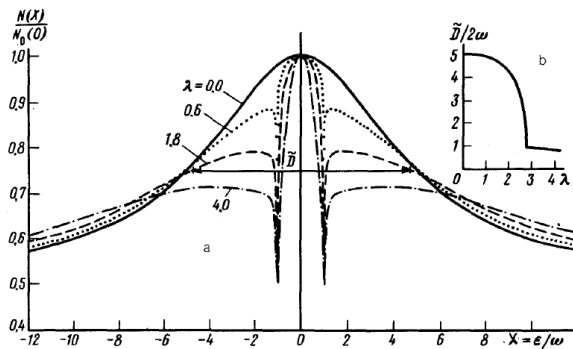


Рис.1. а. Одночастичная электронная плотность состояний, ренормализованная электрон-фононным взаимодействием. б. $\tilde{D}$ - ренормализованная ширина зоны, определяемая как ширина $N(\varepsilon)$ на полувывсоте. $D=10\omega_D$.

Из рис. 1.а. и 1.б. видно, что при некоторой $\lambda \geq \lambda^* > 1$ ширина зоны резко уменьшается до значений $\tilde{D} < \omega_D$. Физическая причина такой реконструкции электронной зоны заключается в том, что при $\lambda \square \tilde{g}^2 N_0(0) > 1$ глубина поляронной ямы $\varepsilon_p \square \tilde{g}^2$ превосходит кинетическую энергию электрона D . Вследствие нормировки $N_0(0) \square D^{-1}$, поэтому условие сильной связи $\lambda > 1$ ограничивает исходную ширину электронной зоны D и делает недопустимым приближение $N_0(\xi) = N_0(0)$.

Построена обобщенная теория нормальных свойства ЭФ систем в случае сильной $\lambda > 1$ связи. Показано, что из трех основных допущений классической теории, а именно: 1) предположения об исходной трансляционной инвариантности в силу пренебрежения внутрикристаллическими полями гриновской функции $G(x, x', \tau) \equiv G(x - x', \tau)$; 2) пренебрежения фононными поправками к вершинной части; 3) пренебрежения конечной шириной электронной зоны, которое выражается также и в том, что одночастичная плотность электронных состояний считается константой $N(\varepsilon) \approx N(0)$, некорректными при $\lambda \gtrsim 1$ являются первое и третье. Учтено изменение симметрии кристалла, возмущенного бесконечно

малым источником, что приводит к понижению полной симметрии кристалла. Получены уравнения для функции Грина, учитывающие локальную неустойчивость решетки и воспроизведен поляронный характер закона дисперсии электронов в зоне.

Установлена возможность образования одноузельных некогерентных дырочных пар (дырочных биполяронов), то есть псевдощелевого состояния. Полученные уравнения описывают эффект спаривания поляронов в чисто квантовый аналог биполарона, приводящего к появлению псевдощелевого состояния. Полюса функции Грина $G_{mm}(\omega)$ или аномальной функции Грина $F_{mm}(\omega)$ определяют энергию связи дырок в таком биполароне, а температура, соответствующая исчезновению аномальной функции Грина $F_{mm}(\omega)$, отвечает исчезновению эффекта псевдощелевого состояния.

В гл.3 теория нормального состояния кристаллов обобщена для учета переменного характера плотности электронных состояний в зоне с учетом конечности ширины электронной зоны. Рассмотрен фононный вклад в электронную функцию Грина купратов в нормальном состоянии. Показано, что как низкоэнергетические, так и высокоэнергетические особенности функции Грина, а также аномальное уширение зоны в купратах воспроизводятся эффектами электрон-фононного взаимодействия в расширенной теории Мигдала. Обнаруженные в ряде недавних экспериментальных работ, выполненных в купратах методом ARPES, особенности (кинки) реальной и мнимой компоненты нодальной фракции собственно энергетической части (СЧ) электронной функции Грина (ФГ) при низких частотах $\omega \approx 70 - 75 \text{ meV}$ в результате проведения комплекса расчетов в рамках созданной физической теории интерпретированы как проявление в электронном спектре частотных особенностей спектральной функции ЭФ взаимодействия $\alpha^2 F(\omega)$. Показано, что учет отличия от константы электронной плотности состояний вблизи поверхности Ферми приводит к реконструкции СЧ электронной ФГ и плотности состояний в ЭФ системах. В

результате решения уравнений нормального состояния показано, что реконструкция реальной части $\text{Re}\Sigma$ и мнимой части $\text{Im}\Sigma$ СЧ в материалах с конечной шириной электронной зоны не ограничена областью частот ω порядка предельной фононной частоты ω_D , а распространяется на область

гораздо большего диапазона частот $\omega \gg \omega_D$.

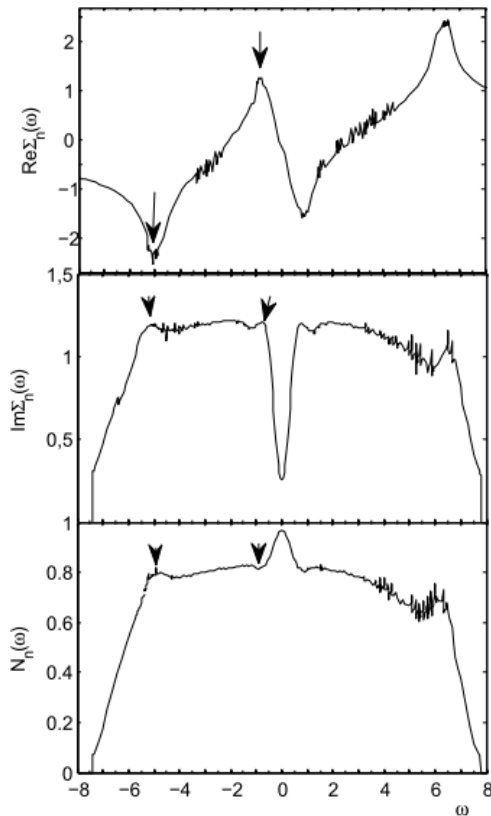


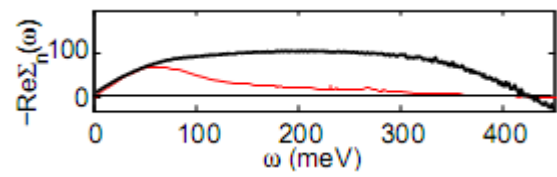
Рис.2. Реальная составляющая (а) нодальной фракции собственно-энергетической части $\text{Re}\Sigma_n(\omega)$, мнимая составляющая (б) нодальной фракции собственно-энергетической части $\text{Im}\Sigma_n(\omega)$, (с) плотность электронных состояний $N_n(\varepsilon)$, ренормализованные ЭФ взаимодействием, как функции энергии ω ниже и выше уровня Ферми. $\text{Re}\Sigma_n(\omega)$, $\text{Im}\Sigma_n(\omega)$, температура T , химический потенциал μ , полуширина зоны W представлены в безразмерных единицах. $N_n(\varepsilon)$ ренормализована по отношению к «голой» плотности электронных состояний N_0 , $T=0.15$. Низкоэнергетические и высокоэнергетические кинки обозначены стрелками. Вычисления выполнены для случая оптимального допирования Bi2212 , $\delta = 0.16$ (дырочное допирование).

При расчете СЧ функции Грина для типичного представителя купратов Bi2212 с

привлечением спектральной функции ЭФ взаимодействия, моделирующей экспериментальные значения, детали расчетных значений СЧ соответствуют эксперименту. Особенности спектральной функции ЭФ взаимодействия $\alpha^2 F(\omega)$ проявляются в виде низкоэнергетического кинка и «плеча» на кривых $\text{Re}\Sigma(\omega)$ и $\text{Im}\Sigma(\omega)$, а также в виде особенностей поведения плотности состояний $N(\omega)$ (рис.2). Показано, что как низкочастотные, так и высокочастотные особенности (кинки) СЧ в купратах обязаны своим возникновением ЭФ взаимодействию. Рассчитана зависимость действительной части функции Грина от температуры. Представлены результаты расчетов $-\text{Re}\Sigma_n(\omega)$ при различных температурах для Bi2212 . Расчетные кривые наложены на экспериментальные графики,

полученные методом ARPES (рис. 3).

Рис.3. Вычисленная $-\text{Re}\Sigma_n(\omega)$, $T=130\text{K}$, (тонкая черная сплошная линия) в сравнении с экспериментально наблюдаемой $-\text{Re}\Sigma_n(\omega)$ для оптимально допированного Bi2212.



Для меньших единицы безразмерных частот поведение действительной компоненты СЧ части может быть охарактеризовано как «плечо», наблюдавшееся в экспериментах. При температурах, существенно меньших температуры сверхпроводящего перехода T_c , практически весь вклад в реальную составляющую СЧ части обусловлен фононами.

Разработана обобщенная теория Элиашберга сверхпроводимости для ЭФ систем с конечной шириной электронной зоны с учетом зависимости от температуры. Построена физическая теория в рамках пересмотренного варианта теории Мигдала-Элиашберга для ЭФ системы в купратах при ненулевой температуре $T \neq 0$ в Намбу-представлении, которая учитывает d-свойства, конечность ширины электронной зоны и непостоянство плотности электронных состояний в пределах зоны, а также эффекты, вытекающие из электрон-дырочной неэквивалентности. В построенной обобщенной физической теории уравнения Элиашберга выведены заново на более строгом основании, что привело к новым членам в уравнениях для параметра порядка, которые не учитывались в предыдущих версиях теории Элиашберга. Через поведение вершины $\hat{\Gamma}$ и СЧ $\hat{\Sigma}_{el-el}(x, x')$ учтены эффекты, проистекающие из электрон-электронных корреляций и электрон-магнетонного взаимодействия в купратах. В частности, поведение аномальной части ФГ рассматривалось имеющим d-характер. Использовалась техника решения уравнений Элиашберга для реальных частот. Такая техника позволила контролировать в процессе вычислений частотное поведение $\text{Re}Z(\omega)$, $\text{Im}Z(\omega)$, $\text{Re}\Sigma(\omega)$ и $\text{Im}\Sigma(\omega)$, сравнивая результаты расчетов с соответствующими зависимостями, полученными из эксперимента.

Рассматривается фононный вклад в нодальную аномальную электронную функцию Грина (ФГ). Учитывается спаривание в пределах полной ширины электронной зоны, а не только в узком слое у поверхности Ферми. Обнаружено, что эффект подавления вклада высоких частот в полученных заново уравнениях Элиашберга ЭФ системы с конечной шириной электронной зоны является решающим фактором для проявления эффекта высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП). Показано, что вблизи оптимального допирования дырочного типа в купратах высокое значение T_c воспроизводится спектральной функцией электрон-фононного взаимодействия, полученной из туннельных экспериментов.

Создана физическая теория с отдельными (не связанными) уравнениями для нодальной и антинодальной ФГ при уровнях допирования, близких к уровню оптимального допирования $\delta \approx 0.16$. Для реальной части нодальной фракции комплексного аномального параметра порядка в рамках созданной физической теории получено следующее уравнение:

$$|Z(\omega)| \operatorname{Re} \Delta(\omega) = P \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \Gamma N_0 \cdot K^{ph}(z', \omega) \frac{1}{z' |Z(z')|} \left\{ \Xi(z') [\operatorname{Re} \Delta(z') \operatorname{Re} Z(z') + \operatorname{Im} \Delta(z') \operatorname{Im} Z(z')] + \right. \\ \left. + 0.5 \cdot \Lambda(z') [\operatorname{Im} \Delta(z') \operatorname{Re} Z(z') - \operatorname{Re} \Delta(z') \operatorname{Im} Z(z')] \right\}. \quad (2)$$

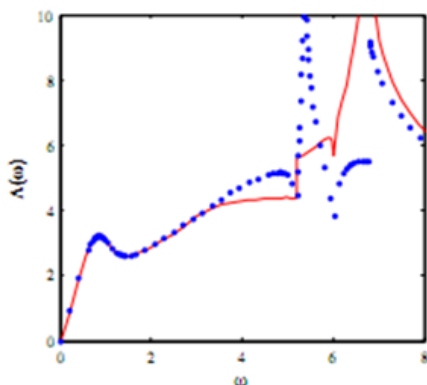
Для мнимой части параметра порядка в рамках созданной физической теории получено уравнение:

$$\operatorname{Im} \Delta(\omega) |Z(\omega)| = \pi \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \frac{1}{2} \Gamma N_0 \cdot \alpha^2 (|\omega - z'|) F(|\omega - z'|) \operatorname{sign}(\omega - z') \frac{1 + th \frac{z}{2T}}{z |Z(z)|} \times \\ \times \left\{ \Xi(z) [\operatorname{Re} \Delta(z) \operatorname{Re} Z(z) + \operatorname{Im} \Delta(z) \operatorname{Im} Z(z)] + 0.5 \cdot \Lambda(z') [\operatorname{Im} \Delta(z') \operatorname{Re} Z(z') - \operatorname{Re} \Delta(z') \operatorname{Im} Z(z')] \right\} \quad (3)$$

Здесь $\Delta(\omega) = \varphi(\omega) / |Z(\omega)|$, $|Z(z')| = (\operatorname{Re}^2 Z(z') + \operatorname{Im}^2 Z(z'))^{\frac{1}{2}}$, интеграл по z' в (2) берется в смысле главного значения, что отмечено символом P , $\Xi(z')$ и $\Lambda(z')$

представляют собой факторы, которые учитывают конечность ширины электронной зоны (рис. 4, 5):

Рис. 4. Безразмерный «логарифмический» фактор



$\Lambda(\omega)$ при оптимальном допировании дырочного типа $p=0.16$ (сплошная линия) и при той же степени допирования электронного типа (точечная линия) в Bi2212 при $T=0.25$.

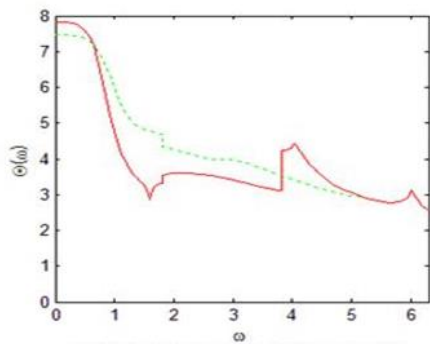


Рис.5. Безразмерный фактор конечной ширины зоны $\Theta(\omega)$ при оптимальном допировании дырочного типа $p=0.16$ (сплошная линия) и при той же степени допирования электронного типа (точечная линия) в Bi2212 при $T=0.25$.

Результаты расчетов для $\text{Re} Z(\omega)$ и $\text{Im} Z(\omega)$ (рис.6) в «дырочных» купратах Bi2212 при $T = 0.10$ и оптимальном уровне допирования $\delta = 0.16$ находятся в согласии с экспериментами.

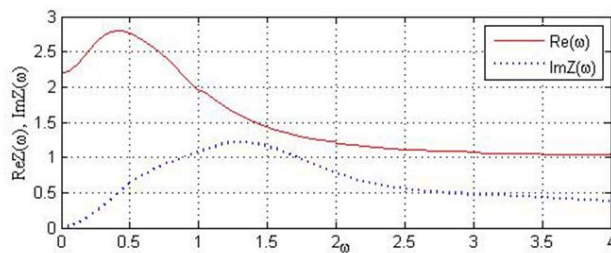


Рис. 6. Безразмерная комплексная перенормировка массы электрона (дырки) $\text{Re} Z(\omega)$, $\text{Im} Z(\omega)$ в Bi2212. Полуширина зоны $W=5$, $T=0.15$, допирование дырочного типа, $p=0.16$. Полуширина зоны W , а также T

представлены в безразмерных единицах ω_0 усредненной фононной частоты.

Решение методом итераций системы уравнений (2), (3) выполнено для ясности результатов с использованием спектральной функции ЭФ взаимодействия Эйнштейновского типа $\alpha^2 F(z) = \lambda \omega_0 \delta(z - \omega_0) / 2$, которая «моделирует» экспериментально наблюдавшееся поведение функции Элиашберга $\alpha^2 F(z)$ для Bi2212 при $\omega_0 \approx 60$ мэВ. Поведение реальной части параметра порядка $\text{Re} \Delta_{nod}(\omega, T)$ при оптимальном уровне допирования дырочного типа $\delta = 0.16$ с результирующим значением $T_c \approx 0.28 \omega_0$ представлено на рис.7.

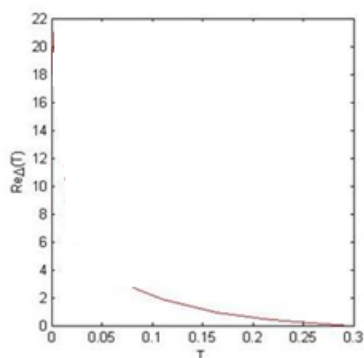


Рис.7. Зависимость $\text{Re} \Delta(\omega = 0.3, T)$ от температуры в Bi2212 при допировании дырочного типа $p=0.16$. T , ω , Δ выражены в безразмерных ω_0 -единицах усредненной фононной частоты.

В гл.3. выполнены исследования из первых принципов электронных и фоновых свойств металлического водорода [1,2], металлического сероводорода [3] и фосфидов. В данной главе приводятся также результаты расчетов нормальных электронных и фоновых свойств метастабильной фазы сульфида водорода SH_2 под давлением. Представлены следующие расчетные характеристики орторомбической структуры SH_2 : 1. Изменение основных параметров системы в зависимости от давления. 2. Зонная структура и электронная плотность числа состояний (DOS) в зависимости от давления. 3. Парциальная электронная плотность числа состояний по всем атомам (PDOS) в зависимости от давления. 4. Парциальная электронная плотность числа состояний (PDOS) на атомах Н в зависимости от давления. 5. Парциальная электронная плотность числа состояний (PDOS) на атомах S в зависимости от давления. 6. Дисперсия фононов и плотность числа фононов (DOS) в зависимости от давления. 7. Картины колебаний фононов с максимальной частотой (DOS) в зависимости от давления. Показано, что колебания атомов плоскости, состоящей из атомов водорода, с частотой $\nu_1 = 2420,94 [\text{см}^{-1}]$ происходят в противофазе (рис. 8.а). Синфазные колебания всех атомов плоскости, состоящей из атомов водорода, имеют частоту $\nu_2 = 2306,72 [\text{см}^{-1}]$ (рис. 8.б) и обладают максимальной инфракрасной интенсивностью.

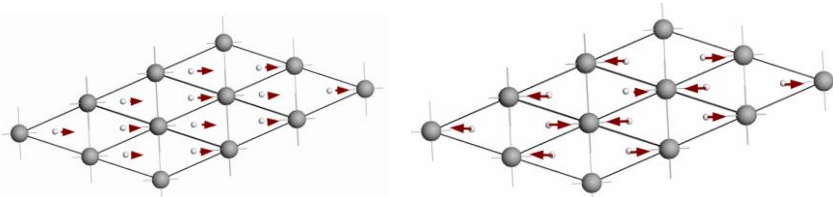


Рис. 8 а - картина направлений смещений атомов водорода (малые шарики) в структуре SH_2 при давлении $P=170 \text{ ГПа}$ с частотой $\nu_1 = 2420,94 [\text{см}^{-1}]$ и нулевой ИР-интенсивности. Эти колебания происходят в противофазе; б – картина синфазных смещений атомов водорода в структуре SH_2 при давлении $P=170 \text{ ГПа}$ с частотой $\nu_2 = 2306,72 [\text{см}^{-1}]$;

1] и нулевой ИР-интенсивности. Эти колебания происходят в противофазе; б – картина синфазных смещений атомов водорода в структуре SH_2 при давлении $P=170 \text{ ГПа}$ с частотой $\nu_2 = 2306,72 [\text{см}^{-1}]$;

Первопринципный метод математического моделирования использован для расчета структурных, электронных, фоновых и других характеристик металлической нормальной фазы водорода при давлении 500 ГПа. Показано, что металлический водород, имеющий решетку с симметрией ячейки

I41/amd, является стабильной фазой при высоком гидростатическом давлении сжатия. Полученная структура обладает устойчивым относительно распада спектром фононов. При давлении порядка 450÷500 ГПа структура атомарного водорода с симметрией I41/amd является устойчивой металлической фазой. Фононный спектр этой фазы не содержит мнимых частот и простирается до максимальной частоты порядка 340 мэВ. При снижении давления до 400 ГПа в фононном спектре появляются мнимые частоты.

В главе 4 изучен эффект реконструкции электрон-фононной системы металлического сероводорода и металлического водорода, обусловленной ЭФ взаимодействием. Представлены методы расчета и результаты расчета нормального состояния (рис. 9) металлического сероводорода фазы SH_3 . Впервые получена плотность состояний электронного спектра металлического сероводорода в фазе SH_3 под давлением $P=225$ ГПа, отличающаяся от «голового» электронного спектра без учета сильного электрон-фононного взаимодействия, учитывающего лишь обменное и корреляционное электрон-электронное взаимодействие в поле идеальной кристаллической решетки.

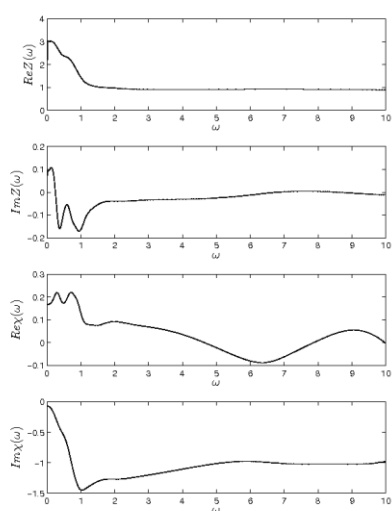


Рис. 9. Реконструированные параметры зоны проводимости металлического сероводорода в фазе SH_3 . а. реальная часть $\text{Re } Z(\omega)$ перенормировки массы $Z(\omega)$ функции Грина электронов в фазе SH_3 сероводорода, б.

мнимая часть $\text{Im } Z(\omega)$ перенормировки массы электрона в собственно-энергетической части электронной функции Грина, в. ренормализованная электрон-фононным взаимодействием реальная часть $\text{Re } \chi(\omega)$ перенормировки химического потенциала сероводорода. г. ренормализованная электрон-фононным взаимодействием мнимая часть $\text{Im } \chi(\omega)$ перенормировки химического потенциала сероводорода. Частота ω выражена в безразмерных единицах (в долях максимальной частоты фононного спектра, составляющей для данной фазы сероводорода 0.214 эВ). Все результаты получены для давления $P=225$ ГПа и температуры $T=200\text{K}$.

Впервые получена также плотность состояний электронного спектра

металлического водорода в фазе I41/AMD под давлением $P=500$ ГПа, модифицированная нулевыми и температурными колебаниями ионов кристаллической решетки металлического водорода. Для расчетов использовались реалистичные вычисленные с высокой точностью «голые» электронные и фононные характеристики фазы SH_3 сероводорода для давления $P=225$ ГПа из гл. 3, а также «голые» электронные и фононные характеристики фазы I41/*amd* металлического водорода для давления $P=500$ ГПа. Теория Элиашберга обобщена для учета переменного характера плотности электронных состояний, и разработаны физические методы решения возникающей системы уравнений. Разработан обобщенный метод решения уравнений Элиашберга на действительной оси с учетом переменного характера плотности электронных состояний. Решены обобщенные уравнения Элиашберга с учетом переменного характера плотности электронных состояний. Получено количественное совпадение T_c для фазы SH_3 сероводорода с экспериментом. Определена частотная зависимость, а также тонкая структура реальной части $\text{Re}\varphi(\omega)$ и мнимой части $\text{Im}\varphi(\omega)$ параметра порядка, отвечающие выбранной фазе SH_3 сероводорода при температуре $T=175\text{K}$. Найдено изменение функциональной зависимости параметра порядка от частоты в зависимости от температуры. Найдена величина энергетической щели в фазе SH_3 сероводорода, которая оказалась примерно равной 600 градусам Кельвина. Показано, что при температурах выше критической параметр порядка весьма медленно стремится к нулю с ростом номера итерации, сохраняя функциональное поведение от частоты, характерное для сверхпроводящего состояния. Все расчеты проводились из первых принципов. Рассмотрение проводилось на реальной оси, так чтобы можно было исследовать частотное поведение параметра порядка без процедуры аналитического продолжения одновременно с расчетом T_c . Получено значение $T_c=177\text{K}$ для металлического

сероводорода, совпадающее с экспериментальным значением в сероводороде при давлении 225 ГПа.

Получено количественное значение $T_c = 217\text{K}$ температуры сверхпроводящего перехода для фазы I41/AMD металлического водорода (рис.10).

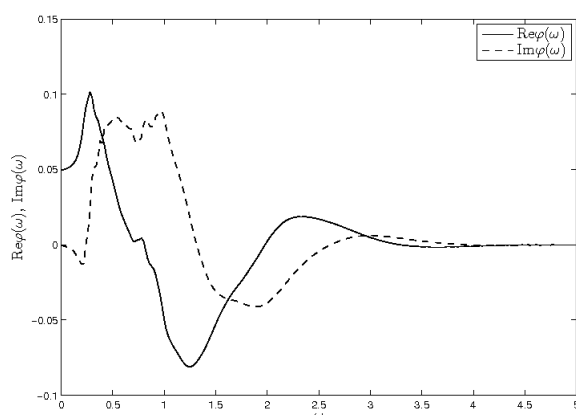


Рис. 10. Зависимость от частоты установившегося решения для реальной части $\text{Re}\varphi(\omega)$ и мнимой части $\text{Im}\varphi(\omega)$ параметра порядка в фазе I41/*amd* металлического водорода при $T=215\text{K}$ при давлении $P=500$ ГПа. Частота выражена в безразмерных единицах, соответствующих предельной частоте фононного спектра 0.34eV .

Определена частотная зависимость, а также тонкая структура реальной части $\text{Re}\varphi(\omega)$ и мнимой части $\text{Im}\varphi(\omega)$ параметра порядка, отвечающие выбранной фазе I41/*amd* металлического водорода при температурах $T=185\text{K}$, 195K , 205K , 215K . Найдено изменение функциональной зависимости параметра порядка от частоты в зависимости от температуры. Найдена величина энергетической щели в фазе I41/*amd* сероводорода, которая оказалась равной 78 мэВ (рис.10). Расчеты проводились из первых принципов. Не делалось никаких предположений и не использовалось никаких подгоночных параметров. Рассмотрение проводилось на реальной оси так, чтобы можно было исследовать частотное поведение параметра порядка без процедуры аналитического продолжения одновременно с расчетом T_c . Для появления высокого T_c в ЭФ системе критически важно принимать в учет переменный характер плотности электронных состояний в зоне проводимости. Учет непостоянства плотности электронных состояний в такой зоне приводит к возможности спаривания электронов во всем Ферми-объеме, в отличие от обычно рассматриваемого спаривания в пределах слоя толщиной ω_D у поверхности Ферми. Учет кулоновского псевдопотенциала

электронов в металлическом водороде приводит к несущественному уменьшению вычисляемого T_c .

В главе 5. Проведено исследование нормальных и сверхпроводящих свойств двухзонных материалов и кристаллов с примесями. Построена обобщенная теория влияния дефектов на электрон-фононную систему, спектральную функцию электрон-фононного взаимодействия и критическую температуру сверхпроводников со структурой А-15. Одновременно учитывается влияние на T_c эффектов размытия тонкой структуры плотности электронных состояний [4]. Получено аналитическое модельное выражение для спектральной функции электрон-фононного взаимодействия в кристалле с дефектами

$$\alpha^2 F(p, \omega) = C \frac{\omega^2 \Gamma}{(\omega - \Omega)^2 + \Gamma^2} \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i(p)}{(\omega - \omega_i(p))^2 + \Gamma_i^2(p)}. \quad (4)$$

Здесь p - концентрация дефектов; C - константа, значение которой находится из условия $\int_0^\infty \alpha^2 F(0, \omega) d\omega = 0,5 \lambda_0 \langle \omega \rangle$, где λ_0 и $\langle \omega \rangle$ - первые два момента спектральной функции идеального кристалла; N - число пиков в $\alpha^2 F(0, \omega)$. Показано, что параметры $\omega_i(p)$ и $\Gamma_i(p)$, задающие положения и полуширины пиков в $\alpha^2 F(p, \omega)$, следующим образом зависят от концентрации дефектов:

$$\omega_i(p) = \omega_{0i} (1 + 0,5 p \varepsilon \alpha(\omega_{0i})); \quad \Gamma_i(p) = \Gamma_{0i} (1 + \omega_{0i} p \varepsilon b(\omega_{0i}) / \Gamma_{0i}), \quad (5)$$

где ω_{0i} и Γ_{0i} ($i=1, \dots, N$) - положения и полуширины пиков в спектральной функции идеального кристалла; ε - параметр, определяющий характерный тип дефектов в рассматриваемой кристаллической структуре, $\alpha(\omega) = (1 - \varepsilon \tilde{C} \omega^2 \Phi_0(\omega)) / R$, $b(\omega) = \varepsilon \tilde{C} \omega^2 G_0(\omega) / R$, $R = (1 - \varepsilon \tilde{C} \omega^2 \Phi_0(\omega))^2 + (\varepsilon \tilde{C})^2 \omega^4 G_0^2(\omega)$; $\tilde{C}$ - константа, определяемая из условия нормировки плотности фононных состояний идеального кристалла $G_0(\omega)$. Функции $\Phi_0(\omega)$ и $G_0(\omega)$ связаны друг с другом дисперсионным соотношением. Значения параметров Γ , Ω , ω_{0i} , Γ_{0i} определяются в результате подгонки модельной плотности

фононных состояний $G_0(\omega)$ к экспериментальной. На примере спектральной функции с тремя пиками показано, что с ростом концентрации дефектов характер и степень изменения $\alpha^2 F(p, \omega)$ зависят от параметра ε и соотношения между высотами первого и второго пиков в $\alpha^2 F(0, \omega)$. Для сверхпроводника Nb_3Sn анализируется влияние дефектов замещения на спектральную функцию ЭФ взаимодействия (рис. 11) и первые два ее момента $\lambda(p)$ и $\langle \omega(p) \rangle$.

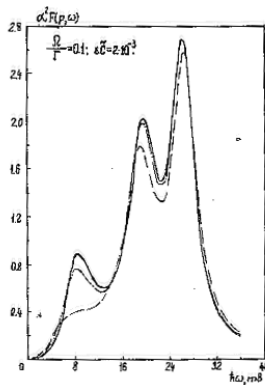


Рис.11. Спектральная функция электрон-фононного взаимодействия неидеального кристалла для различных значений относительной концентрации дефектов p :

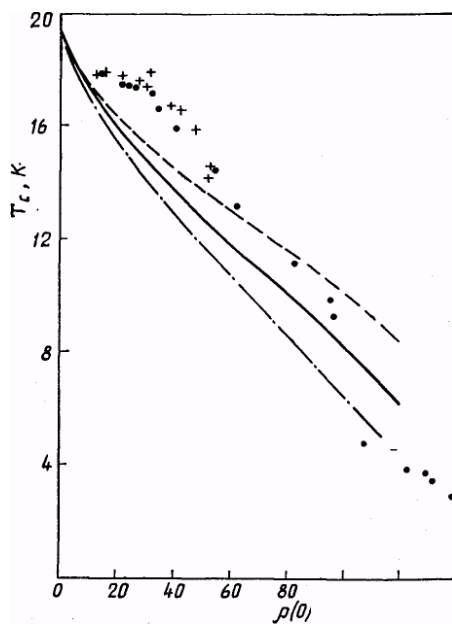
————— - $\varepsilon p = 0$; - $\varepsilon p = 0,1$; - $\varepsilon p = 0,6$.

В рамках построенной теории показано, что с ростом p в $\alpha^2 F(p)$ заметно размываются первые два пика, а, как следствие этого, уменьшается константа электрон-фононной связи λ и увеличивается средняя фононная частота $\langle \omega \rangle$.

Критическая температура рассчитывается в приближении сильной связи из полученной в рамках температурной техники обобщенной системы уравнений Элиашберга для функций Θ_n, Z_n, χ_n , задающих представление собственно-энергетической части функции Грина сверхпроводника

$$\hat{\Sigma}(E, i\omega) = T \sum_{n'} \int dE' \hat{\tau}_3 \hat{G}(E', i\omega_{n'}) \hat{\tau}_3 N(E') \left\{ \tilde{\lambda}(E, E'; i\omega_n - i\omega_{n'}) - \tilde{\mu}^*(E, E') - [\tilde{\Gamma}'(E, E') / \pi T] \delta_{n, n'} \right\}.$$

Здесь τ_3 - матрица Паули; $N(E)$ - плотность электронных состояний; $\tilde{\lambda}$, $\tilde{\mu}^*$ и $\tilde{\Gamma}$ - вклады в Σ , обусловленные взаимодействием электрона, соответственно, с фононами, электронами и дефектами. Модельная плотность электронных состояний идеального кристалла $N_0(E)$ задается в виде суммы постоянной составляющей и лоренцовского пика. Для выяснения вкладов размытия плотности электронных состояний $N_0(E)$ и спектральной функции $\alpha^2 F(p, \omega)$ в механизм изменения T_c проведены две серии расчетов, причем в первой серии учитывалось только размытие $N_0(E)$, а во второй – сразу оба процесса.

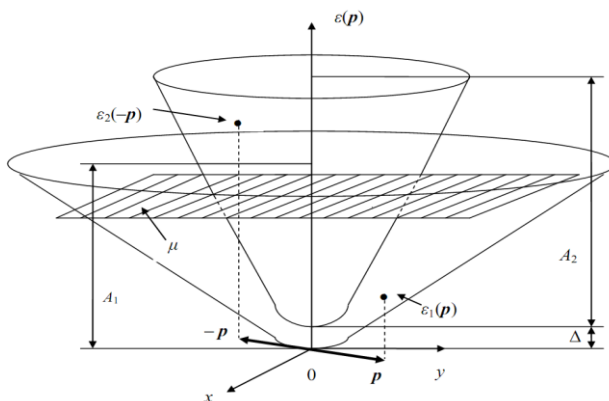


Результаты представлены на рис. 12, из которого видно, что в интервале остаточных удельных электросопротивлений $0 \leq \rho(0) \leq 50 \text{ мОм} \cdot \text{см}$ изменение T_c определяется размытием $N_0(E)$ (сплошная линия).

Рис.12. Зависимость температуры сверхпроводящего перехода Nb_3Sn от остаточного удельного электросопротивления $\rho(0)$: расчет с учетом размытия плотности электронных состояний (-----); расчет с учетом размытия плотности электронных состояний и изменения спектральной функции электрон-фононного взаимодействия (-.-.- для $\varepsilon = 1$; ----- для $\varepsilon = -1$); •, + - данные экспериментальных работ.

При больших $\rho(0)$ дополнительный учет изменения $\alpha^2 F(p, \omega)$ (штрихпунктирная линия) приводит к более быстрому уменьшению T_c , что позволяет улучшить согласие между теорией и экспериментом.

Создана теория сверхпроводимости в двухзонных материалах со спариванием электронов, находящихся в различных зонах. Построен обобщенный на случай двух зон вариант теории Мигдала-Элиашберга с межзонным спариванием в двухзонных материалах с расположением центров зон в близких точках обратного пространства (рис.13), в частности, пниктидах, при отличной от нуля температуре $T \neq 0$ в обобщенном на двухзонный случай представлении, аналогичном представлению Намбу для



однозонного случая.

Рис.13. Энергетические поверхности электронов 1^{ой} и 2^{ой} зон в импульсном пространстве. Рассмотрено спаривание электронов 1-ой зоны с массой m_1 и импульсом p с электронами 2-ой зоны

С учетом возможной сильной ЭФ связи в построенной теории

учитывается спаривание в пределах полной ширины электронной зоны, а не только в узком слое у поверхности Ферми. Обнаружено, что эффект

спаривания электронов, принадлежащих различным зонам, является решающим фактором для появления эффекта высокого T_c в этих материалах. В рамках созданной теории предсказано существование еще одного семейства двухзонных высокотемпературных материалов с температурой T_c сверхпроводящего перехода, не уступающей T_c в купратах.

В главе 6 построена теория сильного взаимодействия быстрых заряженных ориентированных частиц (ОЧ) с кристаллической ЭФ системой. Получена вероятность однофононных процессов генерации ОЧ как акустических, так и оптических фононов продольных и поперечных поляризаций с учетом ослабления кристаллического потенциала фактором Дебая-Валлера и при учете процессов переброса векторов обратной решетки ОЧ кристаллу в целом. Установлено, что общность в чертах взаимодействия быстрых и медленных частиц с фононами позволяет рассматривать такие процессы в рамках единого теоретического подхода. Построена теория, описывающая процессы возбуждения кристалла каналированной частицей (КЧ), сопровождающиеся испусканием фотонов. Доказано, что все особенности спектра электронных и фононных возбуждений кристалла проявляют себя в качестве соответствующих компонент излучения быстрой ориентированной заряженной частицы. Предсказано возникновение новых пиков в спектре излучения КЧ, связанных с процессами резонансного излучения гамма-квантов с одновременным возбуждением плазмона или пакета фононов при движении частицы в кристалле - плазмонных (фононных) крыльев излучения быстрых заряженных частиц в кристалле. Оценена возможность экспериментального обнаружения эффекта. Получено выражение для потерь энергии каналированной частицы, учитывающее как потери на близкие, так и на далекие столкновения. При этом учтена неоднородность электронной плотности и квантовомеханический характер движения частицы. Изучены вероятности квантовых переходов электронов, протонов и позитронов в каналированном состоянии. Построена теория потерь энергии каналированной релятивистской частицы на возбуждение среды. В случае

двухкомпонентной электронной плазмы кристалла построенная теория предсказывает эффект генерации акустических плазмонов КЧ.

Построена обобщенная теория эффекта объемного захвата [5] быстрых заряженных частиц (БЗЧ) в изогнутом кристалле. Рассмотрены возможные механизмы объемного захвата: 1) потери поперечной энергии вследствие возбуждения кристалла быстрой заряженной частицей (протоном); 2) многократное рассеяние БЗЧ в изогнутом кристалле; 3) дифракция БЗЧ в изогнутом кристалле. Показано, что в области зависания БЗЧ в изогнутом кристалле над кристаллографической плоскостью отношение скоростей поперечных $\frac{dE_{\perp}}{dt}(\vec{r})$ и продольных $\frac{dE_{\parallel}}{dt}(\vec{r})$ потерь энергии существенно увеличивается по сравнению с отношением $E_{\perp}/E_{\parallel}$ и по порядку величины равно $\text{Im } \varepsilon^{-1}(\vec{q}, \vec{q} + \vec{G}) / \text{Im } \varepsilon^{-1}(q)$, т.е., отношению недиагональных элементов обратной матрицы диэлектрической проницаемости (ОМДП) к диагональным. Здесь $\text{Im } \varepsilon^{-1}$ - мнимая часть ОМДП кристалла, $\vec{G}$ - вектор обратной решетки. Тем не менее, этой скорости потерь энергии недостаточно для объемного захвата, поскольку величина «сброса» поперечных потерь БЗЧ для энергии частицы $E_0 = 1 \text{ ГэВ}$, составит на радиальном расстоянии $a = 3\text{А}^\circ$ всего лишь $\Delta E_{\perp \text{ном}} \approx 0,001 \text{ эВ}$. Для оценки влияния многократного рассеяния БЗЧ на эффективность объемного захвата оценена величина диффузионного расплывания поперечной энергии $\Delta E_{\perp \text{диф}} \approx \sqrt{Da}$. В области зависания, где $E_{\perp} \lesssim 20 \text{ эВ}$, $D_{\perp} \leq 40 \text{ эВ}^2/\text{мкм}$, так что в результате получено $\Delta E_{\perp \text{диф}} \lesssim 0,1 \text{ эВ}$, что также недостаточно для объемного захвата. Таким образом, созданная обобщенная теория позволила установить, что за эффект объемного захвата БЗЧ отвечают процессы дифракции протонов на изогнутом кристалле, а также эффекты затухания недиагональных элементов матрицы плотности БЗЧ.

В главе 7 исследован процесс эволюции концентрационных профилей ионов, внедряемых в полубесконечный полупроводник в условиях

непрерывной имплантации. Установлено, что основными механизмами, ответственными за динамику такой эволюции, являются диффузионная миграция внедренных ионов и процессы их захвата и высвобождения из радиационно-наведенных центров захвата. Путем численного интегрирования, а также аналитических оценок рассчитаны временные изменения первоначально неоднородного распределения внедренных ионов во всем интервале пространственного и временного аргументов при различных соотношениях между параметрами интенсивности имплантации, диффузии и захвата-высвобождения на дефекты.

Исследована физическая модель, описывающая динамику фотоиндуцированного заряда во внешних электрических полях в полупроводниках с собственной проводимостью. Рассмотрены случаи металлических и диэлектрических контактов. Получено решение задач, описываемых системой нелинейных уравнений непрерывности и уравнением Пуассона. Установлено существование максимумов в распределениях электронов и дырок, величина и положение которых определяются параметрами полупроводника, приложенным напряжением и интенсивностью фотогенерации. Для стационарного режима процесса получено аналитическое решение. Определены условия, при которых распределения концентраций электронов и дырок имеют максимумы, найдены значения их координат. Приведено сравнение аналитического и численного решений.

В заключении приведены основные результаты диссертации

Основные результаты диссертации

1. Обнаружен эффект реконструкция поверхности Ферми для сильно связанной электрон-фононной системы. Построена теория нормальных свойств электрон-фононной системы в случае сильной электрон-фононной связи с учетом спонтанного нарушения трансляционной инвариантности.
2. Построена теория нормальных свойств нодальной компоненты

электронной функции Грина купратов и проведено сравнение предсказаний теории с экспериментальными результатами, получаемыми методом ARPES. В результате решения системы нелинейных уравнений, описывающих нормальное состояние купратов, установлен фононный механизм возникновения особенностей (кингов) частотного поведения собственно-энергетической части функции Грина электронов в купратах .

3. Построена обобщенная теория сверхпроводимости в случае сильной электрон-фононной связи в материалах с конечной шириной электронной зоны и переменной плотностью электронных состояний. Проведены расчеты параметра порядка и температуры сверхпроводящего перехода T_c купратов.

4. Показано, что металлический водород, имеющий решетку с симметрией ячейки I41/AMD, является стабильной фазой при высоком гидростатическом давлении сжатия. Полученная структура обладает устойчивым относительно распада спектром фононов. Показано, что атомарный металлический водород, имеющий решетку с симметрией ячейки FDDD, является стабильной фазой при гидростатическом давлении сжатия в интервале 350-500 ГПа. Доказано, что фаза с симметрией FDDD металлического водорода динамически устойчива в более широком интервале давлений $P=350\div 500$ ГПа, чем фаза I41/amd. Обнаружено, что для фазы FDDD характерно более сильное электрон-фононное взаимодействие с константой $\lambda \approx 2.7 - 3$ в сравнении с константой электрон-фононного взаимодействия $\lambda \approx 1.8$ в фазе I41/amd .

5. Построена обобщенная теория, описывающая реконструкцию сильным ЭФ взаимодействием нормального состояния металлического водорода, сероводорода и фосфидов с учетом резких изменений плотности электронных состояний и зависимости от давления и температуры. Выполнены исследования нормального состояния металлического водорода и сероводорода, изучен фононный спектр, и, в частности, нулевые колебания, термодинамический потенциал Гиббса для этих фаз;

6. Установлено, что структуры металлических фаз атомарного водорода с

симметрией FDDD и I41/amd сосуществуют с фазами, найденными в работах группы Ю. Кагана [1], при температурах 150-250 К из-за малой разницы величин энтальпии в интервале давлений $P=450\div 500$ ГПа с учетом энергии нулевых колебаний;

Подтвержден универсальный характер зависимостей, полученных в работе [1], описывающих уравнение состояния металлического водорода в виде зависимости удельного объема от давления, энергию нулевых фононных колебаний и энтальпию в расчете на один атом от давления для сверхпроводящих фаз металлического водорода.

7. Построена обобщенная теория Элиашберга, описывающая параметр порядка и сверхпроводимость металлического водорода, сероводорода и фосфидов с учетом резких изменений плотности электронных состояний и зависимости от давления и температуры. Выполнены исследования, описывающие детальное поведение параметра порядка в зависимости от частоты, а также описывающие температуру сверхпроводящего перехода ЭФ системы металлического водорода и сероводорода.

Выполнены расчеты критической температуры для фаз металлического водорода, имеющих решетку с симметрией ячейки I41/AMD, а также FDDD, а также для металлического сероводорода различных фаз. Получено значение $T_c=250$ К для металлического водорода с симметрией структуры FDDD.

8. Построена теория сверхпроводимости в случае межзонного спаривания в двухзонной электрон-фононной системе.

9. Построена обобщенная теория и выполнены расчеты зависимости спектральной функции электрон-фононного взаимодействия кристалла от концентрации примесей. Построена обобщенная теория сверхпроводимости металлов с немагнитными примесями. Выполнены расчеты температуры сверхпроводящего перехода металлов с немагнитными примесями.

10. Разработана теория эффектов возбуждения электронной и ионной подсистем кристалла импульсом быстрых ориентированных частиц в многокристалле. Создана теория потерь энергии каналированных

релятивистских электронов, протонов и позитронов с учетом эффектов локальных кристаллических полей. Построена теория эффекта возбуждения фононов и плазмонов квантовой каналированной частицей.

11. Обнаружен эффект проявления особенностей спектра возбуждений кристалла в спектре излучения фотонов квантовой каналированной частицы. В рамках построенной теории предсказан эффект появления плазмонных «крыльев» в излучении быстрых заряженных частиц в кристалле.

12. Разработана обобщенная теория эффекта квантового объемного захвата быстрых заряженных частиц в изогнутом кристалле с учетом эффектов дифракции быстрых заряженных частиц на изогнутых кристаллографических плоскостях, а также с учетом поперечных потерь энергии быстрой заряженной частицы.

13. Предсказан эффект ориентационной зависимости однофотонного сечения аннигиляции релятивистских позитронов на атомарных электронах в кристалле.

14. Построена физическая модель пространственно-временной эволюции радиационно-индуцированного перераспределения имплантированных ионов в полупроводниках с дефектами. Выполнено исследование эволюции динамических решеток в полупроводниках. Исследована динамика фотоиндуцированного пространственного заряда в полупроводниках.

Список цитируемой литературы

1. Ю. Каган, В.В. Пушкарев, А.Холас. Уравнение состояния металлической фазы водорода//ЖЭТФ, **73**, 967 (1977).
2. R. P. Dias, I. F. Silvera. Observation of the Wigner-Huntington Transition to Solid Metallic Hydrogen// Science, 10.1126/science.aal1579 (2017).
3. A.P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, arXiv:1412.0460, Conventional superconductivity at 190 K at high pressures; A.P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan et.al. Conventional Superconductivity at 203K at high pressures in the sulfur hydride system. Nature, doi: 10.1038/nature 14964.
4. Александров, А.С., Елесин. В.Ф., Казеко, М.П. К теории влияния

радиационных дефектов на критическую температуру сверхпроводников// ФТТ -1979.- Т.21.-С. 2062-2072.

5. Андреев, В.А., Баублис, В.В., Дамаскинский, Е.А. и др. Экспериментальное обнаружение эффекта объемного захвата в режим каналирования изогнутым монокристаллом// Письма в ЖЭТФ.-1982.- Т. 36.- вып. 9.- С. 340-343.

Список работ, опубликованных по теме диссертации

Научные статьи в ведущих рецензируемых научных журналах и изданиях, перечень которых утвержден Высшей аттестационной комиссией

1. Mazur, E.A. Phonon origin of low energy and high energy kinks in high temperature cuprate superconductors// Europhysics Letters (EPL), 2010. - V.90, P.47005-47016.

2. Мазур, Е.А., Каган, Ю. Высокое T_c в купратах как универсальное свойство электрон-фононной системы// ЖЭТФ. 2015.- Т.148. - вып.2.-С.275-284.

3. Мазур, Е.А. Анизотропия МФР на коротковолновых фононах// Письма в ЖЭТФ, 1986,Т.43, вып. 8, С.381-384.

4. Mazur, E.A., Dubovik, V.M. High-temperature superconductivity in two-band materials with interband pairing// European Physical Journal, ser.B, 88, p.150-160, 2015.- DOI: 1140/epjb/e2015-60145-y.

5 . Корнеева, Л.А., Мазур, Е.А. Влияние температуры на фононный вклад в функцию Грина высокотемпературных сверхпроводящих купратов// ЖЭТФ, 2012. - Т.142, вып 2(8).-С.358-362.

6. Мазур, Е.А., Дубовик, В.М. Высокотемпературная сверхпроводимость в двухзонных материалах с межзонным спариванием// ЖЭТФ.-2015. - Т.148.- вып.1.-С. 63-72.

7. Mazur, E.A., Kagan, Yu. Phonon origin of high T_c in superconducting cuprates// Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2013.-V.26.- №4.- P.1163-1166.

8. Мазур, Е.А., Дубовик, В.М. Температура перехода в сверхпроводниках с межзонным спариванием// Письма ЖЭТФ.- 2015.-Т.101.-вып.8.-С.606-612.

9. Александров, А.С., Мазур, Е.А. Электрон-фононная система с сильной связью и нарушение теории Мигдала-Элиашберга// ЖЭТФ, 1989.- Т.96, № 5, С.1773-1782.

10. Александров, А.С., Гребенев, В.Н., Мазур, Е.А. Нарушение теоремы Мигдала для сильно связанной электрон-фононной системы// Письма в ЖЭТФ, 1987, Т. 45.- вып. 7.- С. 357 -360.

11. Гребенев, В.Н., Мазур, Е.А. Температура сверхпроводящего перехода

неидеальных сверхпроводников со структурой A-15 // Физика низких температур, 1987.- Т.13.- №5.-С.479-485.

12. Mazur, E. Crystal excitations features in the photon emission spectrum of the quantum channeled particle// Nuclear Instruments and Methods.ser.B.-2015.- V.**B355**.-P.57-59, doi:10.1016/j.nimb.2015.02.013.

13. Мазур, Е.А. Объемный захват - дифракция протонов на изогнутых кристаллографических плоскостях// ЖТФ. – 1988.- Т. 58.-№ 5. - С. 987-990.

14. Калашников, Н.П., Мазур, Е.А. Особенности спектра излучения при каналировании ультрарелятивистских лептонов // ЖЭТФ, 2019. - Т.155, вып. 4.-С. 579-589.

15. Kalashnikov, N.P., Mazur, E.A. Plasmon Wings in the Photon Emission Spectrum of the Quantum Channeled Particle // Physics Procedia, 2015.- V.72.- P.532-535.

16. Н.П.Калашников, Е.А.Мазур, А.С.Ольчак. Ориентационная зависимость аннигиляции релятивистских позитронов в монокристалле. Ядерная физика, **79**, №3, 2016, с. 390-396.

17. Дегтяренко, Н.Н., Мазур, Е.А. Устойчивая структура металлического водорода при давлении 500 ГПа. // Письма ЖЭТФ.- 2016.-Т.104.-вып.5.- С.329-333.

18. Kalashnikov, N.P., Mazur, E.A., Olczak, A.S. Annihilation of Relativistic Positrons in Single Crystal with production of One Photon// Int. J. Mod. Phys. A.- 2015.-V.30.-№22.-P.1550137.

19. Дегтяренко, Н.Н., Мазур, Е.А. Причины высокотемпературной сверхпроводимости в электрон-фононной системе сероводорода// ЖЭТФ.- 2015.- Т.148, вып.2.- С.289-298.

20.Кудряшов Н.А., Кутуков А., Мазур Е.А. Критическая температура металлического водорода при давлении 500 ГПа //Письма ЖЭТФ.-2016. - Т.104.-вып. 7.-С.488-493.

21. Kalashnikov, N.P., Mazur, E.A., Olczak, A.S. Orientation Dependence Of the Channeled Positrons Conversion into a Single Photon// Physics Procedia, 2015.- V.72.-P.528-531.

22.Кудряшов Н.А., Кутуков А., Мазур Е.А. Нормальное состояние металлического сероводорода. ФММ.-2017- Т.118.-вып. 2.-С.119-129.

23.Н.А. Кудряшов, А.А. Кутуков, Е. А. Мазур. Реконструкция зон в металлическом водороде. //Письма ЖЭТФ.-2017. - Т.105.-вып. 7.-С.423-428.

24.Кудряшов Н.А., Кутуков А., Мазур Е.А. Реконструкция зоны проводимости в металлическом сероводороде //ЖЭТФ.-2016. - Т.150.-вып. 3.-С.558-566.

25. Дегтяренко, Н.Н., Мазур, Е.А. Оптимизация сверхпроводящей фазы

сероводорода// ЖЭТФ.- 2015.- Т.148.- вып.5. – С.1215-1224.

26. Кудряшов Н.А., Кутуков А., Мазур Е.А. Критическая температура металлического сероводорода при давлении 225 ГПа//ЖЭТФ.-2017. - Т.151.- вып. 1.-С.165-173.

27. Дегтяренко Н.Н., Мазур Е.А. Квазидвумерный металлический водород в дифосфиде при высоком давлении //ЖЭТФ.-2016. - Т.150.-вып.2.-С.320-327.

28. Degtyarenko, N.N., Mazur, E.A. Causes of high temperature superconductivity in the hydrogen sulfide electron-phonon system// Physics Procedia, 2015. - V.71.-P.374-378.

29. N. A. Kudryashov, A.A. Kutukov, E. A. Mazur. Metal Hydrogen Sulfide Critical Temperature at the pressure 225 GPa, J. Phys.: Conf. Ser., V. 788, Number 1, 012021, 2017, doi:10.1088/1742-6596/788/1/012021.

30. Н.Н. Дегтяренко, Е. А. Мазур, К.С. Гришаков, Металлический водород с сильным электрон-фононным взаимодействием при давлении 300-500 ГПа, //Письма ЖЭТФ.-2017. - Т.105.-вып. 10.-С.626-632.

31. N. A. Kudryashov, A.A. Kutukov, E. A. Mazur, Metal Hydrogen Sulfide Critical Temperature at the pressure 225 GPa, Nov. Supercond.Mater., 3, 50-54, 2017, doi: <https://doi.org/10.1515/nsm-2017-0001>.

32. N. A. Kudryashov, A.A. Kutukov, E. A. Mazur, Reconstruction of the electron spectrum in a metal hydrogen sulfide, J. Phys.: Conf. Ser., V. 788, Number 1, 012022, 2017, doi:10.1088/1742-6596/788/1/012022.

33. Degtyarenko, N.N., Mazur, E.A. Grishakov, K.S. Metallic hydrogen with a strong electron-phonon interaction at a pressure of 300-500 GPa, Solid State Communications, doi.org/10.1016/j.ssc.2017.06.005, V. 262, August 2017, pp. 33-39.

34. Н.Н. Дегтяренко, К.С. Гришаков, Е. А. Мазур. Электронные, фононные и сверхпроводящие свойства гидридов иттрия и серы при высоком давлении// ЖЭТФ.-2019. - Т.155.-вып. 1.-С.116-128.

35. Nikolay Kudryashov, A. A. Kutukov, E. A. Mazur. Metal hydrogen sulfide superconducting temperature calculation. Conference Paper in AIP Conference Proceedings 1863(1): 380006 · July 2017. DOI: 10.1063/1.4992561. Conference: International Conference of numerical analysis and applied mathematics (ICNAAM 2016).

36. Н.Н. Дегтяренко, К.С. Гришаков, Е. А. Мазур. Трубочатый» гидрид лантана как новый класс высокотемпературных сверхпроводящих материалов// Письма ЖЭТФ.-2019. - Т.109.-вып. 6.-С.

37. Кудряшов, Н.А., Кучеренко, С.С., Мазур, Е.А. Динамика фотоиндуцированного пространственного заряда в полупроводниках// ФТТ, 1988.- Т.30.-вып. 3. - С. 784-790.

38. Nikolay Kudryashov, A. A. Kutukov, E. A. Mazur. Numerical study of the reconstruction of the conduction band in the metal hydrogen sulfide. Conference Paper in AIP Conference Proceedings 1863(1):380005 · July 2017. DOI: 10.1063/1.4992560. Conference: International Conference of numerical analysis and applied mathematics (ICNAAM 2016).

Свидетельства о регистрации комплексов программ

39. Кудряшов Н.А., Кутуков А.А., Мазур Е.А. Программа для численного моделирования свойств веществ в сверхпроводящем состоянии при высоких давлениях. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2016663672, 13 декабря 2016 года.

40. Кудряшов Н.А., Кутуков А.А., Мазур Е.А. Программа для численного моделирования свойств веществ в нормальном состоянии при высоких давлениях. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2016661649, 19 декабря 2016 года.