Письма в ЖЭТФ, том 62, вып.2, стр.117 - 122

КИНЕТИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ В МОДЕЛИ ХАББАРДА С ОТТАЛКИВАНИЕМ

Р.О.Зайцев

Российский научный центр "Курчатовский институт"

123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 июня 1995 г.

Вычисляется аномальная температурная зависимость проводимости и постоянной Холла, определяемая рассеянием электронов с энергией вблизи поверхности Ферми, пересекающей ванховские особенности.

Температурная зависимость кинетических коэффициентов в металле определяется электрон-фононной и электрон-электронной частью интеграла столкновений. В широком интервале температур основной вклад в сопротивление дает рассеяние электронов на фононах. Однако в низкотемпературной области основную роль приобретают процессы электрон-электронного рассеяния. В настоящей работе рассмотрена электронная система с сильным отталкиванием в одной и той же ячейке, что приводит к расщеплению разрешенной электронной зоны на нижнюю и верхнюю подзоны. В пределе бесконечно большой энергии Хаббарда достаточно рассмотреть только нижнюю подзону, которая имеет тот же электронный спектр $\epsilon(\mathbf{p})$, что и в приближении сильной связи, но с интегралом перескока, зависящим от числа электронов (n), приходящихся на одну ячейку [1]:

$$\xi_{\mathbf{p}} = f\epsilon(\mathbf{p}) - \mu. \tag{1}$$

Здесь f – так называемый концевой множитель: $f = 1 - n/2$ – для нижней хаббардовской подзоны, $f = n/2$ – для верхней.

Химический потенциал μ определяется через электронную плотность n с помощью уравнения состояния, которое в нашем приближении ("Хаббард I") для нижней подзоны имеет следующий вид:

$$n = 2f\Sigma_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}), \tag{2}$$

где $n_F(\epsilon)$ – распределение Ферми.

Кластерные расчеты [2], проделанные для квадратной решетки, в предельном случае бесконечно большой энергии Хаббарда дают уравнение состояния $n = n(\mu)$, при $T = 0$ качественно совпадающее с (2).

В настоящей работе будут рассмотрены особенности температурного поведения электрон-электронных интегралов столкновений при условии, что поверхность Ферми проходит вблизи особенностей Ван-Хова. В простейших случаях квадратной и ОЦК-решетки точкам особенности Ван-Хова соответствует нулевое значение энергии Ферми и $n = 2/3$.

Решение кинетического уравнения будем искать в обычной форме: $\Phi(\mathbf{p}) = n_F(\xi_{\mathbf{p}}) - n'_F(\xi_{\mathbf{p}})g(\mathbf{p})$. Тогда уравнение линеаризованное по малой поправке $g(\mathbf{p})$, имеет следующий вид:

$$n'_F(\xi_{\mathbf{p}}) \left\{ e(\mathbf{E}\mathbf{v}) - \frac{e}{c}[\mathbf{v}\mathbf{H}]\frac{\partial g}{\partial \mathbf{p}} \right\} = -\hat{J}^{st}(g). \tag{3}$$

В нулевом приближении по величине магнитного поля Н решение кинетического уравнения $g_0(9)$ естественно искать в виде произведений $e(\mathbf{Ev})$ на неизвестную функцию от энергии возбуждений $\tau_0(\xi_\mathbf{p})$: $g_0(\mathbf{p}) = e(\mathbf{Ev})\tau_0$. В первом приближении по величине магнитного поля, направленного вдоль оси z, получаем уравнение для $g_1(\mathbf{p})$:

$$H\frac{e^2}{c}n'_F(\xi_\mathbf{p})\left\{E_\alpha\frac{\partial v_\alpha}{\partial p_y}v_x - E_\alpha\frac{\partial v_\alpha}{\partial p_x}v_y\right\}\tau_0 = -\hat{J}^{st}(g_1). \qquad (4)$$

Таким образом, если вся угловая зависимость нулевого приближения определяется множителем $(\mathbf{Ev})$, то в линейном приближении по магнитному полю угловая зависимость определяется множителем в фигурной скобке левой стороны интегрального уравнения (4).

В простейшем случае квадратной решетки: $\epsilon_\mathbf{p} = -\cos p_x - \cos p_y$

$$g_0 = e\tau_0 E_\alpha \sin p_\alpha; \qquad g_1 = e^2 H\tau_1\tau_0(-E_x\cos p_x \sin p_y + E_y \cos p_y \sin p_x)/c. \qquad (5)$$

Если предположить, что функции τ_0 и τ_1 не имеют особенностей, тогда и проводимость σ и постоянная Холла R определяются интегралами по поверхности Ферми:

$$\sigma = e^2\tau_0 < (\sin p_x)^2 > /m^*; \quad \mathrm{tg}\theta = E_y/E_x = e\tau_1 H < (\sin p_y)^2 \cos_x > /m^* c < (\sin p_y)^2 >, \qquad (6)$$

$$R = E_y/E_x H_\sigma = \tau_1 < (\sin p_y)^2 \cos p_x > /c\tau_0 e < (\sin p_y)^2 >< (\sin p_x)^2 >,$$

где угловые скобки обозначают интегрирование с множителем $\delta(\xi_\mathbf{p})$, эффективная масса m^* ниже считается равной единице.

Минимальному значению химпотенциала соответствует точка $P(0,0)$, вблизи которой постоянная Холла имеет знак, совпадающий со знаком заряда e. С возрастанием плотности величина $|R|$ убывает до нуля и, начиная с некоторой концентрации, R имеет знак, противоположный знаку заряда e, что соответствует дозаполнению нижней подзоны Хаббарда. Для квадратной решетки все средние значения $< ... >$ в (6) выражаются через полные эллиптические интегралы I и II рода $K(k)$ и $E(k)$ от аргумента $k = \sqrt{1-(\mu/2f)^2}$, $< (\sin p_\alpha)^2 >= 2[E(k)- \; -(1-k^2)K(k)]/\pi^2$;

$$< (\sin p_\alpha)^2 \cos p_\beta >= -\mu[K(k) - E(k)]/2\pi^2 f. \qquad (7)$$

Таким образом, постоянная Холла обращается в нуль при $\mu = 0$, именно для такой энергетической поверхности, которая проходит через особые точки Ван-Хова: $A = (0,\pi)$, $B = (\pi, 0)$.

Как следует из соотношений (6), проводимость и постоянная Холла определяются двумя временами релаксации, которые следует искать из решения кинетического уравнения.

Для написания кинетического уравнения необходимо знать квантовомеханическую вероятность перехода W при рассеянии с заданными импульсами p_k и спинами σ_k, которая выражается через точную амплитуду рассеяния. В борновском приближении она вычислена в работе автора [3]. Электронные концентрации считаем близкими к значениям 2/3 ($|\mu| \ll 1$). Энергия возбуждений $\xi_p = -(\cos p_x + \cos p_y) - \mu$, тогда вблизи точек Ван-Хова $A(p_x = 0,\, p_y = \pi)$,

$B(p_x=\pi, p_y=0)$ энергии возбуждений имеют гиперболический характер и взаимно противоположные по знаку эффективные массы:

$$\xi_k^a = (k_x^2 - k_y^2)/2 - \mu; \qquad \xi_q^b = (-q_x^2 + q_y^2)/2 - \mu. \tag{8}$$

Для нахождения температурной зависимости удельного сопротивления $\rho(T)$ используем вариационный принцип (см., например, [4]):

$$\rho(T) = \sum W[\psi_1+\psi_2-\psi_3-\psi_4]^2 \prod_{k=1}^{4}\{\mathrm{sec}h(\xi_{\mathrm{p}_k}/2T)\}(1/8T\mathrm{D}^2), \tag{9}$$

Здесь суммирование проводится по импульсам $\mathrm{p}_{1,2}$ рассеивающихся и $\mathrm{p}_{3,4}$ – рассеянных частиц; W – вероятность рассеяния; вектор D есть интеграл от $4e\psi v$, взятый по поверхности Ферми, и поэтому его следует считать не зависящим от температуры.

Введем переменные $\mathrm{q}=\mathrm{p}_3-\mathrm{p}_1=\mathrm{p}_2-\mathrm{p}_4$, $2\mathrm{p}=\mathrm{p}_1+\mathrm{p}_3$, $2\mathrm{p}'=\mathrm{p}_2+\mathrm{p}_4$, а затем в случае двумерной решетки вместо четырех импульсных переменных p и p' используем энергетические переменные u, u', $v=-v'=\Omega$:

$$2u=\xi(p_3)+\xi(p_1); \quad 2u'=\xi(p_4)+\xi(p_2); \quad 2v=\xi(p_3)-\xi(p_1); \quad 2v'=\xi(p_4)-\xi(p_2),$$

где $\xi(p)$ – энергия возбуждений (1). После выделения интегралов по передаваемой энергии Ω и передаваемому импульсу q получаем следующее:

$$\rho(T) = \int \frac{du\,du'\,d\Omega W[\psi_1+\psi_2-\psi_3-\psi_4]^2 \Pi_\Omega(u)\Pi_\Omega(u')d\mathrm{q}}{Jk_{\mathrm{q}}(\Omega,u)Jk_{-\mathrm{q}}(-\Omega,u')\mathrm{sh}^2(\Omega/T)8T\mathrm{D}^2}. \tag{10}$$

Здесь $\Pi_\Omega(u)=\mathrm{th}[(u+\Omega)/2T-\mathrm{th}[(u-\Omega)/2T]$, $Jk_q(\Omega,u)$ – якобиан преобразования от переменных u, u', Ω к переменным p, p' при заданном q. В предельном случае низких температур величина $\Pi_\Omega(u)$ имеет ступенчатый характер: $\Pi_\Omega(u)+2\mathrm{sgn}\Omega\{\theta(\Omega^2-u^2)\}$, так что область интегрирования по переменным u, u', Ω имеет порядок T^3. Если поверхность Ферми проходит вблизи точек Ван-Хова: $|\mu|\ll 1$, то якобианы имеют порядок наибольшей из величин, $-T$ или $|\mu|$. Отсюда заключаем, что в области самых низких температур $T\ll|\mu|\ll 1$ якобианы имеют порядок $|\mu|$, так что сопротивление возрастает по закону $T^2/|\mu|$. В области высоких температур $1\gg T\gg|\mu|$ якобианы имеют порядок T и поэтому сопротивление возрастает по линейному закону (т.к. $\int d\mathrm{q}\approx T$).

Приведенные выше оценки справедливы при естественном предположении о том, что симметризованная комбинация пробных функций $\psi_1+\psi_2-\psi_3-\psi_4$ не обращается в нуль и не имеет особенностей в существенной области интегрирования как по энергетическим, так и по переменным передаваемого импульса q. Для анализа возможных вариантов выберем пробную функцию, равную скорости в одном из главных направлений (α): $\psi=\sin\alpha$, и рассмотрим четыре типа интеграла столкновений, отвечающих рассеянию между различными точками Ван-Хова. а) В случае рассеяния между одинаковыми точками $A_1+A_2+A_3+A_4$ линейная комбинация пробных функций $G=\sin\alpha_1+\sin\alpha_2-\sin\alpha_3-\sin\alpha_4$, выраженная через передаваемый импульс q и импульсы $\mathrm{p}=(\mathrm{p}_3+\mathrm{p}_1)/2$, $\mathrm{p}'=(\mathrm{p}_4+\mathrm{p}_2)/2$ в заданном направлении α, имеет следующий вид:

$$G=2\sin(q/2)[\cos\mathrm{p}'-\cos\mathrm{p}]. \tag{11}$$

b) Для рассеяния с перебросом $A_1 + A_2 \to B_3 + B_4$ импульсы $\alpha_{3,4} = \pi + p_{3,4}$, $\alpha_{1,2} = p_{1,2}$, но попрежнему $\mathrm{p} = (\mathrm{p}_3 + \mathrm{p}_1)/2$, $\mathrm{p}' = (\mathrm{p}_4 + \mathrm{p}_2)/2$, так что

$$G = 2\cos(q/2)[\sin p' + \sin p].$$

c) В случае рассеяния из разных точек Ван-Хова $A_1 + B_2 \to A_3 + B_4$, когда $\alpha_{1,3} = p_{1,3}$, $\alpha_{2,4} = \pi + p_{2,4}$, имеем:

$$G = -2\sin(q/2)[\cos p' + \cos p]. \tag{13}$$

d) При рассеянии с большим передаваемым импульсом, близким к половине вектора обратной решетки $A_1 + B_2 \to B_3 + A_4$, когда $\alpha_{1,4} = p_{1,4}$, $\alpha_{2,3} = \pi + p_{2,3}$

$$G = 2\cos(q/2)[\sin p - \sin p']. \tag{14}$$

Можно заметить, что для гиперболической модели $(p, p' \to 0)$ в случае a) пробная функция G обращается в нуль, что очевидным образом соответствует исчезновению вклада от нормальных процессов рассеяния. В этом пределе наибольший вклад дает случай c), – рассеяние частиц с противоположной по знаку эффективной массой и небольшой величиной передаваемого импульса, – бейберовское рассеяние [5].

Рассеяние с перебросом, – случай b), а также случай d) в гиперболической модели (8) дают вклад порядка квадрата импульсов p или p', что в конечном счете приводит к появлению лишнего множителя T по сравнению со случаем c).

В пределе низких температур степенной вклад, согласно (10), происходит от области малой передаваемой энергии $\Omega \leq T$. В пределе $\Omega \to 0$ при заданном значении передаваемого импульса q области интегрирования по импульсам p и p' в случаях a) и d) совпадают, а в случае b) отличаются знаком. Отсюда можно заключить о наибольшем вкладе в случае $A_1 + B_2 \to A_3 + B_4$. Если предположить, что вероятность этого рассеяния не обращается в нуль и не имеет особенности на энергетической поверхности Ван-Хова, тогда линейный ход сопротивления начинается от температур порядка $|\mu|$. В низкотемпературной области $T \ll |\mu|$ получаем ту же зависимость T^2, что и в теории Ландау–Померанчука [6], но усиленную множителем $\ln(|\mu|/T)$.

Для вычисления температурной зависимости орбитального времени релаксации τ_1 снова используем вариационный принцип. Согласно формуле (6), в τ-приближении постоянная Холла R выражается через отношение обратного продольного $1/\tau_0$ и обратного поперечного $1/\tau_1$ времени релаксации. В общем случае вся температурная зависимость определяется отношением следующих интегралов:

$$R/R_0 \cong \{[\psi_1 + \psi_2 - \psi_3 - \psi_4]^2\}/\{[\varphi_1 + \varphi_2 - \varphi_3 - \varphi_4]^2\}, \tag{15}$$

где фигурные скобки обозначают интегрирование по всем энергетическим и угловым переменным с теми же множителями, что и в (10). Здесь φ_k – пробная функция, соответствующая левой части кинетического уравнения (4), линеаризованного по внешнему магнитному полю. Если в качестве пробной функции ψ выбрать скорость вдоль главного направления α, то функцию φ следует искать в виде $\sin\alpha\cos\beta$, где β – безразмерный импульс вдоль другого главного направления. При переходе от одной точки Ван-Хова к другой функция φ не изменяется. По этой причине для всех четырех особых интегралов столкновений (11)–(14), то есть для случаев a), b), c) d), линейная комбинация $F = \varphi_1 + \varphi_2 - \varphi_3 - \varphi_4$ имеет один и тот же вид:

$$F = -2\{c_y s_x \cos(p_x)\cos(p_y) - s_y c_x \sin(p_x)\sin(p_y)\} + 2\{p_x \to p'_x;\, p_y \to p'_y\}. \qquad (16)$$

Здесь введены обозначения: $s_\nu = \sin(q_\nu/2)$, $c_\nu = \cos(q_\nu/2)$, $\nu = x, y$. Можно заметить, что в гиперболическом пределе пробная функция F зависит от произведений импульсов $p_\lambda p_\nu$ или $p'_\lambda p'_\nu$. Кроме того, она обращается в нуль, когда импульсы p и p' совпадают, когда они отличаются знаком, а также, когда они отличаются на половину вектора обратной решетки $p - p' = (\pi, \pi)$. Эти свойства функции F приводят к тому, что интегрирование по энергетическим переменным u и u' с функцией F^2 в пределе $T \ll 1$ дает множитель Ω^4, в то время как после интегрирования с функцией $G = v_1 + v_2 - v_3 - v_4$ главный член имеет порядок Ω^2. Интегрирование степенных функций с множителем $\mathrm{sh}^{-2}(\Omega/T)$ определяет температурную зависимость выражения (15).

Таким образом, температурная зависимость постоянной Холла появляется из-за разной температурной зависимости поперечного и продольного времени релаксации. Температурное разложение обратного поперечного времени релаксации начинается со степени T^4 при низкой и со степени T^3 – при высокой температуре. Разложение обратного продольного времени релаксации начинается со степени T^2 при низких и со степени T – при высоких температурах, однако содержит анизотропные слагаемые того же порядка, что и для обратного поперечного времени релаксации. Отсюда заключаем, что для электронных концентраций, при которых поверхность Ферми близка к особенностям Ван-Хова, постоянная Холла возрастает с понижением температуры:

$$R \cong A + (B/T) + (C/T^2). \qquad (17)$$

Коэффициенты A, B, C существенно зависят от положения уровня Ферми. Все три коэффициента меняют знак, когда особенности Ван-Хова расположены на поверхности Ферми.

Существование температурной области, для которой сопротивление линейным образом зависит от температуры, также определяется близостью к ванховским особенностям. При температурах, меньших чем энергетическое расстояние до ван-ховской поверхности, температурная зависимость сопротивления имеет квадратичный характер.

Все эти три явления характерны для двухмерной модели Хаббарда и проявляются при условии, когда вероятность рассеяния (W) на поверхности Ферми не обращается в нуль и не имеет особенности. Вычисления амплитуды рассеяния, через которую выражается вероятность рассеяния W, могут быть проделаны в рамках паркетного приближения [7], что является предметом специального рассмотрения.

Как следует из общего выражения (16), качественный вид температурной зависимости постоянной Холла (17) не изменится, если вероятность перехода зависит от передаваемой энергии Ω по степенному закону. Что же касается температурной зависимости удельного сопротивления, то здесь можно выделить два случая. 1) Уже рассмотренный случай, когда вероятность перехода имеет конечное значение в широкой области энергий вблизи поверхности Ферми. При этом сопротивление имеет линейную температурную зависимость для области температур, начиная от некоторой характерной температуры T_0, которая зависит от близости электронной концентрации n к тому значению n_0, при котором постоянная Холла обращается в нуль. Если $T \leq T_0$, то сопротивление растет по закону, близкому к T^2. При $n = n_0$ имеем линейный закон при всех температурах. Закономерности такого типа наблюдаются в экспериментах на $Ln_{2-x}Sr_xCuO_4$ [8]. Согласно нашей интерпретации, температура T_0 имеет смысл близости поверхности Ферми к энергетической поверхности, проходящей через ван-ховские особенности. Случай 2) отвечает возможности обращения в нуль амплитуды рассеяния именно на поверхности Ван-Хова, что дает борновское приближение для классической модели Хаббарда [2]. В такой ситуации рассеяние от особых точек не более существенно, чем рассеяние от остальной поверхности Ферми. По этой причине квадратичный закон сопротивления можно наблюдать в широком температурном интервале, как это имеет место в $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ [9]. В соединении $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ наблюдают [10] аномальную температурную зависимость постоянной Холла, которая согласуется с (17).

Работа была поддержана международным фондом Сороса, грант MSA000, MSA300.

---

1. J.Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A281**, 238 (1964).
2. E.Dagotto, A.Moreo, D.J.Scalapino et al., Phys. Rev. Lett. **67**, 1918 (1991).
3. Р.О.Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
4. А.Ф.Барабанов, А.В.Михеенков, Л.А.Максимов, СФХТ **4**, 3 (1991).
5. W.G.Baber, Proc. Poy. Soc. **A158**, 383 (1937).
6. Л.Д.Ландау, Я.И.Померанчук, ЖЭТФ **7**, 379 (1936).
7. И.Е.Дзялошинский, ЖЭТФ **93**, 1487 (1987).
8. T.Nakano, M.Oda, C.Manabe et al., Phys. Rev. **B49**, 16000 (1994).
9. Beom-hoan O and J.T.Markert, Phys. Rev. **B47**, 8373 (1993).
10. T.R.Chien, D.A.Brawner, N.P.Ong et al., Phys. Rev. **B43**, 6242 (1991).