Физика низких температур, 2002, т. 28, № 5, с. 460–468

Гальваномагнитные эффекты в нормальном состоянии ВТСП металлооксидов в модели двухзонного сверхпроводника с узкой зоной (уровнем) вблизи границы Ферми

В. П. Галайко, Е. Н. Братусь

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины, пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: bratus@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 21 декабря 2001 г.

Продолжены исследования В. П. Галайко (*ФНТ* **19**, 123 (1993)) электронных орбитальных эффектов в ВТСП образцах (Y–Ba–Cu–O) в нормальном состоянии на примере гальваномагнитных эффектов на постоянном токе. Вычислены тензор электропроводности, электрическое сопротивление и коэффициент Холла. Результаты качественно согласуются с экспериментом.

Продовжено дослідження В. П. Галайко (*ФНТ* **19**, 123 (1993)) електронних орбітальних ефектів у ВТНП зразках (Y–Ba–Cu–O) в нормальному стані на прикладі гальваномагнітних ефектів на постійному струмі. Обчислено тензор електропровідності, електричний опір та коефіцієнт Холла. Результати якісно узгоджуються з експериментом.

PACS: **74.72.–h**, 72.20.My

Настоящая статья является продолжением работы [1], в которой исследовались различные экспериментальные следствия из предложенной ранее модели [2,3] ВТСП как двухзонного сверхпроводника с узкой зоной (уровнем) вблизи границы Ферми. Суть модели заключалось в том, что благодаря обмену синглетными парами электронов между уровнем и широкой зоной подвижных электронов возникает куперовское спаривание, при этом критическая температура сверхпроводящего перехода T_c оказывается лишь квадратично малой по константе связи, в отличие от теории БКШ, в которой она экспоненциально мала. В работе [1] в дополнение к [2,3] было учтено то обстоятельство, что вследствие характерного для ВТСП металлооксидов «допирования» (для получения максимальных T_c ; в случае соединений Y–Ba–Cu–O — допирование кислородом) ВТСП системы следует рассматривать как кристаллические растворы замещения. С точки зрения электронных свойств это означает, что они являются «грязными» сверхпроводниками с большим количеством примесных рассеивающих центров.

В работе [1] рассеяние на этих «примесях» учитывалось феноменологически — путем включения в гамильтониан электронной системы вклада взаимодействия со случайно расположенными примесями, матричные элементы которого описывали как внутри-, так и межзонные переходы при рассеянии. В рамках модели была разработана соответствующая техника усреднения физических величин по случайным координатам примесей и рассмотрены различные следствия модели. Как и в обычных сверхпроводниках, влияние примесей на термодинамические характеристики системы оказывается малым («теорема Андерсона»), в отличие от кинетических характеристик. В качестве наиболее важной характеристики была вычислена электропроводность ВТСП образца в нормальном состоянии как функция температуры и частоты. Оказалось, что, несмотря на грубость модели, результаты теории качественно согласуются с экспериментом [4] для характерных частот 10^5 с$^{-1}$.

Детальное сопоставление теории с экспериментом было проведено в работе [5].

Основные особенности этих результатов заключались: а) в типичной для всех ВТСП соединений линейной температурной зависимости сопротивления на нулевой частоте и б) в обнаруженной впервые в [4] немонотонной зависимости сопротивления от частоты и температуры — максимум сопротивления при некоторой частоте и изменение знака температурной производной сопротивления (переход от линейной температурной зависимости к так называемому «полупроводниковому ходу»). Согласно модели [1], эти особенности связаны с тем, что рассеяние подвижных электронов в широкой зоне на примесях благодаря обмену синглетными парами с узкой зоной носит резонансный характер, так что при определенной энергии частота столкновений с примесями обращается в нуль, и возникает аномально большой вклад этих электронов в проводимость. Реально этот вклад ограничивается шириной резонанса, которая не может быть вычислена в рамках модели [1], так как в ней не учтены сильные антиферромагнитные корреляции локализованных электронов и, возможно, другие взаимодействия. Ширина резонанса вводится в теорию феноменологически, и параметры теории определяются из сопоставления с экспериментом.

Несмотря на этот недостаток, можно все же ожидать, что в той степени, в какой речь идет об орбитальных эффектах, не разрушающих синглетную симметрию, модель, по крайней мере качественно, должна согласовываться с экспериментом. С этой точки зрения представляет интерес эффект Холла и электросопротивление при наличии постоянного магнитного поля H, когда роль орбитальной частоты играет ларморовская частота обращения подвижных электронов по замкнутым орбитам $\omega_H = eH/mc$ в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. Настоящая статья посвящена вычислению тензора электропроводности для этого случая и сопоставлению результатов теории с экспериментом. Ввиду частых ссылок на формулы и обозначения из работы [1] в дальнейшем они будут нумероваться как [1,(...)], где под многоточием подразумевается номер формулы в [1].

Тензор электропроводности вычисляется, как и в [1], в технике температурных функций Грина и аналитического продолжения в область реальных частот для линейного отклика системы [6,7]. Исходным является выражение для тензора электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}$ $(j_\alpha = \sigma_{\alpha\beta}E_\beta)$, аналогичное [1,(60)–(62)], через температурный коррелятор токов в координатном, точнее, зонно-узельном представлении, сопряженном зонно-квазиимпульсному представлению:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{R},\mathbf{R}';\omega) =$$

$$= -\frac{2}{i\omega}\left(\frac{e}{v_0}\right)^2 T\sum_{\omega_n} \mathrm{Sp}\,(\hat{v}_\alpha(\mathbf{R})G(\omega_+)\hat{v}_\beta(\mathbf{R}')G(\omega_-))\big|_{i\nu_{n0}\to\omega+i0}\,, \quad (1)$$

$$\omega_n = \pi T(2n+1)\,,\quad \omega_+ = \omega_n\,,\quad \omega_- = \omega_n - \nu_{n0}\,,$$

$$\nu_{n0} = 2\pi T n_0 \quad (k_B = 1\,,\ \hbar = 1)\,,$$

где $\mathbf{R}$ — координаты узлов решетки, v_0 — объем элементарной ячейки кристалла, $\hat{v}_\alpha(\mathbf{R})$ — оператор скорости.

В отличие от [1,(60)–(62)] в формуле (1) учтен ряд упрощающих обстоятельств. Коэффициент 2 учитывает состояния с изотопическим спином $\sigma_z = -1$ в пространстве «электрон—дырка» (в нормальном состоянии — удвоение за счет спина). Опущен так называемый «диамагнитный» вклад в ток, который автоматически исчезает при том порядке вычисления шпура и суммирования по дискретным частотам ω_n, который принят в [1]. Более существенное замечание касается усреднения по примесям тензорного произведения функций Грина $(G \times G)_{\text{average}}$, которое сводится к суммированию «лестничных» диаграмм теории возмущений (см. [1]). В случае нормального скин- эффекта это среднее распадается на произведение средних $(G \times G)_{\text{average}} = G_{\text{average}} \times G_{\text{average}}$. Можно показать, что этот результат сохраняется при наличии постоянного магнитного поля в квазиклассическом приближении и в выражении (1) подразумеваются усредненные функции Грина. При этом, так как в узкой зоне скорости электронов равны нулю, G фактически означает диагональный элемент матрицы $G_{jj'}$ по зонному индексу, описывающий подвижные электроны в широкой зоне.

Эти функции вычислялись в работе [1] (формулы (20)*, (24)–(26), (64)). В отличие от этих формул в данном случае необходимо учитывать, что спектральное разложение функций Грина осуществляется не по квазиимпульсу и плоским вол-

* В формулах [1,(20)] допущена описка: в выражении для g_0^{-1} утеряно слагаемое $-i\omega_n\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$.

нам, описывающим свободное движение электронов, а по квантовым числам спектра Ландау и по соответствующим квазиклассическим волновым функциям для электронов в магнитном поле. Нетрудно, однако, видеть, что при выполнении существенных для дальнейшего неравенств

$$\omega_H << T_c << \frac{1}{\tau} << \varepsilon_F \qquad (2)$$

(τ — время свободного пробега электронов, $\varepsilon_F = p_F^2/2m = mv_F^2/2$ — энергия Ферми, порядка ширины зоны подвижных электронов) схема [1] усреднения функций Грина по примесям и общая структура выражений для усредненных функций Грина остается прежней. При этом термодинамические параметры модели (критическая температура T_c [1,(57)], параметр гибридизации d [1,(30)] ветвей спектра, энергия локального уровня ξ_0 [1,(37)]) сохраняют свое значение и, что особенно важно практически, сохраняются аналитические формулы для массовых операторов $M(\omega_n)$, $L(\omega_n)$ как функций дискретной частоты ω_n. Отмеченное обстоятельство является почти очевидным. Ввиду локальности потенциала рассеяния на примесях и неравенств $l = v_F\tau << r_H = v_F/\omega_H$ (l — длина свободного пробега, r_H — ларморовский радиус орбиты электрона в магнитном поле) в квазиклассическом приближении электроны в промежутках между столкновениями с примесями движутся почти как свободные.

Таким образом, в настоящей статье задача формально заключается в том, чтобы учесть влияние спектра Ландау на кинетическую характеристику — тензор электропроводности. Согласно конструкции Ванье [8], в сглаженном на атомных расстояниях магнитном поле $\mathbf{H} = \mathrm{rot}\,\mathbf{A}$ оператор кинетической энергии подвижных электронов представляется в виде

$$H_0(\mathbf{R},\mathbf{R}') = \frac{1}{N_0}\sum_{\mathbf{p}} \xi\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\left(\frac{\mathbf{R}+\mathbf{R}'}{2}\right)\right)\exp[i\mathbf{p}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')] \,, \qquad (3)$$

где N_0 — число узлов решетки, $\xi(\mathbf{p})$ — кинетическая энергия свободных электронов, отсчитанная от химпотенциала $\mu \approx \varepsilon_F$, периодическая функция квазиимпульса $\mathbf{p}$. Суммирование по квазиимпульсу в (3) и всюду в дальнейшем выполняется по неэквивалентным состояниям, т.е. в пределах ячейки обратной решетки. Соответствующие операторы скоростей $\hat{v}_\alpha(\mathbf{R})$ выглядят так:

$$\hat{v}_\alpha(\mathbf{R})(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2) = \delta_{\mathbf{R},(\mathbf{R}_1+\mathbf{R}_2)/2} \times$$
$$\times \frac{1}{N_0}\sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial}{\partial p_\alpha}\xi\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{R})\right)\exp\,[i\mathbf{p}(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)]. \qquad (4)$$

Имея в виду качественный характер модели, чтобы оттенить влияние магнитного поля на тензор электропроводности, пренебрежем орторомбической анизотропией кристаллов Y–Ba–Cu–O с осями a, b, c (соответственно x, y, z) и, более того, для упрощения последующих расчетов примем, что в пределах симметричной ($\xi(\mathbf{p}) = \xi(-\mathbf{p})$) ячейки обратной решетки $\xi(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m - \varepsilon_F$. Тогда для магнитного поля, направленного вдоль оси c (или z), в калибровке Ландау $\mathbf{H} = (0,0,H)$, $\mathbf{A} = (0,Hx,0)$ волновые функции, как нетрудно проверить, выглядят следующим образом:

$$\psi_{n,p_y,p_z}(\mathbf{R}) = \psi_{n,p_y}(x)\,\frac{\exp\,[i(p_y y + p_z z)]}{\sqrt{N_y N_z}} \qquad (5)$$

(N_y, N_z — число узлов решетки вдоль осей y, z) со спектром Ландау

$$\xi(n,p_z) = n\omega_H + \frac{p_z^2}{2m} - \varepsilon_F \,, \qquad (6)$$

$n > 0$ — целое число. Нормированные квазиклассические волновые функции $\psi_{n,p_y}(x)$ отличны от нуля в интервале между точками поворота на орбите и имеют вид

$$\psi_{n,p_y}(x) = \left(\frac{2a\omega_H}{\pi|v_x(x)|}\right)^{1/2} \times$$
$$\times \sin\int_{\frac{cp_y}{eH} - r_H(n)}^{x} p_x(x')\,dx'\;\theta\left(r_H^2(n) - \left(\frac{cp_y}{eH} - x\right)^2\right), \qquad (7)$$

a — период решетки по оси x; cp_y/eH играет роль x-координаты центра круговой орбиты в плоскости (x,y); $r_H(n)$ — радиус орбиты:

$$p_x(x) = mv_x(x) = \frac{eH}{c}\left[r_H^2(n) - \left(\frac{cp_y}{eH} - x\right)^2\right]^{1/2} > 0 \,,$$
$$r_H(n) = \frac{c}{eH}\sqrt{2mn\,\omega_H} \,. \qquad (8)$$

В формуле (7) явно выделен носитель волновой функции $\psi_{n,p_y}(x)$, который с квазиклассической точностью, ввиду экспоненциально быстрого убывания волновой функции за точками поворота, сводится к сингулярной θ-функции.

Волновые функции (5),(7) удовлетворяют соотношениям полноты и ортогональности. Поэтому спектральное разложение полных функций Грина в выражении (1) с учетом межзонного взаимодействия в приближении самосогласованного поля [1] и рассеяния на примесях, ввиду сделанных выше замечаний, записывается следующим образом:

$$G(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2;\omega_\pm) = \sum_\lambda \psi_\lambda(\mathbf{R}_1) G_\lambda(\omega_\pm)\psi^*_\lambda(\mathbf{R}_2) , \qquad (9)$$

$$\lambda = (n,p_y,p_z) ,$$

$$G_\lambda(\omega_\pm) = \left(n\omega_H + \frac{p_z^2}{2m} - \varepsilon_F - i\omega_\pm - L(\omega_\pm) \right)^{-1} , \qquad (10)$$

где функция $L(\omega_n)$ определяется формулами [1, (24), (25) и (64)].

По определению, шпур в выражении (1) представляется суммой

$$(\mathrm{Sp})_{\alpha\beta}(\mathbf{R},\mathbf{R}') = \frac{1}{N_0^2} \circ \sum \circ \left\{ v_\alpha \left(\mathbf{p}_1 - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{R}) \right) \delta_{\mathbf{R},(\mathbf{R}_1+\mathbf{R}_2)/2} \exp\left[i\mathbf{p}_1(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) \right] \psi_\lambda(\mathbf{R}_2) G_\lambda(\omega_+) \psi^*_\lambda(\mathbf{R}_3) \times \right.$$

$$\left. \times\, v_\beta \left(\mathbf{p}_2 - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{R}') \right) \delta_{\mathbf{R}',(\mathbf{R}_3+\mathbf{R}_4)/2} \exp\left[i\mathbf{p}_2(\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_4) \right] \psi_{\lambda'}(\mathbf{R}_4) G_{\lambda'}(\omega_-) \psi^*_{\lambda'}(\mathbf{R}_1) \right\} , \quad v_\alpha(\mathbf{p}) = \frac{\partial \xi(\mathbf{p})}{\partial p_\alpha} . \qquad (11)$$

Символом $\circ \sum \circ$ обозначено суммирование по всем переменным в выражении (11), кроме **R**, **R′** и $\omega_\pm$. Отметим, что ввиду трансляционной симметрии это выражение фактически зависит от разности $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$, и вычислять его фурье-образ надлежит согласно представлению

$$\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \exp\left[i\mathbf{q}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \right] (\ldots) .$$

В дальнейшем благодаря нормальному скин-эффекту $\mathbf{q} \to 0$.

Вычисление шпура по y- и z-переменным не составляет труда, так как, согласно формулам (5), (9), речь идет о вычислении сумм от произведения нормированных плоских волн. Значение этих сумм определяется соотношениями полноты и ортогональности:

$$\frac{1}{N_y} \sum_{p_y} \exp\left[ip_y(y_1 - y_2) \right] = \delta_{y_1,y_2} ,$$

$$\frac{1}{N_y} \sum_{y} \exp\left[iy(p_{1y} - p_{2y}) \right] = \delta_{p_{1y},p_{2y}}$$

и аналогично по переменной z. При этом из-за наличия δ-символов $\delta_{\mathbf{R},(\mathbf{R}_1+\mathbf{R}_2)/2}$, $\delta_{\mathbf{R}',(\mathbf{R}_3+\mathbf{R}_4)/2}$ в выражении (11) удобно сделать замену переменных

$$\frac{y_1+y_2}{2} = Y'_1 , \quad y_1 - y_2 = Y_1 , \quad \frac{y_3+y_4}{2} = Y'_3 ,$$

$$y_3 - y_4 = Y_3 , \quad \frac{z_1+z_2}{2} = Z'_1 , \quad z_1 - z_2 = Z_1 ,$$

$$\frac{z_3+z_4}{2} = Z'_3 , \quad z_3 - z_4 = Z_3$$

с якобианом перехода, равным по модулю единице. Вычисление искомых сумм по переменным y и z приводит к выражению

$$\delta_{p_{1y},(p_y+p'_y)/2}\, \delta_{p_{2y},(p_y+p'_y)/2}\, \delta_{p_{1z},(p_z+p'_z)/2}\, \delta_{p_{2z},(p_z+p'_z)/2} .$$

Выполняя затем замену переменных

$$\frac{p_y+p'_y}{2} = \mathcal{P}_y ; \quad p_y - p'_y = q_y ; \quad \frac{p_z+p'_z}{2} = \mathcal{P}_z ;$$

$$p_z - p'_z = q_z ; \quad p_y = \mathcal{P}_y + \frac{1}{2} q_y ; \quad p'_y = \mathcal{P}_y - \frac{1}{2} q_y ;$$

$$p_z = \mathcal{P}_z + \frac{1}{2} q_z ; \quad p'_z = \mathcal{P}_z - \frac{1}{2} q_z$$

и переходя в оставшихся суммах $\sum\limits_{\mathcal{P}_y} \sum\limits_{q_y} \sum\limits_{\mathcal{P}_z} \sum\limits_{q_z}$ к интегрированию

$$\sum_{\mathcal{P}_y}\sum_{q_y} \to \left(\frac{N_y a_y}{2\pi}\right)^2 \iint d\mathcal{P}_y dq_y \,,$$

$$\sum_{\mathcal{P}_z}\sum_{q_z} \to \left(\frac{N_z a_z}{2\pi}\right)^2 \iint d\mathcal{P}_z dq_z$$

(a_y , a_z — периоды решетки вдоль осей y, z), «снимем» интегрирование

$$\iint \frac{dq_y dq_z}{(2\pi)^2} \exp\,[iq_y(y-y') + iq_z(z-z')](\ldots) \,.$$

В пределе $(q_y,q_z) \to 0$ получим из (11) следующий результат $(\mathcal{P}_y,\mathcal{P}_z \to \;\equiv p_y,p_z)$:

$$(\mathrm{Sp})_{\alpha\beta}(x,x') = \left(\frac{a_y a_z}{N_x}\right)^2 \iint \frac{dp_y dp_z}{(2\pi)^2} \circ \sum \circ \left\{ v_\alpha \left(p_{1x}, p_y - \frac{eHx}{c}, p_z\right) \delta_{x,(x_1+x_2)/2} \times \right.$$
$$\times \exp\,[ip_{1x}(x_1-x_2)]\psi_{n,p_y}(x_2) G_{n,p_z}(\omega_+)\psi_{n,p_y}(x_3) v_\beta \left(p_{2x}, p_y - \frac{eHx'}{c}, p_z\right) \delta_{x',(x_3+x_4)/2} \times$$
$$\left. \times \exp\,[ip_{2x}(x_3-x_4)]\psi_{n',p_y}(x_4) G_{n',p_z}(\omega_-)\psi_{n',p_y}(x_1)\right\} . \qquad (12)$$

Вычисление шпура по x-переменным носит более сложный характер. Предварительно избавимся от δ-символов $\delta_{x,(x_1+x_2)/2}$, $\delta_{x',(x_3+x_4)/2}$ в (12), выполняя замену переменных:

$$\frac{x_1+x_2}{2} = X_1 \,, \quad x_1 - x_2 = X'_1 \,; \quad \frac{x_3+x_4}{2} = X_3 \,, \quad x_3 - x_4 = X'_3 \,.$$

В результате (12) после сдвига $p_y \to p_y + eHx'/c$ приобретет вид (см. (7), (8) для $\psi_{n,p_y}(x)$): $X = x - x'$

$$(\mathrm{Sp})_{\alpha\beta}(X) = \left(\frac{a_y a_z}{N_x}\right)^2 \left(\frac{2a\omega_H}{\pi}\right)^2 \sum_{n,k} \iint \frac{dp_y dp_z}{(2\pi)^2} \circ \sum \circ \left\{ \exp\,[ip_{4x}X'_1 + ip_{2x}X'_3] \times \right.$$
$$\left. \times \frac{\sin\alpha\,\sin\beta\,\sin\gamma\,\sin\delta}{\sqrt{|v_x^\alpha v_x^\beta v_x^\gamma v_x^\delta|}} \theta_\alpha\theta_\beta\theta_\gamma\theta_\delta v_\alpha\left(p_{1x}, p_y - \frac{eHX}{c}, p_z\right) v_\beta(p_{2x},p_y,p_z) G_{n,p_z}(\omega_+) G_{n-k,p_z}(\omega_-)\right\} , \qquad (13)$$

где для краткости введены обозначения интегралов:

$$\alpha = \frac{eH}{c}\int_{-r_H(n)}^{X - \frac{cp_y}{eH} - \frac{1}{2}X'_2} dx'' \sqrt{r_H^2(n) - x''^2} \,, \quad \beta = \frac{eH}{c}\int_{-r_H(n)}^{-\frac{cp_y}{eH} + \frac{1}{2}X'_3} dx'' \sqrt{r_H^2(n) - x''^2} \,,$$
$$\gamma = \frac{eH}{c}\int_{-r_H(n-k)}^{-\frac{cp_y}{eH} - \frac{1}{2}X'_3} dx'' \sqrt{r_H^2(n-k) - x''^2} \,, \quad \delta = \frac{eH}{c}\int_{-r_H(n-k)}^{X - \frac{cp_y}{eH} + \frac{1}{2}X'_1} dx'' \sqrt{r_H^2(n-k) - x''^2} \,. \qquad (14)$$

Остальные обозначения понятны из формулы (7).

В полученном выражении (13) необходимо в явном виде учесть квазиклассичность движения электронов, т.е. быстрые осцилляции $\psi_{n,p_y}(x)$ на длине $\lambda_F \sim 1/p_F << l << r_H$, а также большие значения квантового числа $n \sim \varepsilon_F/\omega_H$. Это достигается разложением интегралов (14) — аргументов синусов в выражении (7) — по переменным X'_1, X'_3 и $k = n - n'$ и выбором соответствующих комбинаций экспонент $e^{\pm i\alpha}e^{\pm i\beta}e^{\pm i\gamma}e^{\pm i\delta} \exp\,[i(p_{1x}X'_1 + p_{2x}X'_3)]$ в произведении волновых функций $\psi_{n,p_y}(x)$, таких, в которых быстрые осцилляции «погашаются» и которые в главном приближении по малым параметрам дают ненулевой вклад в выражение (13). Из формул (14) видно, что для этого необходимо взять комбинации $\alpha - \delta$ и $\beta - \gamma$, которые могут затем сочетаться с произвольными знаками.

Раскладывая интегралы (14) до линейных по X'_1, X'_3 и k членов, получаем

$$\alpha - \delta = -\mathcal{P}_1 X'_1 + kI_1 \ , \quad \beta - \delta = \mathcal{P}_2 X'_3 + kI_2 \ , \tag{15}$$

$$\mathcal{P}_1 = \frac{eH}{c}\left[r_H^2(n) - \left(X - \frac{cp_y}{eH}\right)^2\right]^{1/2} ,$$

$$\mathcal{P}_2 = \frac{eH}{c}\left[r_H^2(n) - \left(\frac{cp_y}{eH}\right)^2\right]^{1/2} , \tag{16}$$

$$I_1 = \int\limits_{-r_H(n)}^{X - \frac{cp_y}{eH}} \frac{dx''}{\sqrt{r_H^2(n) - x''^2}} \ , \quad I_2 = \int\limits_{-r_H(n)}^{-\frac{cp_y}{eH}} \frac{dx''}{\sqrt{r_H^2(n) - x''^2}} \ . \tag{17}$$

Суммирование экспонент в выражении (13) по переменным X'_1, X'_3 даст, как нетрудно видеть из формул (15)–(17), группу слагаемых:

$$\frac{N_x^2}{16}\left\{\delta_{p_{1x},\mathcal{P}_1}\delta_{p_{2x},-\mathcal{P}_2} \exp\left[ik(I_1 + I_2)\right] + \delta_{p_{1x},\mathcal{P}_1}\delta_{p_{2x},\mathcal{P}_2} \exp\left[ik(I_1 - I_2)\right] + \right.$$
$$\left. + \delta_{p_{1x},-\mathcal{P}_1}\delta_{p_{2x},-\mathcal{P}_2} \exp\left[-ik(I_1 - I_2)\right] + \delta_{p_{1x},-\mathcal{P}_1}\delta_{p_{2x},\mathcal{P}_2} \exp\left[-ik(I_1 + I_2)\right]\right\} . \tag{18}$$

Подставим эту группу слагаемых (18) в выражение (13) и выполним суммирование по p_{1x}, p_{2x}. Полученное выражение $(\mathrm{Sp})_{\alpha\beta}(X)$ необходимо подвергнуть преобразованию Фурье $\int dX\, e^{-iq_x X}(\ldots)$ по разности $x - x' = X$, устремляя затем $q_x \to 0$. Далее, поскольку характерные частоты $\omega_H \ll \varepsilon_F$, суммирование по квантовому числу n можно заменить интегрированием по переменной ξ (6): $\omega_H \sum\limits_n \to \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\xi$. При этом, так как интеграл по ξ сосредоточен в малой окрестности вблизи границы Ферми, значения p_z ограничены интервалом $-p_F < p_z < p_F$, и с той же точностью радиус орбиты (8) записывается в виде

$$r_H^2(p_z) = \left(\frac{c}{eH}\right)^2 (p_F^2 - p_z^2) \ . \tag{19}$$

Чтобы избавиться в формуле (13) от носителей $\theta(r_H^2(p_z) - (X - cp_y/eH)^2)\ \theta(r_H^2(p_z) - (cp_y/eH)^2)$ и выполнить интегрирование по переменным X, p_y и p_z, сделаем замену переменных, согласующуюся с классической динамикой электрона в магнитном поле:

$$X - \frac{cp_y}{eH} = r_H(p_z)\cos\varphi \ , \ \frac{cp_y}{eH} = r_H(p_z)\cos\varphi_0 \ ;$$

$$\frac{\partial(X, p_y)}{\partial(\varphi, \varphi_0)} = \begin{vmatrix} -r_H \sin\varphi \ , & -r_H \sin\varphi_0 \\ 0 \ , & -\dfrac{eH}{c} r_H \sin\varphi_0 \end{vmatrix} =$$

$$= \frac{eH}{c} r_H^2 \sin\varphi \sin\varphi_0 \ , \tag{20}$$

где φ и φ_0 — фазы, задающие положение электрона на орбите. Ввиду положительности величин $\mathcal{P}_1$, $\mathcal{P}_2$, I_1, I_2 (16), (17) интегрирование по фазам осуществляется по полупериоду $(-\pi, 0)$: $\int\limits_{-\pi}^{0}\int\limits_{-\pi}^{0} d\varphi d\varphi_0$ от «левой» точки поворота до «правой». Значения этих величин, согласно формулам (16),(17) и (20), равны

$$\mathcal{P}_1 = -\frac{eH}{c} r_H(p_z)\sin\varphi \ , \ \mathcal{P}_2 = -\frac{eH}{c} r_H(p_z)\sin\varphi_0 \ ,$$

$$I_1(\varphi) = \pi + \varphi \ , \quad I_2(\varphi) = -\varphi_0 \ . \tag{21}$$

Дальнейшее интегрирование по p_z и вычисление тригонометрических интегралов по фазам φ и φ_0 в выражении (13) выполняется элементарно. Удобно нормировать тензор $\sigma_{\alpha\beta}$ на проводимость

Друде–Лоренца $\sigma_0 = ne^2\tau/m$, $n = p_F^3/3\pi^2$ — плотность проводящих электронов. Учитывая формулы (19)–(21), получим для ненулевых компонент искомого тензора $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega)|_{\mathbf{q}\to 0}$ следующие выражения:

$$\frac{\sigma_{xx}}{\sigma_0} = \frac{\sigma_{yy}}{\sigma_0} = -\frac{1}{i\omega\tau}\times$$

$$\times T\sum_{\omega_n}\sum_k \frac{1}{2}(\delta_{k,1}+\delta_{k,-1})\int d\xi\; G_\xi(\omega_+)G_{\xi-k\omega_H}(\omega_-)|_{i\nu_{n0}\to\omega+i0}\,, \tag{22}$$

$$\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_0} = -\frac{\sigma_{yx}}{\sigma_0} = \frac{1}{i\omega\tau}\times$$

$$\times T\sum_{\omega_n}\sum_k \frac{1}{2i}(\delta_{k,1}-\delta_{k,-1})\int d\xi\; G_\xi(\omega_+)G_{\xi-k\omega_H}(\omega_-)|_{i\nu_{n0}\to\omega+i0}\,,$$

$$\sigma_{zz} = (\sigma_{xx} = \sigma_{yy})|_{\omega_H = 0}\,. \tag{23}$$

Компоненты σ_{xz}, σ_{yz}, σ_{zy} и σ_{zx} исчезают из-за нечетности подынтегральных выражений по p_z. Благодаря правилам отбора в суммах по целым числам k, фиксирующим переходы с орбиты на орбиту за счет столкновения с примесями, формулы (22), (23) удовлетворяют онсагеровским соотношениям симметрии по отношению к изменению знака магнитного поля. Компонента σ_{zz} равна проводимости в нулевом магнитном поле и в дальнейшем не представляет интереса.

Для выполнения требуемого в (22), (23) аналитического продолжения в верхнюю полуплоскость по реальной частоте ω: $i\nu_{n0}\to\omega + i0$ воспользуемся техническим приемом, указанным в [7], — представим функцию Грина $G(\omega_n)$ интегралом типа Коши:

$$G_\xi(\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi i}\,\frac{\chi(\varepsilon)}{\varepsilon - i\omega_n}\,,$$

$$\chi_\xi(\varepsilon) = G_\xi(\omega_n)|_{i\omega_n\to\varepsilon+i0} - G_\xi(\omega_n)|_{i\omega_n\to\varepsilon-i0} =$$

$$= (\xi - \varepsilon - L_+(\varepsilon))^{-1} - (\xi - \varepsilon - L_-(\varepsilon))^{-1}\,.$$

Значение суммы по дискретным частотам ω_n определяется известными разложениями гиперболического тангенса на простейшие дроби и равно

$$T\sum_{\omega_n}\frac{1}{(\varepsilon_+ - i\omega_n)(\varepsilon_- - i\omega_n + i\nu_{n0})} =$$

$$= -\frac{\frac{1}{2}\,[\mathrm{th}\,(\varepsilon_+/2T) - \mathrm{th}\,(\varepsilon_-/2T)]}{\varepsilon_+ - \varepsilon_- - i\nu_{n0}}\,;$$

$$\varepsilon_\pm = \varepsilon \pm \frac{\varepsilon'}{2}\,.$$

Таким образом, согласно формулам (22), (23), необходимо вычислить интеграл

$$\frac{1}{i\omega\tau}\int\!\!\int\frac{d\varepsilon d\varepsilon'}{(2\pi i)^2}\,\frac{\frac{1}{2}\,[\mathrm{th}\,(\varepsilon_+/2T) - \mathrm{th}\,(\varepsilon_-/2T)]}{\varepsilon' - \omega - i0}\times$$

$$\times\int d\xi\;\chi_\xi(\varepsilon_+)\chi_{\xi-k\omega_H}(\varepsilon_-)\,, \tag{24}$$

через который выражаются главные компоненты тензора электропроводности σ_{xx} (22) и σ_{xy} (23). В формуле (24) после интегрирования спектральных плотностей по переменной ξ

$$\int d\xi\;\chi_\xi(\varepsilon_+)\chi_{\xi-k\omega_H}(\varepsilon_-) =$$

$$= -2\pi i\Big[(\varepsilon' - k\omega_H + L_+(\varepsilon_+) - L_-(\varepsilon_-))^{-1} +$$

$$+ (-\varepsilon' + k\omega_H + L_+(\varepsilon_+) - L_-(\varepsilon_-))^{-1}\Big] \tag{25}$$

возникает быстросходящийся интеграл по переменной ε'. Поэтому, имея в виду предел $\omega\to 0$, можно разложить разность гиперболических тангенсов по ε' и, выполнив интегрирование по ε', положить $\omega = 0$:

$$-\frac{1}{i\tau}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{4T\,\mathrm{ch}^2\,(\varepsilon/2T)}\;\frac{1}{-k\omega_H + L_+(\varepsilon) - L_-(\varepsilon)}\,. \tag{26}$$

Разность $L_+(\varepsilon) - L_-(\varepsilon)$ имеет вид [1,(67)]

$$L_+(\varepsilon) - L_-(\varepsilon) = \frac{1}{\tau}\left(1 + \frac{\delta}{\xi_0 - \varepsilon}\right)^2, \tag{27}$$

где параметры модели определены в [1,(37), (57), (30), (67)]:

$$\xi_0 = T\,\ln\frac{1-k}{1+k}\,;\quad T_c \sim \lambda^2\varepsilon_F\,\frac{k}{\ln\dfrac{1+k}{1-k}}\,;$$

$$d \sim \lambda c u_{12}\,;\quad \delta = \frac{|d|^2 u_{22}}{u_{11}u_{22} - |u_{12}|^2}\,; \tag{28}$$

k — степень заполнения узкой зоны ($-1 < k < 1$), c — концентрация примесей, $u_{jj'}$ — матричные элементы потенциала рассеяния на примесях ($u < \varepsilon_F$), λ — малая константа межзонной связи. Эти величины удовлетворяют неравенствам

$$\lambda << 1 \,, \; \delta << d \,, \; \delta << \xi_0 \sim T_c \,, \qquad (29)$$

которые необходимо учитывать наряду с неравенствами (2).

Выделим в подынтегральном выражении (26) асимптотику при больших энергиях и резонансное слагаемое

$$\frac{1}{-k\omega_H + L_+(\varepsilon) - L_-(\varepsilon)} = \frac{1}{-k\omega_H + i/\tau} + \left(\frac{1}{-k\omega_H + L_+(\varepsilon) - L_-(\varepsilon)} - \frac{1}{-k\omega_H + i/\tau}\right). \qquad (30)$$

Как нетрудно видеть из формулы (27), резонансное слагаемое быстро сходится по энергиям и в нулевом магнитном поле $\omega_H = 0$ дает бесконечный вклад в тензор электропроводности при энергии $\varepsilon = \xi_0 + \delta$. Введем феноменологически лоренцеву ширину резонанса согласно правилу

$$\frac{1}{(\varepsilon - \xi_0 - \delta)^2} \to \frac{1}{(\varepsilon - \xi_0 - \delta)^2 + \nu_0^2} \,, \; \nu_0 << \delta \,.$$

Интегрируя в (26) по энергии и собирая вместе формулы (22)–(30), получаем окончательные выражения для компонент тензора электропроводности:

$$\frac{\sigma_{xx}}{\sigma_0} = \frac{\sigma_{yy}}{\sigma_0} = 1 + \frac{\pi(1-k^2)}{4T}\,\mathrm{Re}\,\frac{\delta^2}{\sqrt{\nu_0^2 - i\omega_H\tau\delta^2}} \,, \qquad (31)$$

$$\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_0} = -\frac{\sigma_{yx}}{\sigma_0} = \tau\omega_H + \frac{\pi(1-k^2)}{4T}\,\mathrm{Im}\,\frac{\delta^2}{\sqrt{\nu_0^2 - i\tau\omega_H\delta^2}} \,, \qquad (32)$$

$$\sqrt{1} = 1 \,.$$

Тензор удельного сопротивления: $\rho_{\alpha\beta} = (\sigma^{-1})_{\alpha\beta}$.

Пусть ток направлен по оси x: $j_x \equiv j$, $j_y = 0$, $E_x \equiv E$. Определяя удельное сопротивление и коэффициент Холла

$$\rho = \frac{E}{j} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \,; \quad R_H = \frac{E_y}{jH} = \frac{\sigma_{xy}}{[\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yx}^2]H} \,,$$

найдём для этих величин

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \left(1 + \frac{\varepsilon}{t}\,\mathrm{Re}\,\frac{1}{\sqrt{1-i\Omega}}\right) \times \left[\left(1 + \frac{\varepsilon}{t}\,\mathrm{Re}\,\frac{1}{\sqrt{1-i\Omega}}\right)^2 + \left(\tau\omega_H + \frac{\varepsilon}{t}\,\mathrm{Im}\,\frac{1}{\sqrt{1-i\Omega}}\right)^2\right]^{-1},$$

$$\rho = 1/\sigma_0 \,, \qquad (33)$$

$$\tau\omega_H \frac{R_H}{R_{H0}} = \left(\tau\omega_H + \frac{\varepsilon}{t}\,\mathrm{Im}\,\frac{1}{\sqrt{1-i\Omega}}\right) \times \left[\left(1 + \frac{\varepsilon}{t}\,\mathrm{Re}\,\frac{1}{\sqrt{1-i\Omega}}\right)^2 + \left(\tau\omega_H + \frac{\varepsilon}{t}\,\mathrm{Im}\,\frac{1}{\sqrt{1-i\Omega}}\right)^2\right]^{-1}, \qquad (34)$$

где $R_{H0} = 1/nec$ — классическая величина коэффициента Холла и введены безразмерные переменные

$$t = \frac{T}{T_c} \,, \quad \varepsilon = \frac{\pi(1-k^2)\delta^2}{4T_c\nu_0} >> 1 \,, \; \Omega = \tau\omega_H\left(\frac{\delta}{\nu_0}\right)^2 . \qquad (35)$$

Отметим полезную формулу для тангенса угла Холла, которая позволяет оценивать по экспериментальным данным параметр $\tau\omega_H$:

$$\frac{E_y}{E} = \frac{\tau\omega_H + \frac{\varepsilon}{t}\,\mathrm{Im}\,\frac{1}{\sqrt{1-i\Omega}}}{1 + \frac{\varepsilon}{t}\,\mathrm{Re}\,\frac{1}{\sqrt{1-i\Omega}}} \,.$$

Описываемые формулами (33), (34) зависимости сопротивления и коэффициента Холла от температуры и магнитного поля можно сопоставить с имеющимися экспериментальными данными (см. [9] и цитированную там литературу). При этом следует исключить из рассмотрения аномалии, наблюдающиеся в узкой флуктуационной окрестности критической температуры T_c сверхпроводящего перехода, которые не описываются приближением самосогласованного поля [1]. Разумные значения температуры лежат в интервале $1 < t < 3$. В этих экспериментах, к сожалению, отсутствует детальная информация о зависимости величин (33), (34) от магнитного поля. Измерялась их температурная зависимость при двух–трех значениях магнитного поля, включая нулевое поле.

Несложный анализ показывает, что сопротивление (33) в согласии с опытом монотонно ($\partial(\rho/\rho_0)/\partial t > 0$) возрастает с температурой практически линейно при не слишком больших температурах. Более интересно поведение коэффициента Холла, или так называемого холловского «сопротивления»: $\rho_{xy}/\rho_0 = \tau\omega_H R_H/R_{H0}$. Дифференцируя выражение (34) по температуре, можно установить, что эта величина достигает максимума в точке

$$t_0 = \varepsilon I \, \frac{\sqrt{1+(I/R)^2}}{1+\sqrt{1+(I/R)^2}} \left(\frac{I/R}{1+\sqrt{1+(I/R)^2}} - \tau\omega_H \right)^{-1}, \quad (R,I) \equiv (\mathrm{Re},\mathrm{Im}) \, \frac{1}{\sqrt{1-i\Omega}}, \tag{36}$$

$$\Omega << 1: \quad t_0 \approx \varepsilon, \qquad \max\left(\frac{\rho_{xy}}{\rho_0}\right) \approx \frac{\Omega}{8};$$
$$\Omega >> 1: \quad t_0 \approx \frac{\varepsilon}{\sqrt{\Omega}}, \quad \max\left(\frac{\rho_{xy}}{\rho_0}\right) \approx \frac{1}{2(1+\sqrt{2})} \tag{37}$$

(см. рис. 1, на котором приведены результаты численных расчетов по формуле (34)). Из условия $t_0 > 1$ и формул (37) вытекает ограничение на величину магнитного поля $\Omega < \varepsilon^2$. Теоретические оценки порядков величин для параметров модели, согласующиеся с неравенствами (2), (29), позволяют отсюда оценить характерные для рассматриваемой теории магнитные поля $H \sim 10^3$–10^4 Э. Именно при этих значениях магнитного поля выполнялись измерения температурных зависимостей электросопротивления и коэффициента Холла [9].

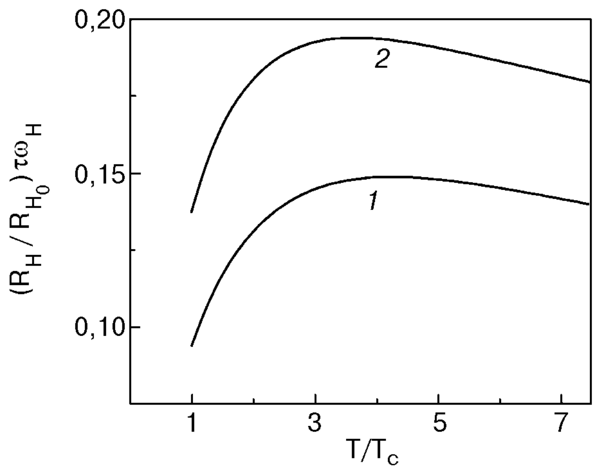

Рис. 1. Зависимость холловского сопротивления от температуры: $\tau\omega_H = 0{,}05$ (*1*), $\tau\omega_H = 0{,}1$ (*2*). $\delta/\nu_0 = 6$, $\varepsilon = 5$.

Из выражения (36), (37) и рис. 1 видно, что при малых полях максимум уменьшается по высоте и смещается в область высоких температур за пределы применимости теории, в то время как при больших полях он достигает экспериментально наблюдаемых значений при небольших температурах. Эти зависимости согласуются с экспериментами [10].

Таким образом, модель [1] правильно передает основные черты поведения двух различных электронных орбитальных эффектов в ВТСП металлооксидах в нормальном состоянии — электросопротивления на переменном токе и эффекта Холла.

Авторы благодарны Е. В. Безуглому за плодотворные обсуждения и помощь в оформлении работы.

1. В. П. Галайко, *ФНТ* **19**, 123 (1993).
2. В. П. Галайко, *ФНТ* **13**, 1102 (1987).
3. В. П. Галайко, Е. В. Безуглый, В. С. Шумейко, *ФНТ* **13**, 1301 (1987).
4. В. М. Дмитриев, М. Н. Офицеров, Н. Н. Пренцлау, *ФНТ* **16**, 387 (1990).
5. В. П. Галайко, В. М. Дмитриев, М. Н. Офицеров, Н. Н. Пренцлау, *ФНТ* **19**, 135 (1993).
6. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).
7. Л. Каданов, Г. Бейм, *Квантовая статистическая механика. Методы функций Грина в теории равновесных и неравновесных процессов*, Мир, Москва (1964).
8. G. H. Wannier, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 645 (1962).
9. A. L. Solovjov, *Low Temp. Phys.* **24**, 161 (1998).
10. А. Л. Соловьев, *частное сообщение*.

Galvano-magnetic effects in the normal state of high-T_c metal oxides in the two band model of superconductors with a narrow band (level) near the Fermi boundary

V. P. Galaiko and E. N. Bratus’

The investigation [1] of electron orbital effects in high-T_c samples (Y–Ba–Cu–O) in the normal state are continued with dc galvanomagnetic effects. The electric conductivity tensor, electric resistance and Hall coefficient are calculated. The results qualitatively agree with experiment.