

Температурное поведение электросопротивления двумерного допированного антиферромагнетика в зависимости от спиновой восприимчивости

А. М. Белемук, А. Ф. Барабанов¹⁾

Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, 142190 Троицк, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 9 ноября 2005 г.

Исследована температурная зависимость электросопротивления $\rho(T)$ в двумерном допированном антиферромагнетике для различных форм динамической спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ – с учетом затухания и перенормировки спектра магнитных возбуждений, и для так называемых сильно затухающих магнонов. Кинетическое уравнение строится на основе спин-фермионной модели рассеяния носителей на спиновых флуктуациях. Сильно зависящая от температуры анизотропия рассеяния носителей учитывается с помощью семимоментного приближения для неравновесной функции распределения. Показано, что расчет электросопротивления на основе самосогласованного выражения для $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ с затуханием качественно воспроизводит экспериментальное аномальное поведение $\rho(T)$ в высокотемпературных сверхпроводниках. При этом широко используемое для $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ приближение “сильно затухающих магнонов” в области высоких температур является некорректным.

PACS: 71.38.+i, 74.20.Mn, 75.30.Mb, 75.50.Ee

Известно, что транспортные свойства нормального состояния высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) обладают аномальной температурной зависимостью [1–3]. Так электросопротивление демонстрирует линейную зависимость $\rho = \rho_0 + AT$ в различных ВТСП материалах для разных режимов допирования. Обнаружены также различные отклонения от линейности [4], которые связывают с особыми изменениями в строении спектра возбуждений при изменении допирования (например, открытие псевдощели на поверхности Ферми) [2, 5–8]. Величина коэффициента Холла R_H имеет сильную температурную зависимость и при высоких температурах ведет себя приблизительно пропорционально $1/T$. Котангенс угла Холла $\text{ctg}\theta_H = \rho/R_H B$ имеет квадратичную температурную зависимость $\text{ctg}\theta_H = \alpha T^2 + C$, где постоянная C обусловлена вкладом рассеяния на примесях [2].

Большинство теоретических моделей, привлекаемых для объяснения этих свойств, носит феноменологический характер и связано с параметризацией либо времени релаксации носителей $\tau_{\mathbf{k}}$, либо оператора рассеяния. Так, в работах [9, 10] рассмотрение ведется на основе уравнения Больцмана в приближении времени релаксации, которое предполагается сильно анизотропным на различных участках поверхности Ферми (ФП), и благодаря этому возникает понятие

о “холодных” и “горячих точках” на ФП. При этом феноменологическим образом вводится температурная зависимость $\tau_{\mathbf{k}}(T)$. В работе [11] производилась параметризация матрицы рассеяния с разбиением зоны Бриллюэна и ФП на “холодные” и “горячие участки” (cold and hot patches). Здесь температурная зависимость постулировалась для амплитуд рассеяния носителей между различными участками в матрице рассеяния $C_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. В результате получающаяся скорость релаксации $1/\tau_{\mathbf{k}} \equiv \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ помимо сильной зависимости от \mathbf{k} (анизотропия рассеяния), имеет при низких температурах везде нефермижидкостное поведение, а именно, $\tau_{\mathbf{k}} \sim T$ в холодных участках и $\tau_{\mathbf{k}} \sim \text{const}$ в горячих участках. Среди моделей по исследованию транспортных свойств, постулирующих нефермижидкостной характер квазичастиц, отметим рассмотрение в рамках маргинальной ферми-жидкости [12] и модель с двумя независимыми временами релаксации для холловского и электрического токов [13].

Одной из возможных микроскопических причин, приводящих к аномальному поведению $\tau_{\mathbf{k}}$, является рассеяние носителей на антиферромагнитных (АФМ) спиновых флуктуациях. Известно, что допированные плоскости CuO_2 , которые являются определяющими для свойств ВТСП, имеют значительные АФМ корреляции спинов ионов меди и хорошо описываются в рамках двумерного допированного антиферромагнетика. Эксперименты по неупругому рассеянию нейт-

¹⁾e-mail: abarab@ns.hppi.troitsk.ru

ронов [14] ясно демонстрируют, что для металлического состояния ВТСП в режиме промежуточного допирования (underdoped) $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ имеет пик на АФМ волновом векторе $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Спектральная функция $\chi''(\mathbf{q}, \omega) = \text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)$ сильно зависит от степени допирования и температуры. С увеличением допирования спектральный вес флуктуаций падает, ширина пика δ_m растет и спектр спиновых флуктуаций принимает форму широкого континуума, характерного для некоррелированных металлов. Магнитная корреляционная длина ξ_m , определяемая в экспериментах по полуширине пика спектральной функции χ'' ($1/\xi_m = \delta_m/2$), при допировании, близком к оптимальному, составляет $\xi_m \sim (1 \div 2)a$ (a – постоянная решетки) и почти не зависит от температуры.

Для описания АФМ флуктуаций при допировании, близком к оптимальному, когда наблюдается значительное затухание спин-волновых возбуждений ($\gamma \gtrsim \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}$, γ – затухание, $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}$ – характерная частота магнона), обычно принимают форму $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ – так называемую восприимчивость для сильно затухающих магнонов $\chi_{so}(\mathbf{q}, \omega)$ [15–17] (strongly overdamped magnons):

$$\chi_{so}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{B_{\mathbf{q}}}{\Omega_{\mathbf{q}} - i\omega}. \quad (1)$$

Расчеты $\rho(T)$ на основе (1) были проведены в работах [15, 16]. Функция $\Omega_{\mathbf{q}}(T)$ феноменологическим образом выбиралась в виде $\Omega_{\mathbf{q}} = T^* + \alpha T + \omega_D \psi_{\mathbf{q}}$ с температурно не зависящими параметрами T^* , α , ω_D , а величина $B_{\mathbf{q}}$ рассматривалась как константа. Функцию $\psi_{\mathbf{q}}$ представляют как $\psi_{\mathbf{q}} = 2 + \cos(q_x a) + \cos(q_y a)$ или $\psi_{\mathbf{q}} = (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2/2$. Значения параметров T^* , α и ω_D обычно выбирают из условия близости температурной зависимости сопротивления $\rho_{so}(T)$ к экспериментальному. Отметим, что даже в предположении постоянного значения затухания γ функция $\Omega_{\mathbf{q}}$ нетривиально связана со спектром спиновых флуктуаций $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}$ соотношением $\Omega_{\mathbf{q}} = \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2/\gamma$. Это не позволяет отождествлять величины $\Omega_{\mathbf{q}}$ и $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}$.

В модели “почти антиферромагнитной” фермижидкости вводится эффективное взаимодействие электронов со спиновыми флуктуациями, описываемыми динамической спиновой восприимчивостью $\chi_{af}(\mathbf{q}, \omega)$, форма которой определяется из подгонки к данным экспериментов по ЯМР-релаксации [18]:

$$\chi_{af}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_Q}{1 + \xi^2(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 - i\omega/\omega_{sf}}, \quad (2)$$

где ξ – корреляционная длина, ω_{sf} – характерный масштаб энергий спиновых флуктуаций. Корреляционная длина ξ в допированных ВТСП-системах

обычно не велика и составляет $2a < \xi < 8a$ [19]. Для величины ω_{sf} по данным ЯМР экспериментам в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ используют подгонку $\omega_{sf} = [6 + 0.06T(K)]$ мэВ [18, 19]. Поскольку восприимчивость имеет пики на волновых векторах \mathbf{Q} , то естественно возникают “горячие” квазичастицы, которые сильно рассеиваются на вектор \mathbf{Q} , и “холодные” квазичастицы, рассеяние которых достаточно слабое. Восприимчивость χ_{af} по сути является разложением χ_{so} в окрестности вектора $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ с $\omega_{sf} = \Omega_{\mathbf{Q}}$ и $\chi_Q = B_{\mathbf{Q}}/\Omega_{\mathbf{Q}}$.

Вид восприимчивости в форме (1) или (2) нельзя признать удовлетворительным, поскольку такая зависимость правильно описывает спиновую динамику только в окрестности вектора \mathbf{Q} в области малых ω , а также не удовлетворяет общему правилу сумм для $\chi(\mathbf{q}, \omega)$. Отметим, что реальный спектр спиновых флуктуаций остается “спрятанным” в феноменологические параметры $\Omega_{\mathbf{q}}$ или ω_{sf} .

Цель настоящей работы – исследовать поведение $\rho(T)$ с более реалистичским (микроскопическим) видом $\chi(\mathbf{q}, \omega)$, в частности, удовлетворяющим правилу сумм. Вид $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ является определяющим для кинетики носителей.

Спиновую подсистему, представляющую собой двумерный $S = 1/2$ фрустрированный гейзенберговский антиферромагнетик на квадратной решетке, мы трактуем в самосогласованном сферически-симметричном приближении. В частности, это означает отсутствие подрешеток, наличие трех вырожденных ветвей триплетных спиновых возбуждений со среднеполевым спектром $\omega_{\mathbf{q}}$, параметры которого (включая щель $\Delta(T) \equiv \omega_{\mathbf{Q}}(T)$ на АФМ векторе $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$) вычисляются самосогласованно при каждой температуре с учетом выполнения правила сумм $\langle S_{\mathbf{R}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}}^{\alpha} \rangle = 3/4$ [20]. Обменный гамильтониан \hat{I} , ответственный за АФМ взаимодействие между спинами, имеет вид

$$\hat{I} = \frac{1}{2} I_1 \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{g}} S_{\mathbf{R}+\mathbf{g}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}}^{\alpha} + \frac{1}{2} I_2 \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}} S_{\mathbf{R}+\mathbf{d}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}}^{\alpha},$$

где \mathbf{g} и \mathbf{d} – векторы первых и вторых ближайших соседей, p ($0 \leq p \leq 1$) – параметр фрустрации, $I_1 = (1-p)I$ и $I_2 = pI$ константы обменного взаимодействия для первых и вторых ближайших соседей.

Используя метод неприводимых функций Грина [21] или метод функций памяти [22], можно показать, что спиновую восприимчивость можно представить в виде

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle S_{\mathbf{q}}^{\alpha} | S_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{-A_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - R(\mathbf{q}, \omega)},$$

$$S_{\mathbf{q}}^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}}^{\alpha},$$
(3)

где $\omega_{\mathbf{q}}$ – спектр спиновых возбуждений в приближении среднего поля, $R(\mathbf{q}, \omega)$ – фурье-компонента некоторой новой комплексной функции, имеющей такие же аналитические свойства, что и $\chi(\mathbf{q}, \omega)$. Функция $R(\mathbf{q}, \omega) = R'(\mathbf{q}, \omega) + iR''(\mathbf{q}, \omega)$ отвечает трехузельной неприводимой запаздывающей функции Грина $R(\mathbf{q}, \omega) = \langle\langle \delta b_{\mathbf{q}}^{(3)} | \delta b_{\mathbf{q}}^{(3)\dagger} \rangle\rangle_{\omega}^{\text{irred}}$:

$$\delta b_{\mathbf{q}}^{(3)} = \frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{R}, \mathbf{g}, \mathbf{g}' \\ \mathbf{g} \neq \mathbf{g}'}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} (-\delta(S_{\mathbf{R}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}+\mathbf{g}}^{\alpha}) S_{\mathbf{R}+\mathbf{g}'}^z +$$

$$+\delta(S_{\mathbf{R}+\mathbf{g}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}+\mathbf{g}'}^{\alpha}) S_{\mathbf{R}}^z - \delta(S_{\mathbf{R}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}+\mathbf{g}-\mathbf{g}'}^{\alpha}) S_{\mathbf{R}+\mathbf{g}}^z +$$

$$+\delta(S_{\mathbf{R}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}+\mathbf{g}}^{\alpha}) S_{\mathbf{R}+\mathbf{g}-\mathbf{g}'}^z),$$

где $\delta(S_{\mathbf{R}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}'}^{\alpha}) = S_{\mathbf{R}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}'}^{\alpha} - \langle S_{\mathbf{R}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}'}^{\alpha} \rangle$ и описывает распад спиновой волны на три спиновые волны или эффективный распад спинового возбуждения на электронное и дырочное. Поскольку $R^*(\mathbf{q}, \omega) = R(\mathbf{q}, -\omega)$, то функции $R'(\mathbf{q}, \omega)$ и $R''(\mathbf{q}, \omega)$ являются соответственно четной и нечетной относительно переменной ω , и их можно представить в виде

$$R'(\mathbf{q}, \omega) = R'(\mathbf{q}, 0) + \alpha_{\mathbf{q}, \omega} \omega^2, \quad R''(\mathbf{q}, \omega) = -\omega \gamma_{\mathbf{q}, \omega}.$$

Ниже мы пренебрегаем частотной зависимостью α и затухания γ , тогда восприимчивость принимает вид

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar^2} \frac{-A_{\mathbf{q}}}{\omega^2(1 - \alpha_{\mathbf{q}}) - \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2 + i\omega\gamma_{\mathbf{q}}},$$

$$\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2 = \omega_{\mathbf{q}}^2 + R'(\mathbf{q}, 0).$$
(4)

При $\alpha_{\mathbf{q}} \ll 1$ в системе распространяются спиновые волны с частотой $\omega_{\mathbf{q}}^* = \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}/(1 - \alpha_{\mathbf{q}})^{1/2}$ и затуханием $\gamma_{\mathbf{q}}^* = \gamma_{\mathbf{q}}/(1 - \alpha_{\mathbf{q}})$. Параметры $R'(\mathbf{q}, 0)$ и $(1 - \alpha_{\mathbf{q}})$ задают перенормировку спектра спиновых волн. При $\alpha_{\mathbf{q}} \rightarrow 1$ величина затухания $\gamma_{\mathbf{q}}^*$ становится больше $\omega_{\mathbf{q}}^*$ и понятие о спиновых волнах с определенной частотой теряет смысл. Этому предельному случаю отвечает приближение сильнозатухающих магнонов, описывающихся с помощью восприимчивости (1) с $B_{\mathbf{q}} = A_{\mathbf{q}}/\hbar^2 \gamma_{\mathbf{q}}$ и $\Omega_{\mathbf{q}} = \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2/\gamma_{\mathbf{q}}$.

Наше рассмотрение $\rho(T)$ будет проводиться на основе восприимчивости (4). Расчет функций $A_{\mathbf{q}}$ и $\omega_{\mathbf{q}}$ производился в приближении среднего поля (в котором пренебрегается функцией $R(\mathbf{q}, \omega)$) с использованием самосогласованной процедуры решения соответствующей системы уравнений при каждом значении температуры [20]. Среднеполевой спектр $\omega_{\mathbf{q}}$

и числитель $A_{\mathbf{q}}$ зависят от параметра фрустрации p и конечного числа спин-спиновых корреляционных функций $C_r = \langle S_{\mathbf{R}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}+\mathbf{r}}^{\alpha} \rangle$ и имеют вид

$$A_{\mathbf{q}} = -8 (I_1(1 - \gamma_g(\mathbf{q}))C_g + I_2(1 - \gamma_d(\mathbf{q}))C_d),$$

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = \frac{8}{3} I^2 ((1 - \gamma_g)b_1 + (1 - \gamma_d^2)b_2 +$$
(5)

$$+(1 - \gamma_d)b_3 + (1 - \gamma_d^2)b_4 + \gamma_g(1 - \gamma_d)b_5),$$

где

$$\gamma_g(\mathbf{k}) = (\cos(k_x a) + \cos(k_y a))/2,$$

$$\gamma_d(\mathbf{k}) = \cos(k_x a) \cos(k_y a).$$

Параметры спектра b_i зависят от температуры через $C_g, C_{2g}, C_d, C_{|g+d|}, C_{2d}$. Функции $A_{\mathbf{q}}$ и $\omega_{\mathbf{q}}$ стремятся к нулю при $\mathbf{q} \rightarrow 0$. В пределе $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}$ числитель $A_{\mathbf{q}}$ стремится к положительной константе $A_{\mathbf{Q}}$, а спектр спиновых волн $\omega_{\mathbf{q}}^2 \approx \Delta^2 + c^2(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2$ отделен от нуля щелью $\Delta \equiv \omega_{\mathbf{Q}}$, которая возрастает с возрастанием температуры. При $T \rightarrow 0$ величина щели стремится к конечному пределу, который определяется параметром фрустрации p . Спектр $\omega_{\mathbf{q}}$ при $T = 0.3I$ для параметров $p = 0.1, I = 0.1$ эВ приведен на рис.1 (штриховая линия). Общепринято, что величина p

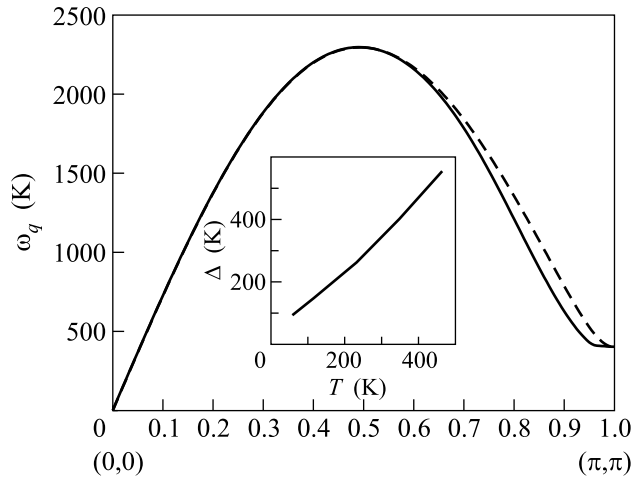


Рис.1. Самосогласованный спиновый спектр $\omega_{\mathbf{q}}$ (штриховая линия), вычисленный в приближении среднего поля, и перенормированный спектр $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{q}} + \delta\omega_{\mathbf{q}}$ (сплошная линия) вдоль направления $\Gamma(0, 0) \rightarrow M(\pi, \pi)$ при $T = 0.3I$ для параметров $\gamma = 0.5I, p = 0.1, I = 0.1$ эВ. На вставке – температурная зависимость спиновой щели $\Delta(T)$ для тех же энергетических параметров

растет с увеличением допирования n_h . Имея в виду, что мы будем рассматривать случай допирования, близкого к оптимальному ($n_h \approx 0.15$), мы выбираем $p = 0.1$ [23]. Отметим, что спин-спиновая корреляционная функция $C_{\mathbf{q}} = \langle S_{-\mathbf{q}}^{\alpha} S_{\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle$ имеет резкий пик

при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$, что приводит к сильной зависимости рассеяния носителей от резонансной структуры спектра спиновых флуктуаций.

Простейший способ построить реалистичную восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ вида (4) заключается в учете затухания, которое будем считать постоянным, $\gamma_{\mathbf{q}} = \gamma$, и не зависящим от температуры. Недавние аналитические и численные расчеты $\gamma(\mathbf{q}, \omega)$ в рамках $t - J$ модели [22, 25] дают аргументы в пользу такого приближения. Параметр $\alpha_{\mathbf{q}}$ будем предполагать постоянным, $\alpha_{\mathbf{q}} = \alpha$, и рассматривать два предельных случая: $\alpha = 0$ и $\alpha = 1$ (приближение сильно затухающих магнонов). В действительности реализуется некоторый промежуточный случай.

Перенормированный спектр спиновых волн $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}$ будем определять из условия выполнения правила сумм для спиновой восприимчивости (4) уже с учетом затухания:

$$C_0 = \langle S_{\mathbf{R}}^{\alpha} S_{\mathbf{R}}^{\alpha} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\hbar}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} n_B(\hbar\omega) \chi''(\mathbf{q}, \omega) d\omega = \frac{3}{4}. \quad (6)$$

При этом постулируем для $\delta\omega_{\mathbf{q}}(T, \gamma) = R'(\mathbf{q}, 0)$ функциональный вид, который сохраняет среднеполевую щель $\Delta(T) = \omega_{\mathbf{Q}}(T)$:

$$\delta\omega_{\mathbf{q}}(T, \gamma) \sim \eta(T, \gamma) \bar{q}, \quad \bar{q} = |\mathbf{q} - \mathbf{Q}|, \quad (7)$$

и отражает структуру строения спектра при промежуточных \mathbf{q} , при которых $\omega_{\mathbf{q}}$ линейно по q . Таким образом в задаче остается один свободный параметр $\eta(T, \gamma)$ (зависимость от T входит через $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}(T, \gamma)$), который находится из условия выполнения правила сумм (6). Перенормированный спектр $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}$ при $T = 0.3I$ для параметров $\gamma = 0.5I$, $p = 0.1$, $I = 0.1$ эВ приведен на рис.1 (сплошная линия).

Наш анализ проблемы $\rho(T)$ в двумерном допированном антиферромагнетике (2D АФМ) будет проводиться на основе спин-фермионной модели с рассеянием носителей на спиновых флуктуациях. При нахождении кинетических коэффициентов мы используем многомоментный метод решения кинетического уравнения, который является альтернативным “многогрупповой” модели [11] (“multi-patch” model).

При построении кинетического уравнения мы исходим из гамильтониана спин-фермионной модели

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad \hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} + J \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \gamma_1, \gamma_2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \gamma_1}^{\dagger} S_{\mathbf{q}}^{\alpha} \hat{\sigma}_{\gamma_1 \gamma_2}^{\alpha} a_{\mathbf{k}, \gamma_2}, \quad (8)$$

где $\hat{\sigma}^{\alpha}$ – матрицы Паули. Взаимодействие \hat{H}_1 носителей (с зарядом e) с внешним однородным электрическим полем \mathbf{E} (параллельным плоскости CuO_2) вводится через оператор поляризации носителей:

$$\hat{H}_1 = -\hat{P}^{\alpha} E^{\alpha}, \quad \hat{P}^{\alpha} = e \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma} \langle \mathbf{k} | \hat{x}^{\alpha} | \mathbf{k}' \rangle a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'\sigma}.$$

Наряду со спиновой восприимчивостью спектр $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ является определяющим для кинетики. Известно, что зарядовая динамика носителей в плоскостях CuO_2 хорошо описывается трехзонной моделью Эмери [26–28]. Расчет спектра элементарных возбуждений на основе спинового полярона приводит в широкой области допирования к спектру, наблюдаемому в экспериментах по фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES) [23]. Так, например, в недопированном режиме наблюдается остаточная ФП, при увеличении допирования происходит открытие псевдощели на ФП, а в режиме оптимального допирования наблюдается большая ФП с центром в (π, π) .

Спектр носителей (дырок) $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ берется из расчета нижней спин-поляронной зоны [23, 24]. Аналитический вид можно аппроксимировать с помощью гармоник квадратной симметрии:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \tau(a_1 \gamma_g(\mathbf{k}) + a_2 \gamma_g^2(\mathbf{k}) + a_3 \gamma_d(\mathbf{k}) + a_4 \gamma_d^2(\mathbf{k}) + a_5 \gamma_g(\mathbf{k}) \gamma_d(\mathbf{k})). \quad (9)$$

Для коэффициентов приняты значения $\tau = 0.2$ эВ, $a_1 = 1.5$, $a_2 = 3.0$, $a_3 = -1.25$, $a_4 = 0.0$, $a_5 = 0.1$.

Отметим, что в большинстве исследований спектр выбирается на основании параметризации ФП, даваемой ARPES измерениями.

Ниже, чтобы учесть анизотропию рассеяния, которая в нашем случае возникает из-за сильного рассеяния на вектор \mathbf{Q} , используется многомоментный подход решения уравнения движения матрицы плотности, разработанный для описания низкотемпературного поведения электросопротивления и коэффициента Холла в поливалентных металлах при рассеянии на фононах [29, 30], когда из-за процессов переброса возрастает анизотропия рассеяния.

В стационарном случае отклонение от равновесия можно задавать, используя матрицу плотности. Наиболее общий вид этой матрицы $\hat{\rho}^0 = \hat{\rho}^{00}(1 + \hat{F})$, $\hat{\rho}^{00} = Z^{-1} \exp(-\hat{H}_0/T)$, $Z = \text{Sp}\{\hat{H}_0\}$, $\langle \hat{F} \rangle \equiv \text{Sp}\{\hat{\rho}^{00} \hat{F}\} = 0$.

Для расчета одночастичной функции распределения $f_{\mathbf{k}} = \text{Sp}\{\hat{\rho}^0 a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma}\}$, а именно она определяет транспортные коэффициенты, оператор \hat{F} можно выбрать одночастичным, то есть представить в виде $\hat{F} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} F(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma}$. В этом случае $f_{\mathbf{k}}$ можно записать как $f_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}}^0 + g_{\mathbf{k}}$, $f_{\mathbf{k}}^0 = (1 + \exp(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/T)^{-1}$,

$g_{\mathbf{k}} = T(-\partial f^0 / \partial \varepsilon_{\mathbf{k}}) F(\mathbf{k})$, где μ – химический потенциал.

Мы ищем \hat{F} в виде линейной суперпозиции набора моментов – операторов \hat{F}_l : $\hat{F} = \sum_l \eta_l \hat{F}_l$, $\hat{F}_l = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} F_l(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}$. В терминах одночастичной функции распределения это означает, что неравновесная добавка $g_{\mathbf{k}}$ к равновесной фермиевской функции распределения имеет вид

$$g_{\mathbf{k}} = \left(\frac{-\partial f^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \Phi_{\mathbf{k}}, \quad \Phi_{\mathbf{k}} = T F(\mathbf{k}) = T \sum_l \eta_l F_l(\mathbf{k}). \quad (10)$$

Решение уравнения эволюции для матрицы плотности в рамках линейного отклика приводит в задаче электросопротивления к системе уравнений

$$X_l^E = \sum_{l'} P_{ll'} \eta_{l'}^E, \quad (11)$$

$$X_l^E = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} F_l(\mathbf{k}) e^{E^x} v_{\mathbf{k}}^x \left(\frac{-\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right),$$

$$P_{ll'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} F_l(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} (F_{l'}(\mathbf{k}) - F_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})).$$

Матрица рассеяния $C_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}}$ связана с мнимой частью спиновой восприимчивости:

$$C_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} = \frac{2J^2}{N} f_{\mathbf{k}}^0 (1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0) \times \int d\omega n_B(\hbar\omega) \chi''(\mathbf{q}, \omega) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega). \quad (12)$$

Здесь $f_{\mathbf{k}}^0$ и $n_B(\hbar\omega)$ – ферми- и бозе-распределения. Особенностью структуры матрицы рассеяния $C_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}}$ служит наличие в ней мнимой части спиновой восприимчивости. В силу резонансного характера $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ около $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ это приводит к определяющему характеру рассеяния носителей на вектор \mathbf{Q} .

Конкретный выбор моментов $F_l(\mathbf{k})$ диктуется видом электрического полевого члена $X_{\mathbf{k}}^E$. В предыдущей работе [31] мы ограничились анализом задачи для моментов $N_0 = 2$. Двухмоментное приближение позволяет обнаружить наличие “холодных” и “горячих” областей в зоне Бриллюэна, что отражает сильное рассеяние носителей на спиновой моде с АФМ вектором \mathbf{Q} . В то же время, большее число моментов необходимо для более точного описания неравновесной одночастичной функции распределения $g_{\mathbf{k}}$ и для демонстрации сходимости метода.

Ниже в качестве моментов $F_l(\mathbf{k})$ функции распределения используются полиномы от компонент скорости $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \partial \varepsilon_{\mathbf{k}} / \hbar \partial \mathbf{k}$ и ее производных:

$$F_l^E(\mathbf{k}) = \{v_{\mathbf{k}}^x, (v_{\mathbf{k}}^y)^2 v_{\mathbf{k}}^x, \frac{\partial v_{\mathbf{k}}^x}{\partial y} v_{\mathbf{k}}^y, \frac{\partial v_{\mathbf{k}}^y}{\partial y} v_{\mathbf{k}}^x, \frac{\partial v_{\mathbf{k}}^x}{\partial x} \frac{\partial v_{\mathbf{k}}^y}{\partial y} v_{\mathbf{k}}^x, (v_{\mathbf{k}}^x)^3, \frac{\partial v_{\mathbf{k}}^x}{\partial x} v_{\mathbf{k}}^x\}. \quad (13)$$

Найденные коэффициенты η_l^E позволяют определить плотность тока (a_z – расстояние между плоскостями CuO_2 , a – постоянная решетки спинов):

$$j^x = \frac{1}{a^2 a_z} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} e v_{\mathbf{k}}^x g_{\mathbf{k}}^E = \frac{2e}{a^2 a_z} \sum_l \eta_l^E \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^x \left(\frac{-\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) T F_l^E(\mathbf{k}).$$

Ввиду наличия квадратной симметрии, тензор сопротивления $\rho_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{-1}$ имеет диагональный вид и определяется одной независимой компонентой $\rho = \rho_{xx} = \rho_{yy}$.

В приведенных ниже результатах везде принимается $p = 0.1$, $I = 0.1$ эВ, $J = 0.2$ эВ. Дырочный спектр $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ вычислен на основе концепции спинового полярона [23] и отвечает оптимально допированным ВТСП соединениям. Химический потенциал выбирался так, чтобы поверхность Ферми $\varepsilon_F = 0.82\tau = 0.164$ эВ проходила и пересекала линию $(0, \pi) - (\pi, 0)$ недалеко от седловой точки. Использованная нами ширина зоны $W \cong 0.66$ эВ совпадает с экспериментальным значением ширины нижней зоны квазичастичных возбуждений в ВТСП [32–34]. Особенностью спектра оптимально допированных купратов является наличие седловой точки, расположенной вблизи поверхности Ферми. В используемом спектре седловая точка отстоит от ФП на величину $\varepsilon_{SP} - \varepsilon_F \approx 0.042$ эВ ≈ 460 К, что близко к экспериментальному значению (например, в Bi2212 при оптимальном допировании $\varepsilon_{SP} - \varepsilon_F \cong 0.035$ эВ [35]). Именно на таком масштабе энергий наблюдаются существенные изменения в топологии спектра и скорости носителей. ФП, использованная нами, отвечает дырочному заполнению $n_h = 1.13$, но при этом мы должны помнить, что реальное число носителей \tilde{n}_h близко к значению $\tilde{n}_h = 0.17$ и определяется весом голых дырок ($Z_{\mathbf{k}} \sim 0.15$) в каждом \mathbf{k} -состоянии нижней зоны $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ спинового полярона [23]. Для приведения рассчитанного ρ к практическим единицам мы принимали расстояние между плоскостями CuO_2 равным

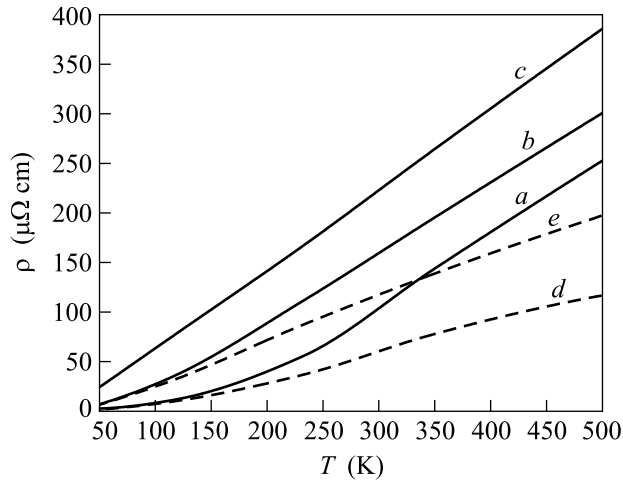


Рис.2. Температурная зависимость электросопротивления $\rho(T)$. Кривые a, b и c представляют $\rho(T)$, полученное на основе восприимчивости (4) $\alpha = 0$, соответственно для значений затухания $\gamma/I = 0.5, 1.0$ и 1.5 . Штриховые кривые d и e отвечают $\rho(T)$ на основе восприимчивости (4) с параметром $\alpha = 1$, что соответствует восприимчивости сильно затухающих магненов (1). Везде принято $I = 0.1 \text{ эВ}$

$a_z = 6.6 \text{ \AA}$, объем элементарной ячейки $a^2 a_z = 93 \text{ \AA}^3$. На рис.2 представлена температурная зависимость $\rho(T)$, найденная при различных значениях параметра затухания $\gamma/I = 0.5, 1.0, 1.5$ для различных форм восприимчивости (4) и (1). В соответствии с экспериментом кривая сопротивления демонстрирует линейную зависимость, начиная с низких температур. При малых параметрах затухания ($\gamma = 0.5$) низкотемпературная часть нелинейна и не соответствует экспериментальному поведению. Это подтверждает предположения о том, что реальные спиновые возбуждения имеют релаксационную динамику, то есть сильно затухают. Для таких магненов ($\gamma = 0.5$) кривая сопротивления линейна во всем экспериментально исследованном диапазоне температур. Однако использование восприимчивости (1) ведет к тому, что имеется тенденция к насыщению $\rho(T)$ и кривая меняет знак второй производной при $T \gtrsim 350 \text{ К}$. Это связано с тем, что (1) дает заниженное значение веса спектральной функции $\chi''(\mathbf{q}, \omega)$ при $\omega \gtrsim \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}, \gamma_{\mathbf{q}}$. Мнимые части восприимчивостей (4) и (1) разные. Они совпадают, если справедливо неравенство

$$\omega^2 |\omega^2 - 2\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2| \ll \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^4 + \omega^2 \gamma^2(\mathbf{q}, \omega). \quad (14)$$

Это неравенство (14) заведомо выполняется в области частот $\omega^2 \approx 2\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2$. Однако в той области значений ω , где неравенство (14) не выполняется, форма (1) дает $\text{Im}\chi_{so}(\mathbf{q}, \omega) < \text{Im}\chi(\mathbf{q}, \omega)$ (при $\omega^2 < 2\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2$). В резуль-

тате матрица рассеяния $C_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}}$ (12) может существенно отличаться для восприимчивостей $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ и $\chi_{so}(\mathbf{q}, \omega)$. Тогда значение сопротивления ρ_{so} , вычисленное с использованием $\chi_{so}(\mathbf{q}, \omega)$, может оказаться значительно меньше ρ , найденного с использованием $\chi(\mathbf{q}, \omega)$. Как мы видим, такое происходит при $\gamma \lesssim 500 \text{ К}$ в области температур $T \gtrsim 300 \text{ К}$. Это означает, что приближение сильно затухающих магненов справедливо только при достаточно низких температурах.

В заключение отметим, что мы провели анализ различных форм динамической спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega)$, существенно опирающийся на правило сумм (6), отталкиваясь от температурно зависящего самосогласованного средне-полевого спинового спектра $\omega_{\mathbf{q}}$. Мы изучили влияние различных форм $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ на температурную зависимость электросопротивления $\rho(T)$. Результаты демонстрируют разумное согласие с экспериментальной линейной зависимостью $\rho(T)$ для реалистичного набора параметров модели спиновой подсистемы и зонных параметров, взятых из расчета нижней зоны спинового полярона.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 04-02-17367) и Фонда содействия отечественной науке.

1. A. Carrington, D. J. C. Walker, A. P. Mackenzie, and J. R. Cooper, Phys. Rev. B **48**, 13051 (1993).
2. A. Malinowski, M. Z. Cieplak, S. Guha et al., Phys. Rev. B **66**, 104512 (2002).
3. Y. Ando, S. Komiya, K. Segawa et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 267001 (2004).
4. J. M. Harris, Y. F. Yan, and N. P. Ong, Phys. Rev. B **46**, 14293 (1992).
5. М. В. Садовский, УФН **171**, 539 (2001).
6. S. Chakravarty, C. Nayak, S. Tewari, and X. Yang, Phys. Rev. Lett. **89**, 277003 (2002).
7. V. Oganesyan and I. Ussishkin, Phys. Rev. B **70**, 054503 (2004).
8. S. Tewari, S. Chakravarty, J. O. Fjarestad et al., Phys. Rev. B **70**, 014514 (2004).
9. L. B. Ioffe and A. J. Millis, Phys. Rev. B **58**, 11631 (1998).
10. A. T. Zheleznyak, V. M. Yakovenko, and H. D. Drew, Phys. Rev. B **59**, 207 (1999).
11. A. Perali, M. Sindel, and G. Kotliar, Eur. Phys. J. B **24**, 487 (2001).
12. E. Abrahams and C. M. Varma, Phys. Rev. B **68**, 094502 (2003).
13. P. Coleman, A. J. Schofield, and A. M. Tsvelik, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 9985 (1996).

14. H. F. Fong, P. Bourges, Y. Sidis et al., *Phys. Rev. B* **61**, 14773 (2000).
15. B. P. Stojkovic and D. Pines, *Phys. Rev. B* **55**, 8576 (1997).
16. R. Hlubina and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **51**, 9253 (1995).
17. М. В. Садовский, Н. А. Стригина, *ЖЭТФ* **95**, 526 (2002).
18. A. J. Millis, H. Monien, and D. Pines, *Phys. Rev. B* **42**, 167 (1990); D. Pines, *Physica B* **163**, 78 (1990).
19. V. Barzykin and D. Pines, *Phys. Rev. B* **52**, 13585 (1995); D. Pines, *Z. Phys. B* **103**, 129 (1997).
20. A. F. Barabanov and V. M. Berezovsky, *Phys. Lett. A* **186**, 175 (1994); А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, *ЖЭТФ* **79**, 627 (1994).
21. A. F. Barabanov and L. A. Maksimov, *Phys. Lett. A* **207**, 390 (1995).
22. I. Sega, P. Prelovšek, and J. Bonča, *Phys. Rev. B* **68**, 054524 (2003).
23. А. Ф. Барабанов, Р. Хайн, А. А. Ковалев и др., *ЖЭТФ* **119**, 777 (2001).
24. A. F. Barabanov, A. A. Kovalev, O. V. Urazaev, and A. M. Belemouk, *Phys. Lett. A* **265**, 221 (2000).
25. P. Prelovšek, I. Sega, and J. Bonča, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 027002 (2004).
26. V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
27. V. J. Emery and G. Reiter, *Phys. Rev. B* **38**, 4547 (1988).
28. F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).
29. А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, *ФММ* **29** 471 (1970).
30. J. Black and D. L. Mills, *Phys. Rev. B* **9**, 1458 (1974).
31. A. M. Belemuk and A. F. Barabanov, *Phys. Lett. A* **323**, 138 (2004).
32. B. O. Wells, Z. X. Shen, A. Matsuura et al., *Phys. Rev. Lett.* **74**, 964 (1995).
33. D. S. Marshall, D. S. Dessau, A. G. Loeser et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4841 (1996).
34. F. Ronning, C. Kim, D. L. Feng et al., *Science* **282**, 2067 (1998).
35. M. R. Norman, M. Randeria, H. Ding, and J. C. Campuzano, *Phys. Rev. B* **52**, 615 (1995).