

Электросопротивление, коэффициент Холла и термоЭДС оптимально допированных высокотемпературных сверхпроводников

И. А. Ларионов¹⁾, А. Ф. Барабанов⁺

Национальный исследовательский технологический университет “МИСиС”, 119049 Москва, Россия

Институт физики, Казанский федеральный университет, 420008 Казань, Россия

⁺ Институт физики высоких давлений им. Верецагина РАН, 142190 Троицк, Россия

Поступила в редакцию 9 октября 2014 г.

Исследованы температурные зависимости электросопротивления, $\rho(T)$, коэффициента Холла, $R_H(T)$, и термоЭДС, $Q(T)$, для двумерного допированного антиферромагнетика со спином $S = 1/2$. В рамках единой концепции спин-поляронного подхода на решетке Кондо одновременно для трех кинетических коэффициентов получена температурная зависимость, которая отвечает оптимально допированным слоистым сверхпроводящим купратам. Ключевыми моментами рассмотрения являются многомоментный метод решения кинетических уравнений (только семь моментов для неравновесной функции распределения приводят к хорошей сходимости) и вид динамической спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ локализованных спинов. Для $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ предложено самосогласованное выражение, которое учитывает “кроссовер” между спиновой восприимчивостью, полученной из самосогласованной сферически-симметричной функции Грина, и полуфеноменологической спиновой восприимчивостью критически затухающих магнонов.

DOI: 10.7868/S0370274X14230064

В настоящее время двумерные квантовые антиферромагнетики (2D AFM) с $S = 1/2$ представляют большой интерес и интенсивно изучаются как экспериментально, так и теоретически. С теоретической точки зрения они являются объектами для изучения квантовых фазовых переходов и часто трактуются в рамках фрустрированной $J_1 - J_2$ -модели Гейзенберга. Особое внимание привлекает физика допированных носителями заряда 2D AFM, одними из представителей которых являются купратные высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП). В нормальном состоянии кинетические явления (электросопротивление $\rho(T)$, коэффициенты Холла $R_H(T)$ и термоЭДС $Q(T)$) в этих соединениях демонстрируют аномальное поведение при изменении величин как температуры T , так и степени допирования x [1–9]. Например, в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при оптимальном допировании $x \approx 0.15$ линейная зависимость сопротивления наблюдалась сразу выше температуры сверхпроводящего перехода $T_c = 35$ К и сохранялась вплоть до 1000 К [7], что иногда связывают с наличием квантовой критической области [10]. При степени допирования ниже оптимальной наблюдаются отклонения от линейной зависимости при низких температурах. Так, в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ниже $T_K \sim 320$ К [3]

имеется сильное отклонение зависимости $\rho(T)$ от линейной, а выше T_K она ведет себя по степенному закону: $\rho \propto T^\gamma$ ($\gamma \approx 1.2$). При увеличении степени допирования отклонение от линейности ниже T_K трансформируется в линейную температурную зависимость.

Зависимости $R_H(T)$ и $Q(T)$ также демонстрируют аномальное поведение – максимумы, положение и ширина которых зависят от степени допирования x . Для оптимально допированных соединений при высоких температурах $R_H(T) \sim T^{-1}$. С понижением степени допирования коэффициент Холла растет, а его максимум уширяется и смещается в сторону высоких температур [3, 4].

Среди теоретических подходов, предложенных для объяснения необычных транспортных свойств ВТСП-купратов, отметим два широких направления. Первое из них постулирует существование двух независимых времен релаксации для холловского и электрического токов [11, 12]. Второе основывается на концепции почти антиферромагнитной (ПАФМ) ферми-жидкости и наличии аномальной зависимости времени рассеяния носителей τ_k от импульса и температуры [13–17]. В упомянутых моделях делается целый ряд предположений относительно феноменологических параметров, определяющих транспортные свойства.

¹⁾e-mail: Larionov.MRSLab@mail.ru

Наш анализ поведения $\rho(T)$, $R_H(T)$ и $Q(T)$ в двумерном допированном антиферромагнетике также будет проводиться в рамках почти антиферромагнитной ферми-жидкости, точнее на основе спин-фермионной модели с рассеянием носителей на спиновых флуктуациях. Однако проведенное ниже рассмотрение представляется нам менее феноменологическим, чем предыдущие. Это в первую очередь относится к динамической спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega)$, поведение которой является определяющим для кинетики носителей.

Спектр носителей $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ следует находить с учетом сильных электронных корреляций в плоскостях CuO_2 . Электронные свойства такой системы хорошо описываются трехзонной моделью Эмери [18–20]. Ранее эта модель исследовалась на основе концепции спинового полярона в широком интервале допирования [21]. Указанный подход дает спектр элементарных возбуждений, согласующийся с результатами экспериментов по фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES), и позволяет передать различные его особенности. В частности, он дает протяженную седловую особенность около ферми-поверхности (ФП) для оптимально допированных соединений, а также наличие псевдощелевого состояния в режиме промежуточного допирования [22–24].

Ввиду громоздкости трехзонной модели для аналитического рассмотрения кинетики мы будем опираться на более простую однозонную модель решетки Кондо с внутриузельным взаимодействием носителей со спиновой подсистемой. Она правильно описывает все основные черты результатов ARPES-экспериментов. В качестве спектра носителей мы возьмем ранее вычисленный спектр нижней зоны спинового полярона [21].

Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad \hat{H}_0 = \hat{H}_h + \hat{I}, \quad \hat{H}_h = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (1)$$

$$\hat{I} = \frac{1}{2} J_1 \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{g}} S_{\mathbf{R}+\mathbf{g}}^\alpha S_{\mathbf{R}}^\alpha + \frac{1}{2} J_2 \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}} S_{\mathbf{R}+\mathbf{d}}^\alpha S_{\mathbf{R}}^\alpha.$$

Здесь \hat{H}_h и \hat{I} описывают движение ферми-носителей (дырок) и подсистему локализованных спинов $S = 1/2$, \mathbf{g} и \mathbf{d} – векторы первых и вторых ближайших соседей. Спектр дырок $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ можно представить в аналитической форме с помощью гармоник квадратной симметрии $\gamma_g(\mathbf{k}) = [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]/2$, $\gamma_d(\mathbf{k}) = \cos(k_x a) \cos(k_y a)$ как $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \tau [a_1 \gamma_g(\mathbf{k}) + a_2 \gamma_g^2(\mathbf{k}) + a_3 \gamma_d(\mathbf{k}) + a_4 \gamma_d^2(\mathbf{k}) + a_5 \gamma_g(\mathbf{k}) \gamma_d(\mathbf{k})]$ с параметрами $\tau = 0.2$ эВ, $a_1 = 1.5$, $a_2 = 3.0$, $a_3 = -1.25$, $a_4 = 0.0$, $a_5 = 0.1$. Принятые параметры спектра

отвечают случаю оптимального допирования ВТСП. Форма ФП, отвечающая спектру $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, представлена на вставке к рис. 1.

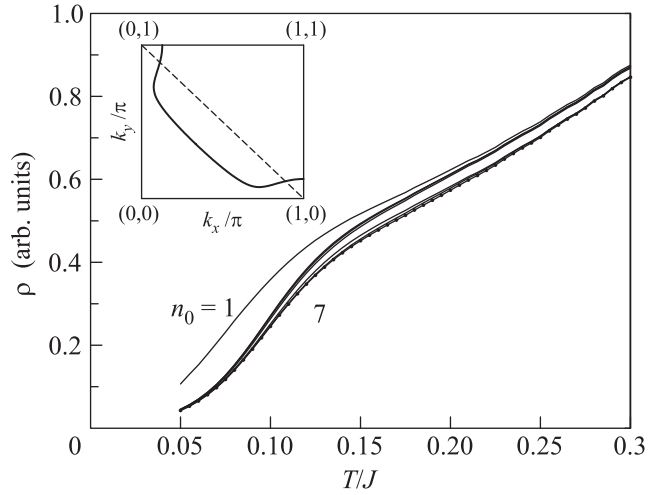


Рис. 1. Температурная зависимость электросопротивления. Кривые отвечают сопротивлению, рассчитанному при различном числе моментов (от одного до семи). На вставке сплошной линией показана форма поверхности Ферми носителей заряда, штриховой линией – край магнитной зоны

Обменный гамильтониан \hat{I} описывает АФМ фрустрированное взаимодействие между спинами, p – параметр фрустрации ($0 \leq p \leq 1$), $J_1 = (1-p)J$ и $J_2 = pJ$ – константы обменного взаимодействия для первых и вторых ближайших соседей. Взаимосвязь допирования и фрустрации, впервые предложенная в [25], основана на схожем поведении магнитной корреляционной длины. Увеличение как параметра допирования x , так и параметра фрустрации $p = J_2/(J_1 + J_2)$ ведет к значительному падению длины спиновых корреляций. Вычисления на кластерах указывают на значительную величину параметра фрустрации $p \approx 0.1$ даже для недопированного La_2CuO_4 [26]. Ниже для оптимально допированного случая мы принимаем $p = 0.2$.

Гамильтониан $\hat{H}_1 = \hat{J} + \hat{H}_f$ отвечает взаимодействию носителей с подсистемой локализованных спинов:

$$\hat{J} = J_J \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \gamma_1, \gamma_2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \gamma_1}^\dagger S_{\mathbf{q}}^\alpha \hat{\sigma}_{\gamma_1 \gamma_2}^\alpha a_{\mathbf{k} \gamma_2},$$

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

(где $\hat{\sigma}^\alpha$ – матрицы Паули, по повторяющимся декартовым индексам α подразумевается суммирование),

и с внешним однородным электрическим полем \mathbf{E} , направленным вдоль плоскостей CuO_2 . Взаимодействие \hat{H}_f носителей (с зарядом e) с внешним однородным электрическим полем вводится через оператор поляризации:

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

Для нахождения коэффициентов электропроводности, Холла и термоЭДС мы используем формализм матрицы плотности. В стационарном случае отклонение от равновесия задается матрицей $\hat{\rho}'$. Наиболее общий путь построения оператора $\hat{\rho}'$ заключается в применении метода неравновесного статистического оператора [27]. Мы используем многомоментный метод, введенный ранее при описании низкотемпературного поведения электросопротивления и коэффициента Холла в поливалентных металлах [28, 29]. Вывод кинетического уравнения в рамках метода моментов в случае спин-поляронного подхода приведен в [30, 31].

Неравновесная добавка $g_{\mathbf{k}}$ к равновесной фермиевской функции распределения имеет вид

$$g_{\mathbf{k}} = \left(\frac{-\partial f^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \Phi_{\mathbf{k}}, \quad \Phi_{\mathbf{k}} = T F(\mathbf{k}) = T \sum_l \eta_l F_l(\mathbf{k}). \quad (2)$$

Предполагается, что электрический ток течет вдоль оси x и обусловлен наличием внешнего электрического поля E^x . Магнитное поле направлено по оси z . При отсутствии тока вдоль оси y холловское электрическое поле $E^y \propto E^x H^z$. Поправку к функции распределения ищем в виде $F(\mathbf{k}) = F^E(\mathbf{k}) + F^H(\mathbf{k})$, где $F^E(\mathbf{k}) \propto E^x$, $F^H(\mathbf{k}) \propto E^y$.

Задача распадается на два этапа. На первом этапе определяется $F^E(\mathbf{k}) = \sum_l \eta_l^E F_l^E(\mathbf{k})$, обусловленная наличием внешнего поля E^x . Найденная поправка $F^E(\mathbf{k})$ используется на втором этапе при определении поправки к равновесной функции распределения $F^H(\mathbf{k}) = \sum_l \eta_l^H F_l^H(\mathbf{k})$, обусловленной наличием магнитного поля.

Для разложения каждой из функций $F^E(\mathbf{k})$ и $F^H(\mathbf{k})$ используется своя группа моментов. Ясно, что мы должны ограничиться некоторым конечным числом n_0 моментов \hat{F}_l , которое выбирается из условия корректного учета анизотропии рассеяния и формы поверхности Ферми. Конкретный выбор моментов $F_l(\mathbf{k})$ диктуется видом электрического ($X_{\mathbf{k}}^E$) и холловского полевого ($X_{\mathbf{k}}^H$) членов. Большое число моментов необходимо для описания сильных температурных зависимостей анизотропии рассеяния и

неравновесной одночастичной функции распределения $g_{\mathbf{k}}$, а также для демонстрации сходимости метода.

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

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

$$F_l^H(\mathbf{k}) = \left\{ v_{\mathbf{k}}^y, (v_{\mathbf{k}}^x)^2 v_{\mathbf{k}}^y, \frac{\partial v_{\mathbf{k}}^x}{\partial k_y} v_{\mathbf{k}}^x, \frac{\partial v_{\mathbf{k}}^x}{\partial k_x} v_{\mathbf{k}}^y, \right. \\ \left. \frac{\partial v_{\mathbf{k}}^x}{\partial k_x} \frac{\partial v_{\mathbf{k}}^y}{\partial k_y} v_{\mathbf{k}}^y, (v_{\mathbf{k}}^y)^3, \frac{\partial v_{\mathbf{k}}^y}{\partial k_y} v_{\mathbf{k}}^y \right\}. \quad (4)$$

Как это показано в [30, 31] для спин-поляронного подхода, находим коэффициенты η_l^E из системы уравнений:

$$X_l^E = \sum_{l'} P_{ll'} \eta_{l'}^E, \quad (5)$$

$$X_l^E = \sum_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}} F_l(\mathbf{k}) e E^x v_{\mathbf{k}}^x \left(\frac{-\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right), \quad (6)$$

$$P_{ll'} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} F_l(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} [F_{l'}(\mathbf{k}) - F_{l'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})]. \quad (7)$$

Матрица рассеяния $C_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}}$ выражается через мнимую часть динамической спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\langle \langle S_{\mathbf{q}}^\alpha | S_{-\mathbf{q}}^\alpha \rangle \rangle_\omega$ следующим образом: $C_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} = 2J^2 Z_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} f_{\mathbf{k}}^0 (1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0) \int d\omega n_B(\omega) \text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega)$. Здесь $\langle \langle S_{\mathbf{q}}^\alpha | S_{-\mathbf{q}}^\alpha \rangle \rangle_\omega$ – спин-спиновая запаздывающая функция Грина, $f_{\mathbf{k}}^0$ и $n_B(\omega)$ – функции распределения Ферми и Бозе, $e = -1$ – заряд электрона.

Система уравнений (5)–(7) является аналогом стандартных кинетических уравнений в случае чисто фермионного характера носителей [32]. В случае спин-поляронного их характера в системе уравнений (5)–(7) при малом допировании фигурируют только нижняя зона $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ и величины $Z_{\mathbf{k}}$ и $Z_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$, которые отвечают вычетам “голой” дырки в нижней поляронной зоне (спектральный вес дырки в квазичастичном пике). Ниже мы предполагаем $Z_{\mathbf{k}}$ слабо зависящим от \mathbf{k} , а характерные значения $Z_{\mathbf{k}} \approx Z \approx 0.15$.

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 $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ это приводит к определяющему характеру рассеяния носителей на вектор \mathbf{Q} .

Фрустрированная спиновая подсистема рассматривается в сферически-симметричном приближении (в спиновом пространстве) [33, 34]. Спектр спиновых возбуждений состоит из трех вырожденных ветвей, описываемых запаздывающей функцией Грина $\langle\langle S_{\mathbf{q}}^{\alpha}|S_{-\mathbf{q}}^{\alpha}\rangle\rangle_{\omega}$. Это означает, что среднее значение спина на узле равно нулю, $\langle S_{\mathbf{R}}^{\alpha}\rangle = 0$, а АФМ спиновые корреляционные функции $\langle S_{\mathbf{R}+\mathbf{r}}^{\alpha}S_{\mathbf{R}}^{\alpha}\rangle$ при фиксированном декартовом индексе α не зависят от α . Такой подход дает температурно-зависящую щель $\Delta(T)$ на АФМ-векторе $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ в спектре спиновых флуктуаций.

Используя метод неприводимых функций Грина [35] или метод функций памяти [36], можно показать, что спиновая восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle S_{\mathbf{q}}^{\alpha}|S_{-\mathbf{q}}^{\alpha}\rangle\rangle_{\omega}$ представима в виде

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{-A_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2 + i\omega\gamma(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (8)$$

где $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}$ – эффективный спектр спиновых волн.

В настоящей работе для мнимой части спиновой восприимчивости принято выражение

$$\text{Im } \chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{-A_{\mathbf{q}}}{[\omega^2(1 - e_w) - \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2]^2 + \omega^2\gamma^2}. \quad (9)$$

Действительной перенормировкой спектра спиновых возбуждений пренебрегается [37]. Будем считать затухание $\gamma(\mathbf{q}, \omega) = \gamma = 0.2J$ постоянным и не зависящим от температуры. Недавние аналитические и численные расчеты $\gamma(\mathbf{q}, \omega)$ в рамках t - J -модели [36, 38] дают аргументы в пользу такого приближения.

Температурное поведение параметра e_w принято в виде

$$e_w = \frac{1.75}{1 + \exp(T_0^2/4T^2)}, \quad T_0 = 0.33J,$$

который учитывает “кроссовер” между выражением для спиновой восприимчивости, полученным из точной функции Грина (8), и полуфеноменологической спиновой восприимчивостью Пайнса с сотрудниками для критически затухающих магнонов [39, 40]:

$$\text{Im } \chi_{SF}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{A_{SF}\xi^2\omega/\omega_{SF}}{[1 + \xi^2(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2]^2 + (\omega/\omega_{SF})^2}, \quad (10)$$

где ω_{SF} – частота спиновых флуктуаций, ξ – корреляционная длина. Отметим, что такой вид $\chi_{SF}(\mathbf{q}, \omega)$ широко используется в литературе. Однако он справедлив только в области волновых векторов $\mathbf{q} \approx \mathbf{Q}$, нарушает известный одноузельный констрейнт и не является самосогласованным.

Числитель $A_{\mathbf{q}}$ и спектр спин-волновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ выражаются через конечное число спин-спиновых корреляционных функций $C_{\mathbf{r}} = \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}}\mathbf{S}_{\mathbf{R}+\mathbf{r}} \rangle$, которые рассчитываются самосогласованно. Они имеют вид [33, 34]

$$A_{\mathbf{q}} = -8 \{J_1[1 - \gamma_g(\mathbf{q})]C_g + J_2[1 - \gamma_d(\mathbf{q})]C_d\}, \quad (11)$$

$\omega_{\mathbf{q}} = J(\frac{8}{3}\{(1 - \gamma_g)[B_1 + (1 + \gamma_g)B_2] + (1 - \gamma_d)[B_3 + (1 + \gamma_d)B_4] + \gamma_g(1 - \gamma_d)B_5\})^{1/2}$. Параметры B_i вычисляются через $C_g, C_{2g}, C_d, C_{g+d}, C_{2d}$ и обменные константы J_1 и J_2 . Функции $A_{\mathbf{q}}$ и $\omega_{\mathbf{q}}$ обращаются в нуль при $\mathbf{q} \rightarrow 0$. В пределе $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}$ числитель $A_{\mathbf{q}}$ стремится к некоторой положительной константе $A_{\mathbf{Q}}$, а спектр спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}^2 \approx \Delta^2 + c_0^2(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2$ содержит щель $\Delta \equiv \omega_{\mathbf{Q}}$.

В результате с учетом δ -функции в интеграле по частоте ω матрица рассеяния $C_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}}$ имеет вид

$$C_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} = 2J^2Z^2f_{\mathbf{k}}^0(1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \times \text{Im } \chi(\mathbf{q}, \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (12)$$

Коэффициенты η_l^E позволяют определить плотность тока и электросопротивление $\rho = \sigma^{-1}$:

$$j^x = \sigma E^x = \frac{1}{a^2a_z} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} e v_{\mathbf{k}}^x g_{\mathbf{k}}^E = \frac{2eZ}{a^2a_z} \sum_l \eta_l^E \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^x \left(-\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) T F_l^E(\mathbf{k}), \quad (13)$$

где a_z – расстояние между плоскостями CuO_2 , a – постоянная Кондо решетки. Коэффициенты η_l^H определяются системой уравнений:

$$X_l^y + X_l^H = \sum_{l'} P_{ll'} \eta_{l'}^H, \quad (14)$$

$$X_l^y = Z \sum_{\mathbf{k}} F_l^H(\mathbf{k}) e E^y v_{\mathbf{k}}^y \left(-\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right), \quad (15)$$

$$X_l^H = Z \sum_{\mathbf{k}} F_l^H(\mathbf{k}) \left(-\frac{e}{\hbar} \right) [\mathbf{v}_{\mathbf{k}}, \mathbf{H}] \frac{\partial \Phi_{\mathbf{k}}^E}{\partial \mathbf{k}} \left(-\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right). \quad (16)$$

Особенностью (16) является наличие градиента $\partial \Phi_{\mathbf{k}}^E / \partial \mathbf{k}$ функции распределения $\Phi_{\mathbf{k}}^E = T F_{\mathbf{k}}^E$ в холловском полевом члене X_l^H . Это приводит к необходимости рассматривать в качестве возможных моментов неравновесной функции распределения производные от компонент скорости.

Коэффициент Холла определяется величиной холловского поля E^y и плотностью тока по оси x :

$$E^y = R_{\text{H}} j^x H^z. \quad (17)$$

Для замыкания системы уравнений (14) используется условие отсутствия тока по оси y :

$$j^y = \frac{1}{a^2 a_z} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} e v_{\mathbf{k}}^y g_{\mathbf{k}}^H =$$

$$= \frac{2e}{a^2 a_z} \sum_l \eta_l^H \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^y \left(-\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) T F_l^H(\mathbf{k}) = 0. \quad (18)$$

Для расчета термоЭДС мы используем формулу [32]

$$Q = -\frac{\sum_{ij} X_i^E (P^{-1})_{ij} U_j}{T \sum_{ij} X_i^E (P^{-1})_{ij} X_j^E}, \quad (19)$$

где

$$U_j = Z \sum_{\mathbf{k}} F_j(\mathbf{k}) (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) e E^x v_{\mathbf{k}}^x \left(-\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right), \quad (20)$$

$(P^{-1})_{ij}$ – матрица, обратная матрице P_{ij} , а $\mu = 0.22 \text{ эВ}$ – химпотенциал, который отвечает оптимально допированным ВТСП-соединениям с полным числом дырок ≈ 0.2 .

Системы уравнений (5) и (14) эквивалентны линейаризованному уравнению Больцмана, если набор операторов $\{\hat{F}_l\}$ является полным. Если мы ограничиваемся конечным числом n_0 операторов \hat{F}_l , то выбор моментов $F_l(\mathbf{k})$ обусловлен анизотропией рассеяния носителей и формой ФП. Обычно уравнение Больцмана решают в приближении постоянного времени релаксации, т.е. ограничиваются одним моментом. Такое приближение оправдано, когда наблюдается изотропизация рассеяния (в нашем случае при предельно высоких температурах).

На рис. 1 приведен результат расчета электросопротивления $\rho(T)$ как функции температуры для различного количества моментов. Видно, что учет второго момента дает небольшое изменение величины $\rho(T)$. При учете третьего и четвертого моментов результат остается практически неизменным. Учет пятого момента снова дает небольшое изменение величины $\rho(T)$. Учет большего числа моментов опять слабо влияет на величину электросопротивления. В целом, учет нового момента систематически уменьшает величину $\rho(T)$. Так и должно быть, поскольку величина электросопротивления подчиняется вариационному принципу.

Результат расчета коэффициента Холла $R_H(T)$ как функции температуры для различного количества моментов представлен на рис. 2. Видно, что температурная зависимость $R_H(T)$ меняется кардинальным образом при учете небольшого числа моментов. В одномоментном приближении он спадает линейно при повышении температуры. В двух- и трех-

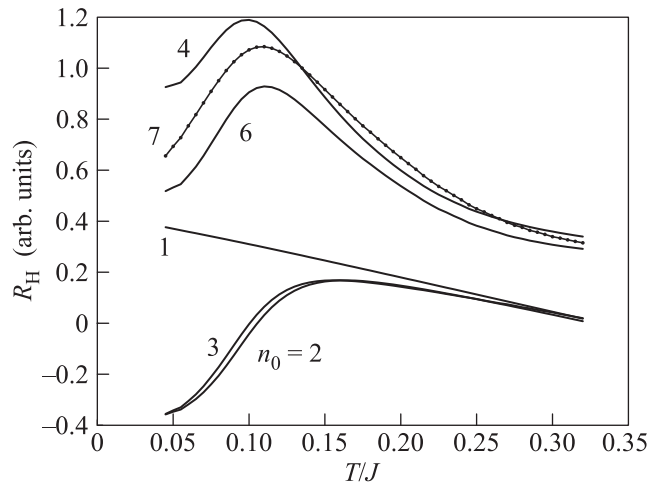


Рис. 2. Температурная зависимость коэффициента Холла. Около кривых указано использованное при расчете число моментов

моментном приближении $R_H(T)$ приобретает широкий максимум при $T \approx 0.15J \approx 220 \text{ К}$, но отрицателен при $T \leq 0.1J$. При учете четырех и более моментов $R_H(T)$ значительно возрастает по величине, положителен при низких температурах, а положение его максимума сдвигается в сторону более низких температур, $T \approx 0.1J \approx 150 \text{ К}$, в хорошем согласии с экспериментом [5, 6] и становится слабо зависящим от числа моментов, т.е. демонстрирует сходимость. Как видно из рис. 2, для всех случаев, начиная с $T = 220 \text{ К}$ и выше, коэффициент Холла спадает.

Температурная зависимость термоЭДС, $Q(T)$, показанная на рис. 3, также демонстрирует значитель-

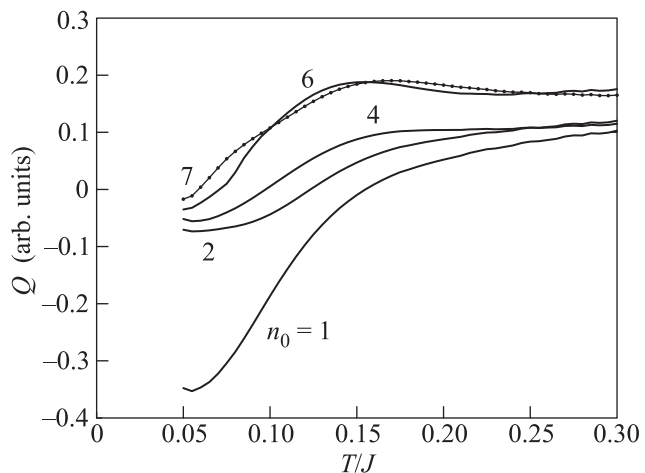


Рис. 3. Температурная зависимость коэффициента термоЭДС. Около кривых указано использованное при расчете число моментов

ные изменения при увеличении числа моментов. В одномоментном приближении она отрицательна при

$T \leq 0.15J \approx 220$ К, что не соответствует экспериментальным данным. При увеличении числа учитываемых моментов величина $Q(T)$ возрастает, демонстрируя плавную сходимость, и приобретает широкий максимум при $T \leq 0.15J \approx 220$ К. Небольшие отрицательные значения $Q(T)$ при $T \leq 0.05J \approx 70$ К, т.е. ниже температуры сверхпроводящего перехода в оптимально допированных сверхпроводниках Y–Ba–Cu–O, также находятся в качественном согласии с экспериментальными данными в недопированных ВТСП-купратах, где сверхпроводящее состояние подавлено магнитным полем [41, 42].

В заключение отметим, что малого числа моментов недостаточно при низких температурах. Семь моментов (3) дают хорошую сходимость для $\rho(T)$ во всем рассмотренном диапазоне температур. Результаты демонстрируют разумное согласие с экспериментально наблюдаемыми зависимостями сопротивления, $\rho(T)$, коэффициента Холла, $R_H(T)$, и термоЭДС, $Q(T)$, для реалистичного набора параметров модели спиновой подсистемы (константы АФМ-обмена $J = 0.12$ эВ, параметра фрустрации $p = 0.2$ и параметра затухания $\gamma \simeq 0.2J$) и зонных параметров, взятых из расчета нижней зоны спинового полярона. Мы также представили многомоментный метод решения кинетического уравнения.

Работа А.Ф.Б. выполнена при поддержке РФФИ (грант # 13-02-00909).

1. H. G. Luo, Y. H. Su, and T. Xiang, Phys. Rev. B **77**, 014529 (2008).
2. B. Bucher, P. Steiner, J. Karpinski, E. Kaldis, and P. Wachter, Phys. Rev. Lett. **70**, 2012 (1993).
3. J. M. Harris, Y. F. Yan, and N. P. Ong, Phys. Rev. B **46**, 14293 (1992).
4. A. Carrington, D. J. C. Walker, A. P. Mackenzie, and J. R. Cooper, Phys. Rev. B **48**, 13051 (1993).
5. Y. Ando, Y. Kurita, S. Komiyama, S. Ono, and K. Segawa, Phys. Rev. Lett. **92**, 197001 (2004).
6. K. Segawa and Y. Ando, Phys. Rev. B **69**, 104521 (2004).
7. H. Takagi, B. Batlogg, H. L. Kao, J. Kwo, R. J. Cava, J. J. Krajewski, and W. F. Peck, Phys. Rev. Lett. **69**, 2975 (1992).
8. A. Malinowski, M. Z. Cieplak, S. Guha, Q. Wu, B. Kim, A. Krickser, A. Perali, K. Karpinska, M. Berkowski, C. H. Shang, and P. Lindenfild, Phys. Rev. B **66**, 104512 (2002).
9. Y. Ando, S. Komiyama, K. Segawa, S. Ono, and Y. Kurita, Phys. Rev. Lett. **93**, 267001 (2004).
10. S. Sachdev, Science **228**, 475 (2000).
11. P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **67**, 2092 (1991).
12. P. Coleman, A. J. Schofield, and A. M. Tsvelik, J. Phys.: Cond. Matt. **8**, 9985 (1996).
13. B. P. Stojkovic and D. Pines, Phys. Rev. B **55**, 8576 (1997).
14. R. Hlubina and T. M. Rice, Phys. Rev. B **51**, 9253 (1995).
15. L. B. Ioffe and A. J. Millis, Phys. Rev. B **58**, 11631 (1998).
16. A. T. Zheleznyak, V. M. Yakovenko, and H. D. Drew, Phys. Rev. B **59**, 207 (1999).
17. A. Perali, M. Sindel, and G. Kotliar, Eur. Phys. J. B **24**, 487 (2001).
18. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
19. V. J. Emery and G. Reiter, Phys. Rev. B **38**, 4547 (1988).
20. F. C. Zhang and T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 3759 (1988).
21. А. Ф. Барабанов, Р. Хайн, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев, А. М. Белемук, ЖЭТФ **119**, 777 (2001).
22. B. O. Wells, Z. X. Shen, A. Matsuura, D. M. King, M. A. Kastner, M. Greven, and R. J. Birgeneau, Phys. Rev. Lett. **74**, 964 (1995).
23. D. S. Marshall, D. S. Dessau, A. G. Loeser, C.-H. Park, A. Y. Matsuura, J. N. Eckstein, I. Bozovic, P. Fournier, A. Kapitulnik, W. E. Spicer, and Z.-X. Shen, Phys. Rev. Lett. **76**, 4841 (1996).
24. F. Ronning, C. Kim, D. L. Feng, D. S. Marshall, A. G. Loeser, L. L. Miller, J. N. Eckstein, I. Bozovic, and Z.-X. Shen, Science **282**, 2067 (1998).
25. M. Inui, S. Doniach, and M. Gabay, Phys. Rev. B **38**, 6631 (1988).
26. J. F. Annett, R. M. Martin, A. K. McMahan and S. Satpathy, Phys. Rev. B **40**, 2620 (1989).
27. Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Репке, *Статистическая механика неравновесных процессов*, Физматлит, М. (2002), т. 1, 2.
28. А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, ФММ **29**, 471 (1970).
29. J. Black, D. L. Mills, Phys. Rev. B **9**, 1458 (1974).
30. А. М. Белемук, А. Ф. Барабанов и Л. А. Максимов, ЖЭТФ **129**, 493 (2006).
31. А. М. Белемук, А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, Письма в ЖЭТФ **86**, 374 (2007).
32. J. M. Ziman, *Electrons and Phonons, The Theory of Transport Phenomena in Solids*, Oxford University Press, Oxford (1960) [Дж. Займан, *Электроны и фононы*, ИЛ, М. (1962)].
33. A. F. Barabanov and V. M. Berezovsky, Phys. Lett. A **186**, 175 (1994).
34. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, ЖЭТФ **79**, 627 (1994).
35. A. F. Barabanov and L. A. Maksimov, Phys. Lett. A **207**, 390 (1995).

36. I. Sega, P. Prelovšek, and J. Bonča, *Phys. Rev. B* **68**, 054524 (2003).
37. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, А. В. Шварцберг, *ТМФ* **168**, 389 (2011).
38. P. Prelovšek, I. Sega, and J. Bonča, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 027002 (2004).
39. A. J. Millis, H. Monien, and D. Pines, *Phys. Rev. B* **42**, 167 (1990).
40. A. V. Chubukov, D. Pines, and J. Schmalian, in *Physics of Superconductors* **1**, 495 (2003), Eds.: K. H. Bennemann and J. B. Ketterson.
41. J. Chang, R. Daou, C. Proust, D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud, F. Laliberte, B. Pingault, B. J. Ramshaw, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, H. Takagi, A. B. Antunes, I. Sheikin, K. Behnia, and L. Taillefer, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 057005 (2010).
42. F. Laliberte, J. Chang, N. Doiron-Leyraud, E. Hassinger, R. Daou, M. Rondeau, B. J. Ramshaw, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, I. Sheikin, L. Malone, C. Proust, K. Behnia, and L. Taillefer, *Nat. Commun.* **2**, 432 (2011).