

Эффект Холла в легированном моттовском диэлектрике: DMFT-приближение

Э. З. Кучинский⁺, Н. А. Кулеева⁺, Д. И. Хомский*, М. В. Садовский⁺¹⁾

⁺Институт электрофизики Уральского отделения РАН, 620016 Екатеринбург, Россия

*II Physikalisches Institut, Universitaet zu Koeln, 50937 Koeln, Germany

Поступила в редакцию 1 марта 2022 г.

После переработки 1 марта 2022 г.

Принята к публикации 1 марта 2022 г.

В рамках подхода, основанного на динамической теории среднего поля (DMFT) анализируется эффект Холла в легированном моттовском диэлектрике, как прототипе купратного сверхпроводника. Рассматривается ситуация с частичным заполнением (дырочным допированием) нижней хаббардовской зоны. Найдена зависимость коэффициента Холла и холловского числа от степени дырочного легирования и определено значение критической концентрации, при которой происходит смена знака коэффициента Холла. Отмечается существенная зависимость параметров эффекта Холла от температуры. Продемонстрировано хорошее согласие с концентрационной зависимостью холловского числа, найденной в экспериментах в нормальном состоянии YBCO.

DOI: 10.31857/S1234567822070072

1. Введение. В последние годы большой интерес вызывают экспериментальные исследования эффекта Холла при низких температурах в нормальном состоянии высокотемпературных сверхпроводников (купратов), которое реализуется в очень сильных внешних магнитных полях [1–3]. Наблюдающиеся при этом аномалии эффекта Холла обычно связываются с реконструкцией поверхности Ферми, связанной с формированием (антиферромагнитной) псевдощели и с близостью к соответствующей квантовой критической точке [4].

В то же время, почти общепринятой является точка зрения о том, что купраты являются сильно коррелированными системами и металлическое (сверхпроводящее) состояние в них реализуется в результате легирования (допирования) исходной фазы моттовского диэлектрика, который в простейшем приближении может быть описан в рамках модели Хаббарда. При этом практически отсутствуют работы, в которых в рамках этой модели проводились бы систематические исследования зависимости эффекта Холла от степени допирования. Здесь возникает известный вопрос, что определяет знак эффекта Холла? При малом дырочном допировании исходного диэлектрика, такого как La_2CuO_4 или YBCO, он, очевидно, просто определяется концентрацией дырок δ . Но при какой степени допирования происходит смена знака коэффициента Холла, когда происходит пе-

реход от небольшой дырочной поверхности Ферми к электронной? Решение этого вопроса представляется важным и для общей теории транспортных явлений в сильно коррелированных системах.

Весьма общим подходом к исследованию модели Хаббарда остается динамическая теория среднего поля (DMFT) [5–7]. Целью данной работы является систематическое исследование концентрационной и температурной зависимости эффекта Холла при различных степенях легирования нижней хаббардовской зоны в рамках DMFT-подхода и сравнение полученных результатов с экспериментом на YBCO [2]. Мы увидим, что удивительным образом имеющиеся экспериментальные данные могут быть практически количественно объяснены в рамках этой элементарной модели.

2. Основные соотношения. В DMFT [5–7] собственно энергетическая часть одноэлектронной функции Грина $G(\mathbf{p}\varepsilon)$ является локальной, т.е. не зависящей от импульса. В условиях такой локальности и обычная, и холловская проводимость полностью определяются спектральной плотностью

$$A(\mathbf{p}\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^R(\mathbf{p}\varepsilon). \quad (1)$$

В частности, статическая проводимость имеет вид:

$$\sigma_{xx} = \frac{\pi e^2}{2\hbar a} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} \right)^2 A^2(\mathbf{p}\varepsilon), \quad (2)$$

¹⁾e-mail: sadovski@iep.uran.ru

а холловская проводимость [5]:

$$\sigma_{xy}^H = \frac{2\pi^2 e^3 a H}{3\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} \right)^2 \times \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_y^2} A^3(\mathbf{p}\varepsilon). \quad (3)$$

Здесь a – параметр решетки, $\varepsilon(\mathbf{p})$ – электронная дисперсия, $f(\varepsilon)$ – функция распределения Ферми, а H – напряженность магнитного поля вдоль оси z . Таким образом, коэффициент Холла:

$$R_H = \frac{\sigma_{xy}^H}{H\sigma_{xx}^2} \quad (4)$$

также полностью определяется спектральной плотностью $A(\mathbf{p}\varepsilon)$, которую мы далее будем находить в рамках DMFT [5–7]. Для решения эффективной однопримесной модели Андерсона в DMFT в данной работе использовался метод численной ренормгруппы (NRG) [8].

Мы провели достаточно обширные расчеты эффекта Холла для различных моделей исходного зонного спектра. Ниже, имея в виду сравнение с экспериментальными данными по YBCO, мы ограничимся результатами, полученными для двумерной модели электронного спектра в приближении сильной связи:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = -2t(\cos(p_x a) + \cos(p_y a)) - 4t' \cos(p_x a) \cos(p_y a). \quad (5)$$

В этой модели мы в дальнейшем рассмотрим два случая:

(1) модель с перескоком лишь на ближайших соседях ($t' = 0$) и полной электрон-дырочной симметрией;

(2) случай $t'/t = -0.4$, качественно соответствующий ситуации, наблюдаемой в YBCO.

Для других купратов следует использовать другие значения отношения t'/t .

В дальнейшем для используемых двумерных моделей статическая проводимость находилась в единицах универсальной двумерной проводимости $\sigma_0 = e^2/\hbar$, а холловская проводимость в единицах $e^3 a^2 H/\hbar^2$. Соответственно, коэффициент Холла (4) далее определялся в единицах a^2/e .

3. Результаты расчетов и сравнение с экспериментом. Для сильно коррелированных систем коэффициент Холла существенно зависит от температуры. При низкой температуре в таких системах в DMFT приближении наряду с нижней и верхней хаббардовскими зонами вблизи уровня Ферми формируется узкая квазичастичная зона – квазичастичный пик в плотности состояний. В допированном

дырками моттовском диэлектрике (далее мы будем рассматривать именно дырочное допирование) такой пик лежит вблизи верхнего края нижней хаббардовской зоны (см. рис. 1). Поэтому при низкой темпе-

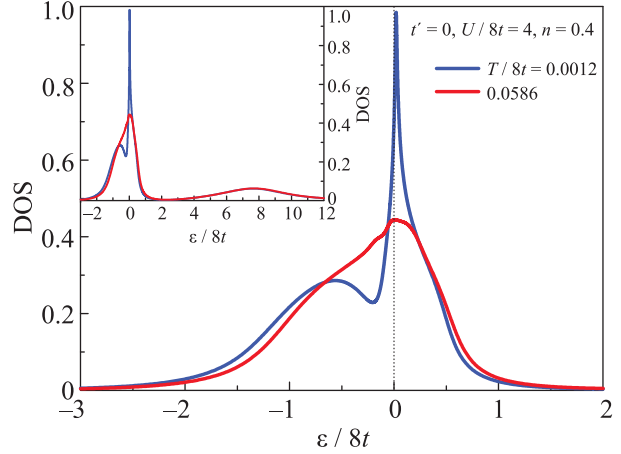


Рис. 1. (Цветной онлайн) Плотность состояний в допированном моттовском диэлектрике при различных температурах. Параметры модели Хаббарда приведены на рисунке, $8t$ – ширина исходной зоны (5). На вставке показана плотность состояний в широком интервале энергий, включающем верхнюю хаббардовскую зону

ратуре коэффициент Холла во многом определяется заполнением квазичастичной зоны. При высокой температуре (порядка или больше ширины квазичастичного пика) квазичастичный пик размывается и коэффициент Холла определяется заполнением нижней хаббардовской зоны. Таким образом, необходимо рассматривать два достаточно разных температурных режима для эффекта Холла.

В низкотемпературном режиме и ширина, и амплитуда квазичастичного пика зависят как от заполнения, так и от температуры. Рост температуры приводит к уширению квазичастичного пика и некоторому смещению уровня Ферми ниже максимума этого пика (см. рис. 1). Это может приводить к заметному падению коэффициента Холла, однако дальнейший рост температуры, размывая квазичастичный пик, приводит к росту этого коэффициента. Существенная зависимость квазичастичного пика от заполнения зоны в низкотемпературном режиме приводит к областям немонотонной зависимости коэффициента Холла от заполнения (см. рис. 2).

В высокотемпературном режиме квазичастичный пик размывает температурными поправками и фактически отсутствует. В этом случае глубоко в допированном дырками моттовском диэлектрике коэффициент Холла фактически определяется заполне-

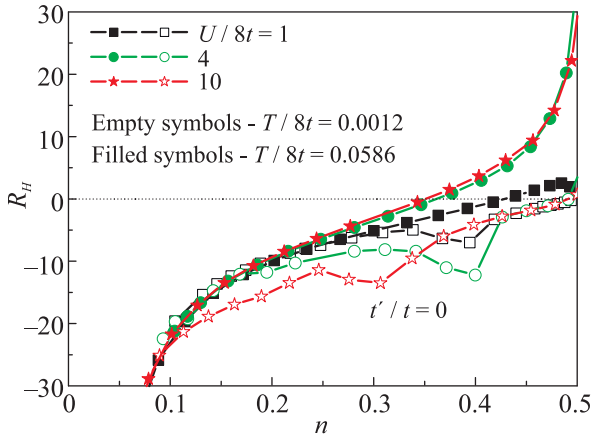


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость коэффициента Холла от заполнения зоны при низких (незаполненные символы) и при высоких (заполненные символы) температурах в двумерной модели электронного спектра (5) с перескоком лишь на ближайших соседей ($t'/t = 0$)

нием нижней хаббардовской зоны (верхняя находится существенно выше по энергии и практически не заполнена). В такой ситуации в модели с электрон-дырочной симметрией ($t' = 0$) оценка заполнения зоны, при котором происходит смена знака коэффициента Холла, может быть получена из качественных соображений. Будем рассматривать парамагнитную фазу $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = n$, так что n далее обозначает плотность электронов на одну проекцию спина, а их полная плотность равна $2n$. Естественно предположить, что смена знака коэффициента Холла происходит вблизи половинного заполнения нижней хаббардовской зоны $n_0 \approx 1/2$. Пусть мы рассматриваем состояния с проекцией спина “вверх”, тогда полное число состояний в нижней хаббардовской зоне есть $1 - n_{\downarrow} = 1 - n$. Тогда для заполнения зоны получаем $n = n_{\uparrow} = n_0(1 - n) \approx 1/2(1 - n)$. Таким образом, для заполнения, при котором происходит смена знака коэффициента Холла, получаем $n_c \approx 1/3$.

Этот же результат легко получается и в приближении Хаббард I, где функция Грина для электронов с проекцией спина “вверх” имеет вид [9]:

$$G_{\uparrow}^R(\varepsilon \mathbf{p}) = \frac{1 - n_{\downarrow}}{\varepsilon - \varepsilon_{-}(\mathbf{p}) + i\delta} + \frac{n_{\downarrow}}{\varepsilon - \varepsilon_{+}(\mathbf{p}) + i\delta}, \quad (6)$$

где $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{p})$ – спектр квазичастиц в верхней и нижней хаббардовских зонах. Видим, что в этом приближении число состояний с проекцией спина “вверх” в нижней хаббардовской зоне (первое слагаемое в (6)) действительно есть $1 - n_{\downarrow}$. При допировании дырками моттовского диэлектрика практически весь вклад в заполнение дает нижняя хаббардовская зона, поэтому:

$$\begin{aligned} n &= n_{\uparrow} \approx (1 - n_{\downarrow}) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{-}(\mathbf{p}) + i\delta} \right) = \\ &= (1 - n)n_0. \end{aligned} \quad (7)$$

Тогда при половинном заполнении нижней хаббардовской зоны $n_0 = 1/2$ происходит смена знака эффекта Холла (эффективной массы квазичастиц), так что снова получаем $n = n_c = 1/3$.

На рисунке 2 легко видеть, что высокотемпературное поведение коэффициента Холла в допированном моттовском диэлектрике ($U/2D = 4; 10$) в модели с полной электрон-дырочной симметрией ($t' = 0$) полностью подтверждает такую оценку. При заметном нарушении такой симметрии эта простейшая оценка перестает работать, поскольку даже в отсутствие корреляций смена знака эффекта Холла наблюдается не при половинном заполнении (см. рис. 3).

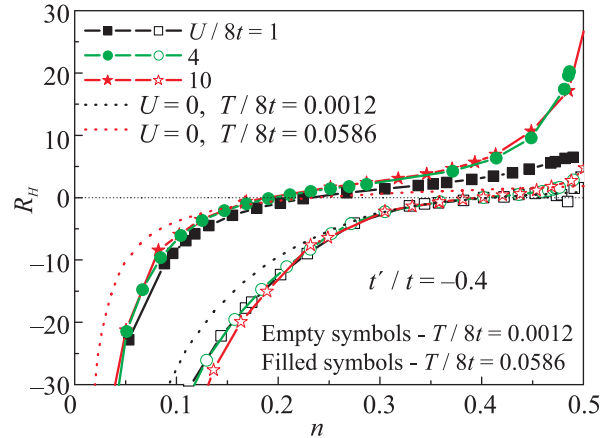


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость коэффициента Холла от заполнения зоны при низких (незаполненные символы) и при высоких (заполненные символы) температурах в двумерной модели электронного спектра (5) с перескоками между первыми и вторыми ближайшими соседями ($t'/t = -0.4$)

Необходимо отметить, что к размытию и исчезновению квазичастичного пика приводит не только рост температуры, но и разупорядочение [10, 12], а также псевдоцелевые флуктуации, которыми локальный подход DMFT полностью пренебрегает [11, 12]. Таким образом, область применимости приведенных выше простых оценок в условиях электрон-дырочной симметрии реально оказывается заметно шире.

На рисунке 4 показано сравнение результатов наших расчетов для холловского числа (холловской концентрации) $n_H = \frac{a^2}{|eR_H|}$ для достаточно типичных

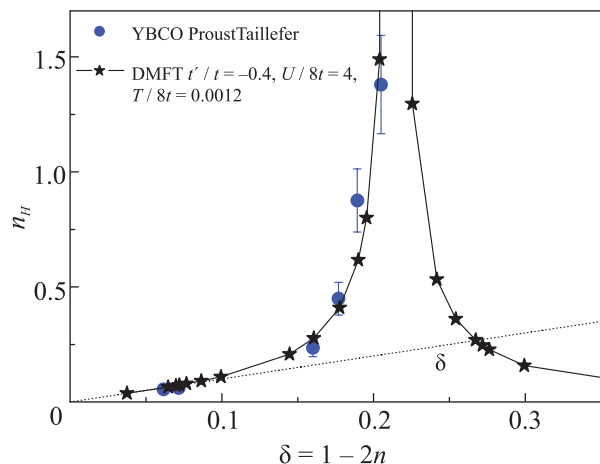


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость холловского числа n_H от степени легирования – сравнение с экспериментом [2] для YBCO, $\delta = 1 - 2n$ – концентрация дырок. Звездочки – результаты наших расчетов, синие кружки – эксперимент

значений параметров модели с экспериментальными данными по YBCO из работы [2]. Видим, что даже при этом достаточно произвольном выборе параметров, мы получаем практически количественное согласие с экспериментом, без всяких предположений о связи эффекта Холла с реконструкцией поверхности Ферми псевдощелью и близости к соответствующей квантовой критической точке, которые использовались в работах [2–4]. Достаточно очевидно, что аналогичные данные [3] для системы NLSCO могут быть интерпретированы в рамках нашей модели при соответствующем изменении параметров t/t' и U . Таким образом, оказывается, что интерпретация эффекта Холла в купратах на основе картины легирования нижней хаббардовской зоны моттовского диэлектрика может оказаться достаточно разумной альтернативой картине квантовой критической точки.

Было бы крайне интересно более детально изучить эффект Холла в окрестности критической концентрации, соответствующей смене знака коэффициента Холла (расходимости холловского числа). Для этого требуется исследовать системы (купраты), в которых такая смена знака возникает при изменении степени легирования.

4. Заключение. Мы исследовали поведение эффекта Холла в металлической фазе, возникающей при дырочном легировании (допировании) нижней хаббардовской зоны моттовского диэлектрика. Смена знака эффекта Холла и соответствующая ей расходимость холловского числа происходит в простейшем (симметричном) случае вблизи заполнения нижней хаббардовской зоны $n = 1/3$ в расчете на одну

проекцию спина или $2/3$ для полной плотности электронов, что соответствует дырочному легированию $\delta = 1 - 2n = 1/3$, но в общем случае она достаточно сильно зависит от выбора параметров модели. Эта концентрация возникает из простых качественных оценок и не связана с более сложными факторами, такими как изменение топологии поверхности Ферми или наличием квантовых критических точек.

Более чем удовлетворительное согласие полученных концентрационных зависимостей холловского числа с экспериментами на YBCO [2] показывает, что рассмотренная нами модель может быть достаточно разумной альтернативой картине эффекта Холла в окрестности квантовой критической точки, связанной с закрытием псевдощели [4].

Работа Э.З. Кучинского, Н.А. Кулеевой и М.В. Садовского выполнялась при частичной поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 20-02-00011. Работа Д.И. Хомского поддержана грантом DFG по проекту # 277146847 – CRC 1238.

1. F.F. Balakirev, J.B. Betts, A. Migliori, I. Tsukada, Y. Ando, and G.S. Boebinger, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 017004 (2009).
2. S. Badoux, W. Tabis, F. Laliberte, B. Vignolle, D. Vignolles, J. Beard, D.A. Bonn, W.N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud, L. Taillefer, and C. Proust, *Nature* **531**, 210 (2016).
3. C. Collignon, S. Badoux, S.A.A. Afshar, B. Michon, F. Laliberte, O. Cyr-Choiniere, J.-S. Zhou, S. Licciardello, S. Wiedmann, N. Doiron-Leyraud, and L. Taillefer, *Phys. Rev. B* **95**, 224517 (2017).
4. C. Proust and L. Taillefer, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **10**, 409 (2019).
5. Th. Pruschke, M. Jarrell, and J.K. Freericks, *Adv. Phys.* **44**, 187 (1995).
6. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M.J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
7. D. Vollhardt, in *Lectures on the Physics of Strongly Correlated Systems XIV*, ed. by A. Avella and F. Mancini, AIP Conference Proceedings, AIP, Melville, N.Y. (2010), v. 1297, p. 339; ArXiv: 1004.5069.
8. R. Bulla, T.A. Costi, and T. Pruschke, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 395 (2008).
9. D.I. Khomskii, *Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids*, Cambridge University Press, NY (2010).
10. E.Z. Kuchinskii, I.A. Nekrasov, M.V. Sadovskii, *ЖЭТФ* **133**, 670 (2008) [*JETP* **106**, 581 (2008)].
11. M.V. Sadovskii, I.A. Nekrasov, E.Z. Kuchinskii, Th. Pruschke, and V.I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **72**, 155105 (2005).
12. Э.З. Кучинский, И.А. Некрасов, М.В. Садовский, *УФН* **182**, 345 (2012) [*Phys.-Uspekhi* **55**, 325 (2012)].