

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ им. Л. Д. ЛАНДАУ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

Григорьев Павел Дмитриевич

**Особенности магнитосопротивления в слоистых квазидвумерных
проводниках**

Специальность 01.04.02 — Теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Черноголовка – 2015

Оглавление

Общее введение	6
1 Продольное межслоевое магнитосопротивление в слоистых сильно-анизотропных квазидвумерных металлах	17
1.1 Введение	17
1.2 Вычисления в пределе малого межслоевого интеграла перескока	20
1.2.1 Описание модели	20
1.2.2 Общие формулы для межслоевой проводимости в пределе малого межслоевого интеграла перескока	23
1.2.3 Предел сильного магнитного поля	25
1.2.4 Кроссовер между пределами слабого и сильного поля в продольном межслоевом магнитосопротивлении в самосогласованном борновском приближении	29
1.3 Продольное межслоевое магнитосопротивление при конечном межслоевом интеграле перескока	33
1.4 Сравнение с экспериментами по продольному межслоевому магнитосопротивлению и обсуждение	45
2 Магнитные квантовые осцилляции в сильно-анизотропных квазидвумерных металлах	52
2.1 Введение	52
2.2 Магнитные квантовые осцилляции межслоевой проводимости	58
2.2.1 Общие формулы для межслоевой проводимости	58
2.2.2 Самосогласованное борновское приближение: разложение по гармоникам	61

2.2.3	Магнитные осцилляции межслоевой проводимости. Медленные осцилляции и сдвиг фазы биений.	63
2.3	Сравнение с экспериментом и обсуждение	68
3	Угловая зависимость магнитосопротивления: некоторые ее особенности в сильно анизотропных слоистых квазидвумерных металлах и ее использование для определения закона дисперсии электронов	78
3.1	Введение	78
3.2	Определение параметров анизотропии закона дисперсии электронов в проводящих слоях по угловой зависимости магнитосопротивления в рамках стандартной теории	84
3.2.1	Связь между угловой зависимостью магнитосопротивления в тау-приближении и геометрией поверхности Ферми	84
3.2.2	Эллиптическая поверхность Ферми в проводящей плоскости	87
3.2.3	Разложение площади поперечного сечения по гармоникам	89
3.2.4	”Прямой” интеграл межслоевого перескока	93
3.2.5	Сильно зависящий от импульса ”косой” интеграл межслоевого перескока	96
3.2.6	Применение полученных формул для анализа экспериментальных данных и обсуждение	97
3.3	Отклонения от стандартной теории угловой зависимости магнитосопротивления	104
3.3.1	Влияние продольного межслоевого магнитосопротивления на его угловую зависимость	104
3.3.2	Другие, ”некогерентные” механизмы межслоевого электронного переноса, и их влияние на угловую и полевую зависимость магнитосопротивления	108
4	Магнитосопротивление в присутствии волны зарядовой/спиновой плотности	118
4.1	Введение	118
4.2	Фазовая диаграмма и микроскопическая структура волны зарядовой плотности (ВЗП) в магнитном поле	122
4.2.1	Введение	122
4.2.2	Модель	125

4.2.3	Модуляция ВЗП с одним волновым вектором (косинусоидальная фаза)	127
4.2.4	Волна зарядовой плотности с двумя волновыми векторами	130
4.2.5	Свободная энергия фаз ВЗП с одним и двумя волновыми векторами	132
4.2.6	Фазовая диаграмма	133
4.2.7	Обсуждение	143
4.3	Солитонная фаза волны плотности, обусловленная неидеальным нестигмом	150
4.4	Изменение анизотропии проводимости при переходе в состояние с частичной волной плотности	160
4.4.1	Однородная волна плотности с зависящей от импульса щелью	161
4.4.2	Определение микроскопической структуры волны плотности по скачку анизотропии проводимости ниже температуры перехода	168
4.5	Перестройка поверхности Ферми, вызванная волной плотности, и ее влияние на магнитосопротивление	172
4.5.1	Сильная зависимость эффективной массы электронов на поверхности Ферми от их импульса, измеряемая по магнитным квантовым осцилляциям	176
4.5.2	Дальнейшие перспективы. Дополнительный механизм рассеяния электронов из-за пространственно неоднородного магнитного пробоя.	185
5	Сверхпроводимость на фоне волны зарядовой или спиновой плотности	192
5.1	Введение	193
5.2	Сверхпроводящая неустойчивость на фоне однородной волны плотности . .	197
5.2.1	Модель	197
5.2.2	Пространственно однородная волна плотности с открытыми карманами на поверхности Ферми	199
5.2.3	Куперовская неустойчивость в металлической фазе квазиодномерных металлов	203
5.2.4	Возникновение сверхпроводимости на фоне однородной волны зарядовой плотности и температура такого сверхпроводящего перехода	206
5.3	Верхнее критическое магнитное поле H_{c2} в сверхпроводящем состоянии на фоне однородной волны зарядовой плотности	212
5.4	Сверхпроводимость на фоне однородной волны спиновой плотности (ВСП) .	217
5.4.1	Синглетное сверхпроводящее спаривание на фоне ВСП	218
5.4.2	Триплетное сверхпроводящее спаривание на фоне ВСП	219
5.4.3	Верхнее критическое поле	220

5.5	Сверхпроводимость на фоне солитонной фазы волны плотности	220
5.5.1	Температура перехода	221
5.5.2	Верхнее критическое поле сверхпроводимости на фоне солитонной фазы волны плотности	222
5.6	Заключение и обсуждение	225
Заключение		229
Приложения		233
A	Приложения к главе 1	233
A.1	Вывод независимости от квантовых чисел электронной собственно-энергетической части в приближении без пересечения примесных линий	233
A.2	Снятие вырождения уровней Ландау двумерных электронов точечными примесями	236
A.3	Основное состояние двумерных электронов в неоднородном магнитном поле	243
A.4	Вывод Ур. 1.51 для межслоевой проводимости	252
B	Приложения к главе 2	253
B.1	Влиянии осцилляций химического потенциала на эффект де Гааза - ван Альфена в сильно-анизотропных квазидвумерных металлах	253
B.2	Преобразование суммы по уровням Ландау в сумму по гармоникам	258
B.3	Отсутствие медленных осцилляций в намагниченности	259
B	Приложения к главе 3	261
B.1	Соотношение между разложениями по гармоникам геометрии поверхности Ферми и закона дисперсии	261
Список публикаций		263
Литература		266

Общее введение

Большинство активно изучаемых в настоящее время проводящих материалов, таких как высокотемпературные купратные и железосодержащие сверхпроводники, органические металлы, соединения редкоземельных элементов и тяжелофермионные соединения, как правило, характеризуются высокой анизотропией и наличием сильных электронных корреляций, и как следствие этого, конкуренцией различного типа упорядочений. Определение электронной структуры сильно-коррелированных электронных проводников является фундаментальной проблемой современной физики конденсированного состояния. Обычно, кристаллическая структура этих соединений состоит из проводящих молекулярных слоев толщиной порядка нанометра, разделенных диэлектрическими молекулярными слоями также толщиной $\sim 1\text{nm}$ (см. Рис. 1). Электроны могут туннелировать между проводящими слоями с конечной вероятностью, определяемой интегралом межслоевого перескока t_z . В приближении сильной связи (в первом порядке по t_z) в кристаллах с моноклинной (и выше) симметрией закон дисперсии квазичастиц в таком слоистом материале дается формулой

$$\epsilon(\mathbf{k}) \equiv \epsilon(k_x, k_y, k_z) = \epsilon(k_x, k_y) - 2t_z \cos(k_z d), \quad (1)$$

где $\mathbf{k} \equiv (k_x, k_y, k_z) = \mathbf{p}/\hbar$ – волновое число квазичастиц, d – межслоевое расстояние, $\epsilon(k_x, k_y)$ – закон дисперсии в проводящей плоскости. При этом сильная квазидвумерная анизотропия означает, что интеграл межслоевого перескока t_z мал по сравнению с характерными масштабами $\epsilon(k_x, k_y)$, в частности, по сравнению с энергией Ферми E_F в двумерном металлическом слое. Поверхность Ферми, соответствующая такому закону дисперсии, имеет вид гофрированного цилиндра с осью вдоль направления z .

Магнитное поле является традиционным и одним из самых эффективных инструментов для изучения электронной структуры проводящих материалов.[1, 2, 3, 4] Угловые и полевые зависимости магнитосопротивления и намагниченности, в особенности квантовые магнитные осцилляции, позволяют выявить даже тонкие детали электронной дисперсии и геометрии поверхности Ферми, причем часто именно эти тонкие детали оказываются определяющими в электронных свойствах. Например, свойство нестинга (вложения) и слабое искривление поверхности Ферми слоистых или цепочечных проводников может определять основное состояние типа волн зарядовой/спиновой плотности (ВЗП/ВСП). В отличие от многих других популярных методов, таких как фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES)[5] или сканирующая

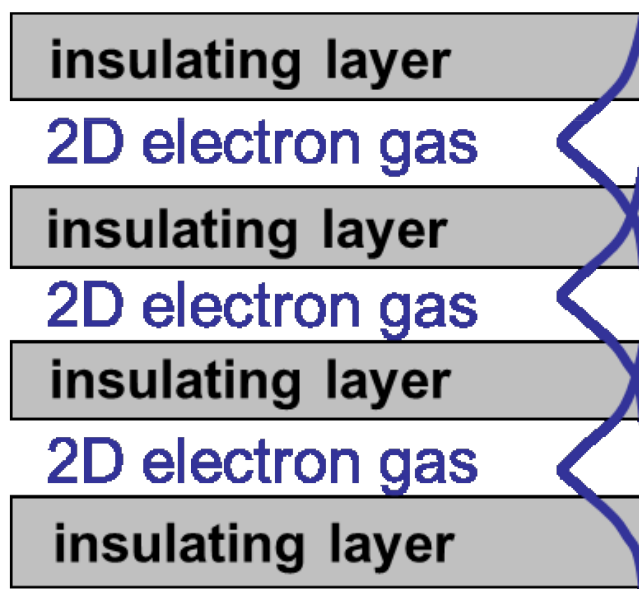


Рисунок 1: Схематическое изображение слоистого проводника. Проводящие двумерные слои, в которых находится двумерная электронная жидкость (белые прямоугольники), разделены изолирующими слоями (серые прямоугольники). Перекрытие волновых функций электронов из разных проводящих слоев (синие кривые) приводят к конечному межслоевому интегралу перескока t_z и к конечной межслоевой проводимости.

туннельная микроскопия (STM), метод сильного магнитного поля чувствителен не к поверхностным, а к внутренним свойствам материала.

В очень многих соединениях измерения ARPES затруднены или невозможны, например, из-за трудностей в получении атомно-гладких поверхностей. Погрешность измерений ARPES обычно достаточно велика и составляет в лучшем случае порядка 0.01эВ ; поэтому даже если измерения ARPES доступны, они не позволяют проследить многие важные эффекты, такие как тонкая перестройка поверхности Ферми, возникающая в результате различного рода фазовых переходов в электронной системе. Кроме этого, метод ARPES в силу своей специфики позволяет достаточно хорошо определять электронные свойства в сечении поверхности Ферми (ПФ), параллельном плоскости исследуемого образца, и не позволяет определить свойства ПФ в направлении, перпендикулярном данной плоскости.

Напротив, электронная проводимость в магнитном поле очень чувствительна к тонким эффектам и параметрам электронной структуры, включая перестройку поверхности Ферми. Кроме того, в отличие от ARPES, измерения электронной проводимости

технологически реализуемы практически для любых систем. Поэтому, хотя измерения проводимости и магнитосопротивления являются косвенным методом определения электронной структуры по сравнению с ARPES, подкрепленные теоретическими расчетами и моделями, они становятся очень ценным источником информации об электронной структуре соединений.

Исследования в сильном магнитном поле уже показали свою эффективность при изучении свойств органических металлов [6]-[13]. Недавнее обнаружение угловых и квантовых магнитных осцилляций в высокотемпературных сверхпроводниках открыло новый подход к исследованию данных материалов (см., например, статьи [14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23]), и показало существование вполне определенной поверхности Ферми в отличие от предсказаний предыдущих теоретических исследований. Это позволяет рассматривать высокотемпературные сверхпроводники во многих отношениях как анизотропный "плохой" металл с очень сильными электронными корреляциями. Информация о законе дисперсии квазичастиц в этих соединениях важна для понимания их физических свойств.

Для определения параметров электронной структуры из экспериментов по магнитосопротивлению необходимо надежное теоретическое описание этих явлений. Традиционно, для описания классической части магнитосопротивления в обычных (слабо анизотропных, или трехмерных) металлах используется кинетическое уравнение для электронов в тау-приближении.[1, 2, 3] Тау-приближение предполагает, что время свободного пробега электронов $\tau = const$, что обычно оправдано в трехмерных металлах при достаточно низкой температуре, когда остаточное сопротивление определяется только рассеянием на примесях, и в не слишком высоком магнитном поле, когда расстояние между уровнями Ландау много меньше зонных параметров и энергии Ферми. При этом обычно используются классические уравнения движения электронов, согласно которым в импульсном пространстве электроны двигаются под действием силы Лоренца вдоль изоэнергетических поверхностей в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.[1, 2, 3] При этом траектория электронов в реальном пространстве повторяет их траекторию в импульсном пространстве с поворотом на 90 градусов.[1, 2, 3]

В трехмерных металлах с заметной квазидвумерной анизотропией, у которых поверхность Ферми имеет форму гофрированного цилиндра, для сравнения теории и эксперимента по угловой зависимости классического магнитосопротивления (то есть зависимости межслоевой проводимости $\sigma_{zz} = 1/R_{zz}$ от угла наклона θ магнитного поля в пренебрежении квантовыми осцилляциями) используется численный расчет на

основе формулы Шокли (Shockley tube integral), выведенной в тау-приближении из полуклассических уравнений движения электронов [3]. В рамках этого приближения и в случае изотропного закона дисперсии в проводящей плоскости, количественное описание угловых осцилляций магнитосопротивления в квазидвумерных металлах может быть представлено формулой [24]

$$\sigma_{zz}(\theta) = \sigma_{zz}^0 \left\{ [J_0(\kappa)]^2 + 2 \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{[J_{\nu}(\kappa)]^2}{1 + (\nu\omega_c\tau)^2} \right\}, \quad (2)$$

где проводимость без магнитного поля σ_{zz}^0 дается Ур. (1.16) ниже, $J_n(x)$ – функция Бесселя порядка n , $\kappa \equiv k_F d \tan \theta$, $\hbar k_F$ – импульс Ферми вдоль проводящего слоя, d – межслоевое расстояние, $\omega_c \equiv eB_z/m^*c$ – циклотронная частота, τ – время свободного пробега электронов. Приближенно, в пределе сильного поля, это уравнение сводится к угловой зависимости межслоевого интеграла перескока t_z :

$$t_z(\theta) = t_z(0) J_0(k_F d \tan \theta). \quad (3)$$

При определенных направлениях магнитного поля θ_{Yam} , удовлетворяющих условию $J_0(k_F d \tan \theta) = 0$ и называемых углами Ямаджи, межслоевой интеграл перескока $t_z(\theta) = 0$ согласно Ур. (3). Геометрически при этих углах наклона поля площади циклотронных орбит в квазидвумерных металлах становятся почти независимыми от положения орбиты в k -пространстве [25]. Поскольку межслоевая проводимость $\sigma_{zz} \propto t_z^2$ в пределе малого t_z , межслоевое магнитосопротивление имеет резкие максимумы вблизи этих углов Ямаджи. Поскольку условие $J_0(k_F d \tan \theta) = 0$ почти периодически повторяется при изменении $\tan \theta$, это приводит к угловым осцилляциям магнитосопротивления. Ур. (3) также было подтверждено на основе квантово-механического вычисления в пределе, когда заполнено много уровней Ландау [28], однако оба этих вычисления [25, 28] пренебрегают рассеянием на примесях. Ур. (2) показывает, что Ур. (3) применимо для описания угловых осцилляций магнитосопротивления только в сильном магнитном поле, когда $\omega_c\tau \gg 1$. Согласно Ур. (2), угловые осцилляции магнитосопротивления являются сильными только при $\omega_c\tau \gtrsim 1$, а в слабом поле при $\omega_c\tau \ll 1$ они почти не заметны. Угловые осцилляции магнитосопротивления были открыты в 1988 году в слоистом квазидвумерном органическом металле β -(BEDT-TTF)₂IBr₂ [26].

Угловая зависимость межслоевого магнитосопротивления, описываемая Ур. (2), предполагает закон дисперсии электронов в Ур. (1), который имеет ряд ограничений: (1) он изотропен в проводящих слоях (в плоскости k_x, k_y), что не выполняется в кристаллах низшей категории кристаллической симметрии [27], например, в органических металлах;

(2) интеграл перескока t_z не зависит от импульса, что также не выполняется во многих квазидвумерных проводниках, например, в тяжелофермионном соединении Sr_2RuO_4 или в высокотемпературном купратном сверхпроводнике $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$. Кроме этого, Ур. (2) не учитывает (3) дополнительную угловую зависимость межслоевого магнитосопротивления, возникающую из-за продольного межслоевого магнитосопротивления $R_{zz}(B_z)$ в сильно-анизотропных слоистых проводниках, рассмотренного в главе 1; и (4) возможные другие "некогерентные" механизмы межслоевого переноса электронов, которые также будут приводить к другой угловой зависимости магнитосопротивления. В третьей главе мы рассмотрим влияние указанных эффектов.

Магнитные квантовые осцилляции проводимости в трехмерных металлах происходят в основном из-за осцилляции плотности электронных состояний $\rho(E)$ на уровне Ферми $E = E_F$, возникающие из-за квантования Ландау спектра электронов в магнитном поле.[1, 2, 3] В борновском приближении рассеяния электронов на короткодействующих (точечных) примесях, время рассеяния зависит от плотности состояний: $\tau = \tau(E) \propto 1/\rho(E)$. Это связывает квантовые осцилляции плотности состояний и металлическую проводимость σ вдоль магнитного поля при низкой температуре согласно формуле[29]

$$\sigma_i(T \rightarrow 0) = 2e^2 \sum_{\mathbf{k}} \tau v_i^2(\mathbf{k}) \delta[\varepsilon(\mathbf{k}) - E_F], \quad (4)$$

выведенной в рамках кинетического уравнения Больцмана. В этой формуле \mathbf{k} - импульс электронов, $v_i(\mathbf{k})$ - скорость электронов в направлении i , e - заряд электрона.

Даже в рамках кинетического уравнения Больцмана, лишь совсем недавно были открыты, объяснены и использованы для определения параметров электронной структуры такие эффекты, как медленные осцилляции [31, 32], сдвиг фазы биений квантовых осцилляций проводимости и намагниченности [33, 32], изложенные во второй главе диссертации.

В сильно анизотропных проводниках поверхность Ферми обычно обладает приближенным свойством "нестинга", когда два участка поверхности Ферми примерно совпадают после переноса на постоянный вектор (нестинга) в импульсном пространстве. В этом случае металлическое состояние не устойчиво (Пайерлсовская неустойчивость), что приводит к образованию волн зарядовой или спиновой плотности, температура перехода в которые может превышать комнатную. Антиферромагнитное упорядочение локализованных моментов тоже часто называют волной спиновой плотности, и она также влияет на проводящие свойства. Изучение волн плотности особенно важно для анизотропных соединений с сильными электронными корреляциями, таких как, например,

высокотемпературные сверхпроводники, тяжелофермионные соединения, и другие. При идеальном нестинге при возникновении волны плотности образуется энергетическая щель на всей поверхности Ферми, что переводит металл в изолятор [34, 35]. Однако обычно условие нестинга выполняется только приближенно, и возникающая щель волны плотности не может покрыть всю поверхность Ферми, и металлическая проводимость сохраняется даже в состоянии с волной плотности [34, 35, 36]. Кроме неидеального нестинга поверхности Ферми, волна зарядовой плотности может также частично подавляться сильным магнитным полем, которое из-за Зеемановского расщепления нарушает условие нестинга для одной из спиновых компонент электронов. Поведение магнитосопротивления в состоянии с волной плотности существенно отличается от его поведения в нормальном металлическом состоянии, что может быть использовано для экспериментального определения микроскопической электронной структуры соединения в состоянии с волной плотности. Этому вопросу посвящена четвертая глава диссертации. Кроме этого, свойства сверхпроводимости, возникающей на фоне волны зарядовой или спиновой плотности могут качественно отличаться от обычных сверхпроводящих свойств, чему посвящена пятая глава.

Настоящая диссертационная работа преследует следующие **цели**: 1) построение теории магнитосопротивления (его угловой и полевой зависимостей) и магнитных квантовых осцилляций в сильно анизотропных слоистых проводниках; 2) изучение влияния волн зарядовой/спиновой плотности при неидеальном нестинге (когда сохраняются металлические свойства) на магнитосопротивление и анизотропию проводимости; 3) исследование фазовой диаграммы и микроскопического состояния волн зарядовой плотности в сильном магнитном поле и/или при неидеальном нестинге ПФ; 4) изучение свойств сверхпроводимости, возникающей на фоне волны зарядовой или спиновой плотности.

Основные результаты диссертации, выносимые на защиту, сводятся к следующему:

1. Теоретически показано, что в квазидвумерных слоистых металлах возникает сильное продольное межслоевое магнитосопротивление $R_{zz}(B_z)$. В сильном магнитном поле B_z , когда расстояние между уровнями Ландау $\hbar\omega_c$ больше межслоевого интеграла перескока электронов t_z и уширения уровней $\Gamma_0 = \hbar/2\tau$ из-за рассеяния на примесях, это магнитосопротивление имеет корневую зависимость $R_{zz}(B_z) \propto \sqrt{B_z}$. В обратном пределе слабого поля $R_{zz}(B_z) \approx const$; в промежуточном интервале магнитного поля она близка к линейной: $R_{zz}(B_z) \propto B_z$.

2. Вычислены магнитные квантовые осцилляции продольного межслоевого магнитосопротивления в сильно анизотропных квазидвумерных металлах при $\hbar\omega_c \lesssim t_z$. В результате объяснены и исследованы новые качественные эффекты: медленные осцилляции магнитосопротивления и сдвиг фазы биений квантовых осцилляций магнитосопротивления относительно намагниченности. Показано, что (1) в отличие от обычных квантовых осцилляций, медленные осцилляции магнитосопротивления слабо затухают с увеличением температуры; (2) частота медленных осцилляций позволяет извлечь из эксперимента величину интеграла межслоевого перескока t_z ; (3) угловая зависимость этой частоты не монотонна и позволяет определить импульс Ферми электронов в проводящей плоскости.
3. В рамках стандартной теории получены новые аналитические и численные результаты для угловой зависимости магнитосопротивления и площади сечения поверхности Ферми квазидвумерных металлов с анизотропией в проводящей плоскости и различной симметрией. Предложены и исследованы отклонения от стандартной теории угловой зависимости магнитосопротивления, связанные с влиянием продольного межслоевого магнитосопротивления и с дополнительным "некогерентным" механизмом межслоевой проводимости через редкие локальные кристаллические дефекты.
4. Исследована микроскопическая структура и фазовая диаграмма волн зарядовой плотности (ВЗП) в сильном магнитном поле B , когда зеемановское расщепление больше или сравнимо с щелью ВЗП. С помощью разложения Гинзбурга-Ландау до членов четвертого порядка показано, что в сильном магнитном поле почти во всей области фазовой диаграммы (в координатах B - T) энергетически более выгодной оказывается ВЗП с двумя волновыми векторами и, соответственно, с косинусоидальной модуляцией параметра порядка.
5. Показано, что существует широкий класс исходного закона дисперсии электронов $\varepsilon(\mathbf{k})$, при котором возникает неоднородная (солитонная) фаза волны (зарядовой или спиновой) плотности (ВП). Исследована фазовая диаграмма ВП при неидеальном нестинге для разных видов закона дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$.
6. Исследовано изменение анизотропии проводимости при переходе в состояние с волной плотности (ВП) для различных микроскопических структур ВП. Объяснено возникновение анизотропии проводимости при переходе в ВП, наблюдаемое в

трителлуридах редкоземельных металлов. Показано, что изменение анизотропии проводимости при переходе в состояние с волной плотности (ВП) может дать информацию о зависимости энергетической щели ВП от импульса электронов и выявить неоднородную (солитонную) микроскопическую структуру ВП.

7. Изучено влияние перестройки поверхности Ферми (ПФ) из-за ВП на различные эффекты в магнитосопротивлении. Показано, что эта перестройка ПФ может привести к локальному (в импульсном пространстве) увеличению эффективной массы электронов, измеряемой по магнитным квантовым осцилляциям.
8. Изучены возможность появления и основные свойства сверхпроводимости на фоне волны плотности (ВП). Теоретически показано, что при неидеальном нестинге ПФ возможны как минимум две структуры микроскопического сосуществования сверхпроводимости и ВП. В каждом из этих двух сценариев показано, что (1) температура сверхпроводящего перехода T_c на фоне ВП может быть сравнима с T_c без ВП; (2) верхнее критическое поле H_{c2} сверхпроводимости на фоне ВП может в несколько раз превышать H_{c2} без ВП и имеет нестандартную зависимость от давления и температуры; (3) если куперовское спаривание возникает из-за независящего от спина (зарядового) электрон-электронного взаимодействия, то волна спиновой плотности подавляет спин-синглетную сверхпроводимость и почти не подавляет спин-триплетную.

Все результаты диссертационной работы получены впервые, её выводы обоснованы надежностью применявшихся аналитических методов и согласием с данными физических экспериментов и других теоретических исследований.

Проведено детальное сравнение всех перечисленных выше теоретических результатов с экспериментом, которое показало их применимость и пользу для описания электронной структуру реальных соединений. Полученные результаты являются достаточно общими и применимы ко многим слоистым проводникам, в частности к органическим металлам, гетероструктурам, природному и интеркалированному графиту, многим редкоземельным и тяжелофермионным соединениям, и в некоторых аспектах к высокотемпературным сверхпроводникам. Эти результаты впервые объяснили или предсказали многие довольно общие свойства сильно-анизотропных металлов, такие как (1) сильное продольное межслоевое монотонное магнитосопротивление; (2) медленные осцилляции и сдвиг фазы биений магнитосопротивления; (3) особенности угловой зависимости магнитосопротивления; (4) некоторые особенности проводимости в состоянии

с ВП; (5) сильное увеличение верхнего критического поля сверхпроводимости на фоне ВП. Предложенная микроскопическая структура состояния с волной плотности, сосуществующей со сверхпроводимостью, полезна для более глубокого понимания этого состояния и дальнейшего исследования его свойств.

Полученные результаты помогают определять электронную структуру различных слоистых проводников, важных с научной и практической точки зрения, по угловой и полевой зависимости магнитосопротивления, а также по изменению анизотропии проводимости при переходе в волну плотности. Например, предложенные в диссертации медленные осцилляции магнитосопротивления позволяют определять из эксперимента интеграл межслоевого перескока электронов t_z , который тяжело измерить другими способами. Полученное в диссертации существенное повышение верхнего критического поля сверхпроводимости на фоне волны плотности может оказаться важным для практического применения сверхпроводников.

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 2001 – 2015 годах в 22 научных работах, список которых приводится в конце диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, трёх приложений, списка публикаций и списка литературы. Все основные теоретические результаты диссертационной работы подробно сравниваются с экспериментом. Приведенные в диссертации теоретические расчеты впервые объяснили эксперименты, являвшиеся загадкой на протяжении нескольких десятков лет. Некоторые экспериментальные наблюдения возникли позже изложенной в диссертации теории, и таким образом являются подтверждением ее предсказаний.

В первой главе диссертации теоретически показано, что для сильно-анизотропных слоистых проводников в сильном магнитном поле τ -приближение с постоянным τ не применимо. Из-за этого возникает ряд качественных особенностей магнитосопротивления в квазидвумерных слоистых металлах, таких как сильное продольное межслоевое магнитосопротивление, противоречащее стандартной теории и подробно изучаемое в первой главе. Ранее, конечно, проводилась попытка выйти за пределы τ -приближения и рассмотреть теорию угловых [28, 57] и квантовых [68, 32] осцилляций магнитосопротивления в квазидвумерных металлах с помощью диаграммной техники Фейнмана. Однако в этих расчетах использовали независимую от энергии и магнитного поля или вычисленную в борновском приближении собственно-энергетическую часть электронной функции Грина, что в сильно анизотропном металле в достаточно сильном магнитном поле не применимо.

Вторая глава посвящена теории магнитных квантовых осцилляций

магнитосопротивления в сильно анизотропных квазидвумерных слоистых металлах, которая в отличие от традиционных и более ранних исследований учитывает, что интеграл межслоевого перескока электронов t_z в Ур. (1) может быть того же порядка величины, что и расстояние между уровнями Ландау $\hbar\omega_c$. В результате, предсказаны и исследованы новые качественные особенности магнитных квантовых осцилляций магнитосопротивления в сильно анизотропных квазидвумерных металлах, такие как медленные осцилляции магнитосопротивления и сдвиг фазы биений.

Третья глава посвящена теории угловых осцилляций магнитосопротивления. В разделе 3.2 получены новые полезные формулы в рамках стандартной теории магнитосопротивления и исследована область применимости широко используемых более ранних результатов. В разделе 3.3 исследуются отклонения от стандартной теории угловой зависимости магнитосопротивления. В частности, изучено влияние продольного межслоевого магнитосопротивления из главы 1. Также исследовано проявление незонных (или "некогерентных") механизмов межслоевой проводимости в угловой зависимости магнитосопротивления.

В четвертой главе изучается влияние волн зарядовой или спиновой плотности на электронную проводимость и магнитосопротивление. В разделе 4.2 исследована структура параметра порядка и фазовая диаграмма волны зарядовой плотности в сильном магнитном поле, которое из-за зеемановского расщепления нарушает условие нестинга для одной из спиновых компонент электронов. В разделе 4.3 будет исследована возможность, микроскопическая структура и фазовая диаграмма неоднородной волны зарядовой или спиновой плотности при неидеальном нестинге (так называемой солитонной фазы, см. обзоры [37, 38]). В разделах 4.4 и 4.5 будут исследованы электронная проводимость и магнитосопротивление в металлических состояниях с волной плотности, оставляющей часть электронов на уровне Ферми.

Пятая глава посвящена сверхпроводимости в состоянии с волной зарядовой или спиновой плотности. Будет исследовано, как меняются температура перехода и сверхпроводящие свойства на фоне волны плотности. В частности, будет показано, что волна плотности не обязательно экспоненциально уменьшает температуру сверхпроводящего перехода, как это следовало бы из наивных рассуждений, учитывающих только образование щели волны плотности. Иногда напротив, волна плотности может повысить температуру сверхпроводящего перехода, как это наблюдается в нескольких органических металлах, где имеется возможность подавить волну плотности повышением внешнего давления. Будет показано, что верхнее критическое поле сверхпроводимости

на фоне волны плотности может возрасть в несколько раз, даже если температура сверхпроводящего перехода на фоне волны плотности падает. Это связано с изменением закона дисперсии электронов на фоне волны плотности.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы диссертационной работы, выносимые на защиту.

В приложения вынесены громоздкие вычисления и изложение некоторых второстепенных вопросов.

Глава 1

Продольное межслоевое магнитосопротивление в слоистых сильно-анизотропных квазидвумерных металлах

1.1 Введение

Продольное магнитосопротивление – это зависимость сопротивления R_{zz} от величины магнитного поля B_z вдоль тока. В рамках тау-приближения и в пренебрежении квантовыми осцилляциями, продольное магнитосопротивление должно отсутствовать вдоль главных осей кристалла.[1, 2, 3] Однако, в сильно анизотропных металлах в сильном поле, когда расстояние между уровнями Ландау (УЛ) $\hbar\omega_c$ становится одного порядка величины или превышает интеграл межслоевого перескока t_z и ширину электронных уровней $\Gamma_0 \equiv \hbar/2\tau$ из-за рассеяния на примесях, тау-приближение становится не применимым. В данной главе методами диаграммной техники будет вычислено продольное межслоевое магнитосопротивление в сильном магнитном поле в слоистых квазидвумерных металлах. В частности, будет показано, что в пределе сильного магнитного поля, когда плотность электронных состояний от соседних уровней Ландау практически не пересекается, то есть при $\hbar\omega_c \gg t_z, \hbar/\tau$, межслоевое магнитосопротивление $R_{zz}(B_z) \propto \sqrt{B_z}$. Будут рассмотрены различные предельные и некоторые промежуточные случаи, определяемые соотношениями между $\hbar\omega_c$, t_z и $\Gamma_0 \equiv \hbar/2\tau$. В конце главы будет проведено сравнение полученных теоретических зависимостей с экспериментальными

данными.

В квазидвумерных металлах в сильном магнитном поле, когда $t_z \gtrsim \hbar\omega_c$, также появляются новые качественные черты в осцилляциях магнитосопротивления, например медленные осцилляции [31, 32] или сдвиг фазы биений квантовых осцилляций термодинамических и транспортных величин [33, 32], рассмотренные в следующей главе. Эти эффекты также не описываются стандартной теорией, изложенной в учебниках [1, 4, 3], потому что они появляются в более высоких (чем первый) порядках разложения по малому (в трехмерных, но не в квазидвумерных металлах) параметру $\hbar\omega_c/t_z$. Эти эффекты будут рассмотрены в следующей главе диссертации. В этой главе мы рассмотрим более грубый качественный эффект - монотонный рост продольного межслоевого магнитосопротивления, не описываемый стандартной теорией [1, 2, 3, 39]. Этот эффект наблюдается практически всегда в достаточно высоком поле в межслоевом магнитосопротивлении сильно анизотропных органических металлов [31, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48] и даже гетероструктур.[30]

Сначала продольное межслоевое магнитосопротивление $\bar{R}_{zz}(B_z)$ приписывали дополнительным "некогерентным" механизмам межслоевого электронного переноса, которые не сохраняют импульс электрона вдоль проводящих слоев. Например, к таким механизмам относятся межслоевое туннелирование через резонансные примеси или другие кристаллические дефекты,[49, 52] что в сочетании с переносом заряда вдоль плоскости приводит к продольному межслоевому магнитосопротивлению.[46] Также предлагался прыжковый механизм межслоевой проводимости в сочетании с переходом металл-изолятор,[50] или кулоновская блокада при межслоевом электронном туннелировании в пределе медленного растекания заряда вдоль слоя [88]. Однако, в экспериментах вместе с ростом $\bar{R}_{zz}(B_z)$ наблюдались также угловые осцилляции магнитосопротивления [51, 30], которые сохраняются только при обычном "когерентном" механизме межслоевого переноса и поэтому противоречат моделям в работах [46, 50]. Таким образом, монотонный рост продольного межслоевого магнитосопротивления $\bar{R}_{zz}(B_z)$ оставался загадкой до недавнего времени. При этом для поперечного магнитосопротивления теоретически предлагались разные зависимости $\bar{R}_{xx}(B_z)$, нередко сильно отличающиеся от стандартной.[53, 54, 55]

Дополнительный интерес к межслоевому магнитосопротивлению сильно анизотропных слоистых металлов связан с возможным кроссовером от трехмерной к почти двумерной электронной динамике, когда время межслоевого перескока $\tau_h = \hbar/t_\perp$ становится больше остальных характерных времен: среднего времени рассеяния τ и циклотронного периода $2\pi/\omega_c$. Этот кроссовер может изменить транспортные свойства различных слоистых

проводников: органических металлов, гетероструктур, сверхпроводящих купратов и пниктидов, и др. Рассеяние на кристаллических дефектах является одним из наиболее часто обсуждаемых механизмов нарушения межслоевого зонного переноса в слоистых проводниках. Если время рассеяния τ меньше времени межслоевого перескока $\tau_h = \hbar/t_\perp$, квазиимпульс носителей заряда и их поверхность Ферми хорошо определены только внутри проводящих слоев, то есть становятся двумерными. Однако, межслоевое туннелирование электронов при этом может быть "когерентным", то есть сохраняющим импульс вдоль проводящего слоя. Такой режим в литературе называют "слабо некогерентным" [56, 57]. Вопрос о том, отличается ли этот "слабо некогерентный" режим от обычного трехмерного электронного переноса, активно изучался как теоретически [56, 57, 52, 63], так и экспериментально [42, 46, 47, 51, 64, 65, 66, 48]. На данный момент, какие-либо существенные качественные различия между трехмерным и "слабо некогерентным" режимами не наблюдались и не были предложены. Единственное предсказанное существенное отличие в "слабо некогерентном" режиме – это отсутствие узкого "пика когерентности" на угловой зависимости магнитосопротивления, когда магнитное поле направлено вдоль проводящих слоев [56, 57]. Однако, отсутствие даже этой тонкой детали в "слабо некогерентном" режиме пока не получило надежного подтверждения. Поэтому, на протяжении долгого времени считается, [56, 57, 18, 52, 58] что "слабо некогерентный" режим межслоевого сопротивления $\rho_\perp(T)$ практически идентичен трехмерному с сильной анизотропией.

Другой возможный механизм размерного кроссовера связан с внешним магнитным полем B . [67] Например, поведение магнитных квантовых осцилляций (МКО) существенно изменяется [4, 33, 32, 31, 68, 50, 59, 6] когда циклотронная частота $\omega_c = eB/m^*c$ становится больше скорости межслоевого туннелирования τ_h^{-1} . Однако, существовавшие теории не предсказывали существенных изменений в электронной динамике при малом, но когерентном электронном межслоевом туннелировании, если конечно не включаются дополнительные механизмы межслоевого электронного переноса, например, такие как прыжки через резонансные примесные состояния [49, 52, 46] или межслоевые прыжки с поглощением/испусканием возбуждений. [54, 55]

Ниже мы покажем, что параметр $b_* \equiv \hbar\omega_c/t_\perp$ определяет кроссовер между двумя качественно различными режимами межслоевого магнитосопротивления. Эти различия не могут быть объяснены простым продолжением формул, полученных в работах [32, 68] [см. Ур. (2.32) и (2.33), выведенные в пределе $b_* \equiv \hbar\omega_c/t_\perp \lesssim 1$], на область $b_* \gg 1$. Можно назвать этот новый режим $\hbar\omega_c \gg t_\perp$ "слабо когерентным": он подразумевает

сохранение импульса вдоль проводящей плоскости при туннелировании электрона между слоями [см. туннельный член в Гамильтониане в Ур. (1.4)], но время этого туннелирования намного дольше циклотронного периода. Заметим, что введенный параметр $b_* \equiv \hbar\omega_c/t_\perp$, определяющий кроссовер между "когерентным" и "слабо когерентным" поведениями межслоевого магнитосопротивления, принципиально отличается от параметра $\hbar/t_\perp\tau$, используемого в работах [56, 57] чтобы разделить "когерентный" и "слабо некогерентный" режимы. Тем не менее соединения, удовлетворяющие условию "слабо некогерентного" режима, могут быть переведены в "слабо когерентный" режим при увеличении магнитного поля до $\omega_c\tau > 1$.

Основной материал этой главы соответствует статьям 1-5 в списке публикаций диссертанта, а приложения А.2 и А.3 к этой главе соответствуют статьям 6 и 7 в этом списке.

1.2 Вычисления в пределе малого межслоевого интеграла перескока

1.2.1 Описание модели

В металле с большой концентрацией электронов и слабым электрон-электронным взаимодействием, даже при низкой температуре сохраняется металлическое состояние, описываемое в рамках теории Ферми жидкости. В этом случае, электронную систему можно описывать в рамках одночастичного приближения с перенормированным законом дисперсии электронов. Тогда Гамильтониан электронов в слоистом металле содержит 3 главных члена:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_t + \hat{H}_I. \quad (1.1)$$

Первый член \hat{H}_0 описывает двумерный электронный газ на каждом слое в магнитном поле:

$$\hat{H}_0 = \sum_{m,j} \varepsilon_{2D}(m) c_{m,j}^+ c_{m,j}, \quad (1.2)$$

где $\{m\} = \{n, k_y\}$ есть набор квантовых чисел электрона в магнитном поле в калибровке Ландау в двумерном слое, $c_{m,j}^+$ ($c_{m,j}$) – операторы рождения (уничтожения) электронов в состоянии $\{m\}$ на слое с номером j , а $\varepsilon_{2D}(m)$ – закон дисперсии электронов:

$$\varepsilon_{2D}(n, k_y) = \varepsilon_{2D}(n) = \hbar\omega_c (n + 1/2). \quad (1.3)$$

Второй член в Ур. (1.1) описывает туннелирование электронов между соседними проводящими слоями:

$$\hat{H}_t = 2t_z \sum_j \int d^2\mathbf{r} [\Psi_j^\dagger(\mathbf{r})\Psi_{j-1}(\mathbf{r}) + \Psi_{j-1}^\dagger(\mathbf{r})\Psi_j(\mathbf{r})], \quad (1.4)$$

где $\Psi_j(\mathbf{r})$ и $\Psi_j^\dagger(\mathbf{r})$ – операторы рождения (уничтожения) электронов на слое j в точке \mathbf{r} двумерного координатного пространства. Такой Гамильтониан межслоевого туннелирования в литературе часто называют ”когерентным”, поскольку он сохраняет координатную зависимость волновой функции и, следовательно, импульс электронов вдоль проводящих слоев.

Последний третий член в Ур. (1.1)

$$\hat{H}_I = \sum_i V_i(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.5)$$

описывает потенциал примесей, или беспорядок. В дальнейшем расчете рассматриваются короткодействующие (для простоты, точечные) примеси с объемной концентрацией n_i и двумерной концентрацией $N_i = n_i d$ на каждом слое. Распределения примесей на разных слоях на разных слоях не коррелированы. Потенциал $V_i(\mathbf{r})$ каждой примеси в точке \mathbf{r}_i дается выражением

$$V_i(\mathbf{r}) = U \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (1.6)$$

Удобно также ввести двумерный аналог потенциала точечной примеси:

$$V_i(x, y) = V_0 \delta(x - x_i) \delta(y - y_i), \quad (1.7)$$

где

$$V_0 = U |\psi(z_i)|^2 \approx U/d. \quad (1.8)$$

В случае разных типов примесей, сумма по i в Ур. (1.5) включает также разные типы примесей, отличающиеся силой примесного потенциала U в Ур. (1.6). В слоистых металлах основной вклад в рассеяние и магнитосопротивление вносят примеси внутри проводящих слоев, где $|\psi(z_i)|^2$ максимально. Примесный потенциал в Ур. (1.5)-(1.7) близок к беспорядку с коррелятором типа ”белый шум” в пределе большой концентрации примесей, используемому в точно решаемых моделях для электронов на нулевом уровне Ландау.[75]

Обычно, при описании электронной системы, сначала рассматривают первые два члена \hat{H}_0 и \hat{H}_t , которые в приближении сильной связи приводят к хорошо известному

косинусоидальному закону дисперсии электронов:

$$\epsilon_{3D}(\mathbf{k}) \approx \epsilon_{2D} - 2t_z \cos(k_z d), \quad (1.9)$$

где d – межслоевое расстояние, а ϵ_{2D} дается Ур. (1.3). Рассеяние на примесях, описываемое последним членом \hat{H}_I в Гамильтониане (1.1), обычно учитывается по теории возмущений, например, в борновском приближении [68] или в самосогласованном борновском приближении (см. раздел 1.3 ниже). Однако, в случае очень малого межслоевого интеграла перескока $t_z \ll \Gamma_0$, уширение уровней Ландау (УЛ) из-за рассеяния на примесях больше, чем из-за межслоевого перескока. Поэтому, в пределе $t_z \ll \Gamma_0, \hbar\omega_c$, межслоевой интеграл перескока t_z может рассматриваться как малое возмущение для стопки проводящих слоев в магнитном поле. Это также подтверждается прямыми расчетами при конечном t_z , проведенными в следующем разделе 1.3, или сравнением полученного Ур. (1.20) с Ур. (19)-(21) статьи [68]. Соответственно, в качестве нулевого приближения по t_z можно взять двумерный электронный газ в магнитном поле в потенциале точечных примесей, который активно изучался с 70-ых годов двадцатого века.[72, 73, 74, 75, 76, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84] В самосогласованном борновском приближении, усредненная по беспорядку функция Грина электронов в координатном представлении

$$\langle G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \varepsilon) \rangle = \sum_{n, k_y} \Psi_{n, k_y}^{0*}(r_2) \Psi_{n, k_y}^0(r_1) G(\varepsilon, n), \quad (1.10)$$

где $\Psi_{n, k_y}^0(r_1)$ – это двумерные волновые функции в перпендикулярном слое магнитном поле,[93] а функции Грина электронов $G(\varepsilon, n)$ в представлении квантовых чисел $\{m\} = \{n, k_y\}$ не зависят от k_y (см. Приложение А.1):

$$G(\varepsilon, n) = \frac{1}{\varepsilon - \hbar\omega_c(n + 1/2) - \Sigma(\varepsilon)}, \quad (1.11)$$

где $\Sigma(\varepsilon)$ – собственная энергетическая часть электронов из-за рассеяния на примесях. Угловые скобки в Ур. (1.10) и далее означают усреднение по беспорядку.

Уравнения (1.10) и (1.11) остаются в силе и в более общем "non-crossing" приближении, учитывающем все диаграммы без пересечения примесных линий и обобщающем самосогласованное борновское приближение заменой борновской амплитуды рассеяния на одной примеси на точную (см. приложение А.1). В трехмерных металлах диаграммы с пересечением примесных линий малы по параметру $\hbar/E_F\tau$. В двумерном электронном газе в магнитном поле вклад диаграмм с пересечением примесных линий мал по параметру $1/n_{LL}^F \approx \hbar\omega_c/E_F$, где n_{LL}^F число заполненных уровней Ландау.[73] Ниже мы будем

рассматривать предел, когда заполнено много уровней Ландау, то есть предел $n_{LL}^F \approx E_F/\hbar\omega_c \gg 1$. Кроме этого, конечный межслоевой интеграл перескока играет очень важную роль в подавлении эффектов локализации. Поэтому можно считать электронную систему Ферми жидкостью и не учитывать сложные для теоретического описания и редко наблюдаемые явления, связанные с дробным квантовым эффектом Холла [76, 90].

Вышеизложенная модель и последующие вычисления также предполагают магнитное поле однородным. В случае неоднородного (зависящего от координаты) магнитного поля задача определения электронных уровней и функций Грина оказывается намного сложнее (см., например, раздел 4 статьи [83]). Однако, в некоторых частных случаях, когда магнитное поле зависит только от одной координаты, можно точно определить энергию основного состояния двумерного электронного газа в таком магнитном поле (см. Приложение А.3).

1.2.2 Общие формулы для межслоевой проводимости в пределе малого межслоевого интеграла перескока

Во втором, то есть в минимальном неисчезающем порядке по t_z , межслоевая проводимость σ_{zz} системы с Гамильтонианом в Ур. (1.4), может быть записана с помощью формулы Кубо и формализма, развитого для контактов металл-изолятор-металл.[29] По аналогии с Ур. (44) статьи [57], при конечной температуре T межслоевая проводимость[97]

$$\sigma_{zz} = \int d\varepsilon [-n'_F(\varepsilon)] \sigma_{zz}(\varepsilon), \quad (1.12)$$

где производная функции распределения Ферми

$$-n'_F(\varepsilon) = -1/\{4T \operatorname{ch}^2[(\varepsilon - \mu)/2T]\}, \quad (1.13)$$

а проводимость при нулевой температуре и энергии ε

$$\sigma_{zz}(\varepsilon) = \frac{8e^2 t_z^2 d}{\hbar L_x L_y} \int \frac{d^2 \mathbf{r} d^2 \mathbf{r}'}{2\pi} \langle \operatorname{Im} G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', j, \varepsilon) \operatorname{Im} G_R(\mathbf{r}', \mathbf{r}, j+1, \varepsilon) \rangle. \quad (1.14)$$

Эффекты электрон-электронного (e-e) взаимодействия, часто играющие важную роль при туннелировании электронов (см. например, [88, 89]), можно по-прежнему не учитывать в металлическом пределе при $n_{LL}^F \approx E_F/\hbar\omega_c \gg 1$, когда радиус локализации электронных состояний велик [87] и время растекания (диффузии) заряда в проводящем слое мало.

Угловые скобки в Ур. (1.14), как и в Ур. (1.10), означают усреднение по беспорядку. Распределения примесей на соседних слоях не коррелированы, а возможные примеси

между слоями согласно Ур. (1.8) дают малый вклад в рассеяние из-за малости волновых функций электронов между слоями. Следовательно, усреднение по беспорядку в Ур. (1.14) можно проводить не зависимо на разных слоях [98]. Усредненная по беспорядку функция Грина на каждом слое инвариантна по отношению к однородным смещениям и зависит только от разности координат: $\langle G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', j, \varepsilon) \rangle = \langle G_R(\mathbf{r} - \mathbf{r}', j, \varepsilon) \rangle$. Следовательно, в Ур. (1.14) можно проинтегрировать по $\mathbf{r} + \mathbf{r}'$, что сокращает размер образца $L_x L_y$:

$$\sigma_{zz}(\varepsilon) = \frac{4\sigma_0\Gamma_0}{\pi\nu_{2D}} \int d^2\mathbf{r} \langle \text{Im}G_R(\mathbf{r}, j, \varepsilon) \rangle \langle \text{Im}G_R(\mathbf{r}, j+1, \varepsilon) \rangle, \quad (1.15)$$

где мы ввели проводимость в отсутствие магнитного поля

$$\sigma_0 = e^2 t_z^2 \nu_{2D} d / \hbar \Gamma_0, \quad (1.16)$$

$\nu_{2D} = 2g_{LL}/\hbar\omega_c = m^*/\pi\hbar^2$ – двумерная плотность состояний на уровне Ферми в отсутствие магнитного поля с учетом двух компонент спина, а $g_{LL} = eB_z/2\pi\hbar c$ – это вырождение одного уровня Ландау на единицу площади.

В перпендикулярном слоям магнитном поле $B = B_z$ координатная зависимость усредненных функций Грина электрона на соседних слоях совпадает (в третьей главе мы рассмотрим наклонное магнитное поле, где это уже не будет верно). Тогда интегрирование по \mathbf{r} для функций Грина, записанных в виде (1.10), выполняется просто и дает множитель g_{LL} :

$$\sigma_{zz}(\varepsilon) = \frac{2\sigma_0\Gamma_0\hbar\omega_c}{\pi} \sum_n |\text{Im}G_R(\varepsilon, n)|^2. \quad (1.17)$$

В пределе слабого магнитного поля суммирование по n может быть заменено интегрированием, которое после подстановки Ур. (1.11) в Ур. (1.17) и (1.12) легко выполняется и дает

$$\sigma_{zz}(B) = \sigma_0\Gamma_0 / |\text{Im}\Sigma(\mu, B)| \quad (1.18)$$

в согласии со стандартной теорией.

В общем случае, подставляя Ур. (1.11) в Ур. (1.17) и вводя обозначения

$$\alpha \equiv 2\pi(\varepsilon - \text{Re}\Sigma(\varepsilon))/\hbar\omega_c, \quad \gamma \equiv 2\pi|\text{Im}\Sigma(\varepsilon)|/\hbar\omega_c, \quad (1.19)$$

для суммы по n в Ур. (1.17) получаем

$$\frac{\sigma_{zz}(\varepsilon)}{\sigma_0} = \frac{\Gamma_0}{|\text{Im}\Sigma(\varepsilon)|} \left[\frac{|\text{sh}\gamma|}{\text{ch}\gamma + \cos\alpha} - \gamma \frac{\cos\alpha \text{ch}\gamma + 1}{[\text{ch}\gamma + \cos\alpha]^2} \right] \quad (1.20)$$

в согласии с Ур. (19)-(21) статьи [68], которые были выведены в рамках трехмерного сильно анизотропного закона дисперсии электронов в Ур. (1.9), а не из модели двух слоев, описанной в Ур. (1.1)-(1.5). Это в очередной раз подтверждает эквивалентность этих двух подходов в пределе $t_z \ll \hbar\omega_c$.

1.2.3 Предел сильного магнитного поля

$$\Sigma = \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots$$

Рисунок 1.1: Набор диаграмм для неприводимой собственно-энергетической части функции Грина электрона, соответствующий Ур. (1.21). Двойная сплошная линия обозначает точную функцию Грина, которая содержит собственно-энергетическую часть Σ . Решение соответствующего самосогласованного уравнения эквивалентно суммированию всех диаграмм без пересечения примесных линий, обозначенных на рисунке пунктиром.

В сильном магнитном поле, когда $\hbar\omega_c \gg \Gamma_0 = \pi n_i U^2 \rho_{3D} = \pi N_i V_0^2 g_{LL} / \hbar\omega_c = \hbar/2\tau_0$, можно рассматривать каждый уровень Ландау независимо от других, поскольку рассеяние на примеси не может перебросить электрон на другой уровень Ландау (УЛ). Тогда собственно энергетическая часть Σ в электронной функции Грина в Ур. (1.11), получаемая суммированием всех диаграмм без пересечения примесных линий, дается формулой [72, 86]

$$\Sigma(\varepsilon) = \frac{n_i U}{1 - UG(\varepsilon)}, \quad (1.21)$$

Система двух уравнений (1.11) и (1.21) сводится к решению квадратного алгебраического уравнения [72], которое дает функцию Грина в виде

$$G(E, n) = \frac{E + E_g(1 - c_i) - \sqrt{(E - E_1)(E - E_2)}}{2EE_g}, \quad (1.22)$$

а плотность состояний (ПС) на каждом УЛ описывается функцией [72]

$$\frac{-\text{Im}G(E, n)}{\pi} = D(E) = \frac{\sqrt{(E - E_1)(E_2 - E)}}{2\pi |E| E_g}, \quad (1.23)$$

где электронная энергия E отсчитывается от последнего заполненного УЛ: $E \equiv \varepsilon - \epsilon_{2D}(n_F)$, $E_g = g_{LL}V_0$, где V_0 дается Ур. (1.8), а вырождение УЛ $g_{LL} = 1/2\pi l_{Hz}^2 = eB/2\pi\hbar c$. Границы УЛ в Ур. (1.23) даются выражениями

$$E_1 = E_g(\sqrt{c_i} - 1)^2, \quad E_2 = E_g(\sqrt{c_i} + 1)^2, \quad (1.24)$$

где c_i – это безразмерная концентрация примесей, равная отношению концентрации примесей к концентрации электронов на одном УЛ:

$$c_i = N_i/g_{LL} = 2\pi l_{Hz}^2 n_i d. \quad (1.25)$$

Функция $D(E)$ в Ур. (1.23) ненулевая при $0 < E_1 < E < E_2$ и нормирована на единицу: $\int D(E) dE = 1$. Полуширина УЛ

$$\Gamma_B \equiv (E_2 - E_1)/2 = 2E_g \sqrt{c_i} = \sqrt{4\hbar\omega_c \Gamma_0/\pi} \propto \sqrt{B} \quad (1.26)$$

в Ур. (1.23) в сильном поле много больше Γ_0 и растет с ростом поля, что подчеркивает индекс "B".

Можно вычислить функцию Грина и ПС в двумерной модели (1.1)-(1.7) также для различного распределения примесей перпендикулярно слоям, что определяет хвосты плотности состояний вдали от УЛ и играет важную роль для снятия вырождения УЛ в инверсионных слоях и на плоских границах раздела диэлектриков (см. Приложение А.2). Однако монотонная часть межслоевой проводимости определяется не этими хвостами ПС, а ее основным максимумом.

Подставляя Ур. (1.23) в Ур. (1.17) получаем

$$\sigma_{zz}(E) = \frac{2\sigma_0 \Gamma_0 \hbar\omega_c}{\pi} \sum_n \left(\frac{\sqrt{(E - E_1)(E_2 - E)}}{2|E| E_g} \right)^2, \quad (1.27)$$

где $E \equiv \mu - \varepsilon_{2D}(n_F, k_y)$, а у квадратного корня берется только действительная часть, которая не равна нулю в интервале $E_1 < E < E_2$. При достаточно высокой температуре, то есть при $\mu \gg T \gg \hbar\omega_c$, интегрирование по энергии в Ур. (1.12) эквивалентно усреднению по периоду $\hbar\omega_c$ квантовых осцилляций. Длинноволновая пространственная неоднородность образца, эквивалентная локальному сдвигу энергии Ферми электронов, также приводит к усреднению по периоду квантовых осцилляций. Монотонная часть проводимости $\bar{\sigma}_{zz}$ может быть получена усреднением Ур. (1.27) по периоду $\hbar\omega_c$ квантовых осцилляций:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{zz} &= \int_{E_1}^{E_2} \sigma_{zz}(E) dE / \hbar\omega_c \\ &= \frac{\sigma_0 \Gamma_0}{\pi E_g^2} \left[\frac{E_2 + E_1}{2} \ln \left(\frac{E_2}{E_1} \right) + E_1 - E_2 \right] \\ &= \frac{4\sigma_0 \Gamma_0}{\pi E_g} \left[\frac{1 + c_i}{2} \ln \left(\frac{\sqrt{c_i} + 1}{\sqrt{c_i} - 1} \right) - \sqrt{c_i} \right]. \end{aligned} \quad (1.28)$$

В пределе $c_i \gg 1$, соответствующем самосогласованному борновскому приближению, это выражение упрощается после разложения по малому параметру $1/c_i$ до первого не исчезающего члена:

$$\bar{\sigma}_{zz} \approx \frac{16\sigma_0\Gamma_0}{3\pi E_g\sqrt{c_i}} = \frac{16\sigma_0}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{\Gamma_0}{\hbar\omega_c}} = \frac{16}{3\sqrt{2\pi}} \frac{\sigma_0}{\sqrt{\omega_c\tau}}. \quad (1.29)$$

Межслоевая проводимость в Ур. (1.29) уменьшается с ростом поля: $\bar{\sigma}_{zz} \propto B^{-1/2}$. Это означает важный и новый качественный эффект, что в сильном магнитном поле в сильно анизотропных квазидвумерных металлах, когда $\hbar\omega_c \gg t_z, \Gamma_0$, возникает продольное межслоевое магнитосопротивление

$$R_{zz}(B_z) \propto \sqrt{B_z}. \quad (1.30)$$

Еще раз заметим, что в рамках тау-приближения, в металлах с достаточной кристаллической симметрией и без магнитного порядка продольное магнитосопротивление отсутствует.[2] Следовательно, для полученной в Ур. (1.30) зависимости необходимо было выйти за рамки тау-приближения. Можно показать, что учет рассеяния на примесях в рамках обычного борновского приближения также не приводит к корневой зависимости магнитосопротивления. Чтобы получить эту корневую зависимость магнитосопротивления, необходимо учесть рассеяние на примесях по крайней мере в самосогласованном борновском приближении (СБП) (см. Рис. 2.1), которое в пределе высокой концентрации примесей $c_i \gg 1$ совпадает с приближением, учитывающем все Фейнмановские диаграммы без пересечения примесных линий (в крестовой технике). В СБП, вместо Ур. (1.21) для собственно энергетической части Σ в электронной функции Грина в Ур. (1.11), мы имеем

$$\Sigma(\varepsilon) - n_i U = n_i U^2 G(\varepsilon) = \Gamma_0 g(\varepsilon), \quad (1.31)$$

где как и раньше $\Gamma_0 = \pi n_i U^2 \nu_{3D} = \pi n_i U^2 g_{LL}/d\hbar\omega_c$, а нормированная функция Грина $g(\varepsilon)$ определена в Ур. (1.37). Ниже мы не будем учитывать постоянный сдвиг энергии $n_i U$ в Ур. (1.31), который не влияет на проводимость и другие наблюдаемые величины. Ур. (1.11) и (1.31) также приводят к квадратному уравнению на функцию Грина или на $\text{Im}\Sigma$, решение которого дает плотность состояний одного УЛ

$$D(E) = -\frac{\text{Im}G(E)}{\pi} = \frac{\sqrt{4\hbar\omega_c\Gamma_0/\pi - E^2}}{2\Gamma_0\hbar\omega_c}, \quad (1.32)$$

совпадающую с ПС в Ур. (1.23) в пределе высокой концентрации примесей $c_i \gg 1$. ПС в Ур. (1.32) ненулевая при $|E| < \Gamma_B \equiv \sqrt{4\hbar\omega_c\Gamma_0/\pi}$, то есть ширина УЛ такая же, как и в Ур.

(1.26). Подставляя Ур. (1.32) в Ур. (1.17), усредняя по периоду $\hbar\omega_c$ магнитных квантовых осцилляций, получаем

$$\begin{aligned}\sigma_{zz} &= \frac{2\sigma_0\Gamma_0}{\pi} \left(\frac{\pi}{2\Gamma_0\hbar\omega_c} \right)^2 \int_{-E_1}^{E_1} d\varepsilon [\Gamma_B^2 - (\Delta\varepsilon)^2] \\ &= \frac{\sigma_0\Gamma_0}{\pi} \left(\frac{\pi}{2\Gamma_0\hbar\omega_c} \right)^2 \frac{8\Gamma_B^3}{3} = \frac{16\sigma_0}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{\Gamma_0}{\hbar\omega_c}},\end{aligned}\quad (1.33)$$

что совпадает с Ур. (1.29).

Корневую зависимость магнитосопротивления в Ур. (1.30) можно получить подставляя $|\text{Im}\Sigma(\mu, B)| \approx \Gamma_B$ и Ур. (1.26) в Ур. (1.18):

$$\bar{\sigma}_{zz} \sim \frac{\sigma_0\Gamma_0}{|\text{Im}\Sigma|} \sim \sigma_0 \frac{\Gamma_0}{\Gamma_B} = \sigma_0 \sqrt{\frac{\pi\Gamma_0}{4\hbar\omega_c}}. \quad (1.34)$$

Однако, в строгом расчете $|\text{Im}\Sigma(\mu, B)| \neq \Gamma_B$, будучи сильно осциллирующей функцией магнитного поля B и энергии Ферми μ . Поэтому, вычисленный коэффициент в корневой зависимости $\bar{\sigma}_{zz}$ в Ур. (1.29) в $32/3\pi \approx 3.4$ раза больше, чем в качественной оценке в Ур. (1.34).

Качественно, в терминах стандартной теории металлов, рост продольного магнитосопротивления в сильном магнитном поле можно объяснить следующим образом. Поскольку скорость рассеяния на примесях в борновском приближении пропорциональна осциллирующей плотности состояний (ПС), то электроны в максимумах ПС (на УЛ) рассеиваются сильнее, чем в минимумах ПС (между УЛ). Но поскольку большая часть электронов расположена в максимумах ПС, то в среднем по периоду квантовых осцилляций электроны рассеиваются сильнее, чем без магнитного поля. Причем чем сильнее магнитное поле, тем больше эта неравномерность распределения ПС и, следовательно, тем больше рост средней скорости рассеяния электронов. Это и приводит к продольному магнитосопротивлению.

Заметим, что в отличие от поперечного магнитосопротивления, которое в разных системах может отличаться [96, 54, 55] от предсказываемого стандартной теорией [1] и даже иметь корневую зависимость [53], продольное магнитосопротивление в отсутствие магнитного упорядочения ранее предсказано не было, за исключением некоторых очень специальных случаев [39].

Детальное сравнение предсказанных результатов с экспериментальными данными будет проведено ниже. Здесь лишь укажем, что предсказанная корневая зависимость объясняет (частично или полностью) продольное межслоевое магнитосопротивление, наблюдаемое в многочисленных экспериментах [40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48].

Корневая зависимость в Ур. (1.29)-(1.30) была выведена в пределе $\hbar\omega_c \gg \Gamma_0 \gg t_z$. В разделе 1.2.4 мы рассмотрим промежуточный случай $\hbar\omega_c \gtrsim \Gamma_0 \gg t_z$, а в разделе 1.3 мы рассмотрим промежуточный случай $\hbar\omega_c > 4t_z \gtrsim \Gamma_0$.

1.2.4 Кроссовер между пределами слабого и сильного поля в продольном межслоевом магнитосопротивлении в самосогласованном борновском приближении

В этом разделе, как и в предыдущем, мы будем использовать модель слабо связанных проводящих слоев, описываемую Гамильтонианом в Ур. (1.1)-(1.8) и строго говоря, применимую в пределе $\hbar\omega_c, \Gamma_0 \gg t_z$. Однако, в этом разделе условие $\hbar\omega_c \gg \Gamma_0$ не будет предполагаться. Следовательно, УЛ не изолированы, и больше нельзя вычислять функцию Грина, оставляя только один УЛ, то есть нужно честно выполнять суммирование по УЛ. Из Ур. (1.10) и (1.11) функция Грина в совпадающих точках

$$G(\varepsilon) = G(\varepsilon, r, r) = \sum_{n, k_y} G(\varepsilon, n) = g_{LL} \sum_n G(\varepsilon, n) \quad (1.35)$$

$$= -\frac{\pi g_{LL}}{\hbar\omega_c} \tan \left[\pi \frac{\varepsilon - \Sigma(\varepsilon)}{\hbar\omega_c} \right]. \quad (1.36)$$

Суммирование по k_y в Ур. (1.35) дает вырождение УЛ g_{LL} . Удобно использовать нормированную безразмерную функцию Грина

$$g(\varepsilon) \equiv G(\varepsilon) \hbar\omega_c / \pi g_{LL}. \quad (1.37)$$

Из предыдущего раздела мы выяснили, что чтобы получить корневую зависимость межслоевого магнитосопротивления, необходимо учесть рассеяние на примесях по крайней мере в самосогласованном борновском приближении (СПБ). В этом приближении, вместо Ур. (1.21) для собственно энергетической части Σ в электронной функции Грина в Ур. (1.11), мы имеем Ур. (1.31).

Ур. (1.36) и (1.31) дают следующую систему уравнений на мнимую и действительные части $g \equiv g(\varepsilon)$:

$$\text{Img} = \frac{\text{sh}(2\pi\Gamma_0 \text{Img} / \hbar\omega_c)}{\text{ch}(2\pi\Gamma_0 \text{Img} / \hbar\omega_c) + \cos(2\pi\varepsilon^* / \hbar\omega_c)}, \quad (1.38)$$

$$\text{Reg} = \frac{-\sin(2\pi\varepsilon^* / \hbar\omega_c)}{\text{ch}(2\pi\Gamma_0 \text{Img} / \hbar\omega_c) + \cos(2\pi\varepsilon^* / \hbar\omega_c)}. \quad (1.39)$$

где

$$\varepsilon^* \equiv \varepsilon - \text{Re}\Sigma^R(\varepsilon) = \varepsilon - \Gamma_0 \text{Reg}(\varepsilon). \quad (1.40)$$

Эта система уравнений также может быть записана для $\Sigma^R(\varepsilon)$. Вводя обозначения $\gamma_0 = 2\pi\Gamma_0/\hbar\omega_c$, $\gamma \equiv 2\pi\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)/\hbar\omega_c$, $\alpha \equiv 2\pi\varepsilon^*/\hbar\omega_c$, $\delta \equiv -2\pi\text{Re}\Sigma^R(\varepsilon)/\hbar\omega_c = 2\pi(\varepsilon^* - \varepsilon)/\hbar\omega_c$, Ур. (1.31) и (1.36) дают

$$\frac{\gamma}{\gamma_0} = \frac{\text{sh}(\gamma)}{\text{ch}(\gamma) + \cos(\alpha)}, \quad (1.41)$$

$$\delta \equiv \alpha - \frac{2\pi\varepsilon}{\hbar\omega_c} = \frac{\gamma_0 \sin(\alpha)}{\text{ch}(\gamma) + \cos(\alpha)}. \quad (1.42)$$

Решение Ур. (1.41) дает $\text{Im}\Sigma(\alpha)$, а Ур. (1.42) позволяет найти $\alpha(\varepsilon)$ и $\text{Re}\Sigma(\varepsilon)$. Система уравнений (1.41) и (1.42) отличаются от Ур. (30) статьи [68] даже в отсутствие электронного резервуара (то есть при $R = 0$), потому что в Ур. (30) статьи [68] пренебрегается осциллирующей действительной частью электронной собственной энергии $\text{Re}\Sigma(\varepsilon)$, что изменяет зависимость $\sigma_{zz}(B_z)$. Ур. (1.20), (1.41) и (1.42) удобны для численных расчетов продольной межслоевой проводимости.

Ур. (1.41) позволяет найти значение γ_{0c} , при котором УЛ становятся изолированными (в рамках самосогласованного борновского приближения), то есть когда плотность состояний (ПС) и $\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)$ между уровнями Ландау (УЛ) становятся равными нулю. В середине между соседними УЛ $\cos(\alpha) = 1$, и уравнение (1.41) для γ принимает вид

$$\frac{\gamma}{\gamma_0} = \frac{\text{sh}(\gamma)}{\text{ch}(\gamma) + 1} = \text{th}(\gamma/2). \quad (1.43)$$

Это уравнение всегда имеет тривиальное решение $\gamma = 0$. Однако, при $\gamma_0 > \gamma_{0c} = 2$, соответствующем $\pi\Gamma_0 > \hbar\omega_c$, уравнение (1.43) также имеет ненулевое решение, означающее конечную ПС при энергии между УЛ. Ниже мы получим, что этот кроссовер при

$$\hbar\omega_c = \pi\Gamma_0 \quad (1.44)$$

также влияет на монотонную часть продольного межслоевого магнитосопротивления.

Подставляя решение Ур. (1.41) и (1.42) в Ур. (1.20) можно вычислить межслоевую продольную проводимость σ_{zz} численно в рамках СБП во втором порядке по $t_z \ll \Gamma_0$ во всем интервале магнитного поля. Результат показан на Рис. 1.2 и 1.3. Как видно из Рис. 1.3, в сильном поле $R_{zz} \propto B_z^{1/2}$ в согласии с Ур. (1.33). Из Рис. 1.2 видно, что падение межслоевой проводимости $\sigma_{zz}(B_z)$ начинается не с нулевого поля, а с некоторого критического B_c , соответствующего Ур. (1.44). При этом поле УЛ становятся изолированными, то есть расстояние между УЛ $\hbar\omega_c$ превышает их ширину 2Γ (см Рис. 1.4). Ниже этого поля, то есть при $B < B_c$, $\sigma_{zz}(B_z) = \text{const}$ в рамках точности модели и вычислений. Это означает, что полевая зависимость магнитосопротивления $\bar{R}_{zz}(B_z)$ также

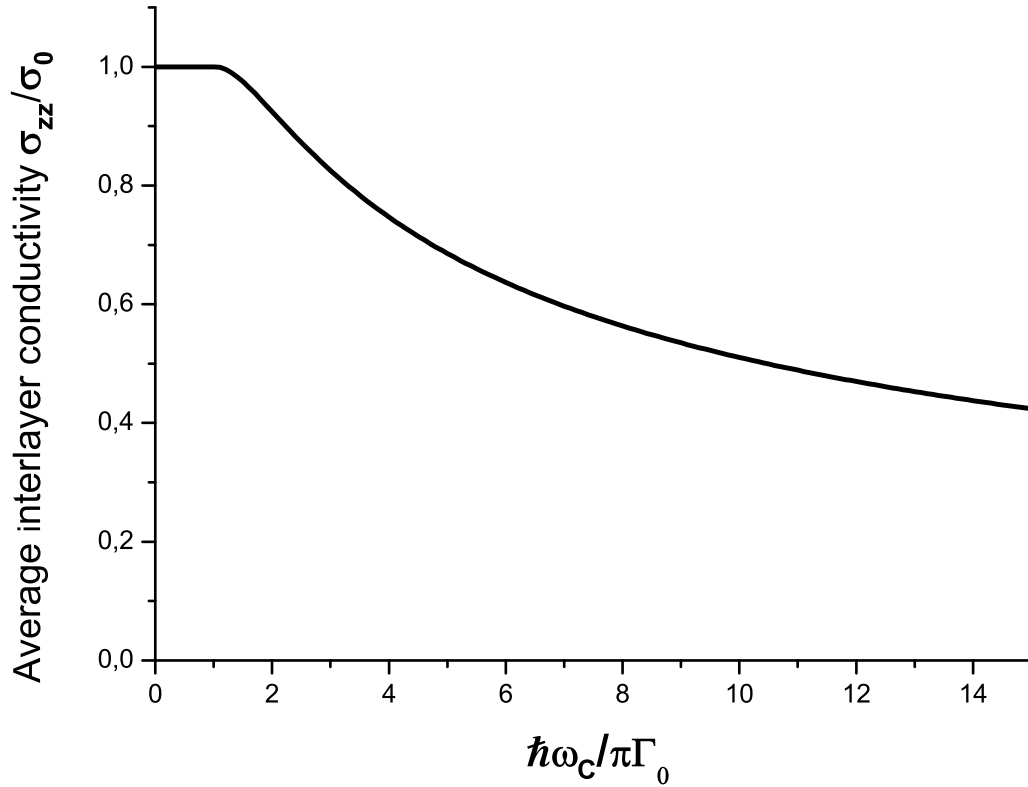


Рисунок 1.2: Усредненная (по периоду квантовых осцилляций) межслоевая проводимость $\bar{\sigma}_{zz}$ как функция нормированного расстояния между УЛ $\hbar\omega_c/\pi\Gamma_0 \propto B_z$, численно полученная из Ур. (1.41), (1.42) и (1.20).

не является простой аналитической функцией: в рамках модели и СБП, при $B < B_c$ $R_{zz}(B_z) = const$ и начинает расти при $B > B_c$, достигая корневой зависимости $R_{zz}(B_z) \propto B_z^{1/2}$ при $\hbar\omega_c \gg \Gamma_0$. Подобный кроссовер межслоевого продольного магнитосопротивления $\bar{R}_{zz}(B_z)$ при $B = B_c \approx 8\text{T}$ наблюдался в сильно анизотропном квазидвумерном металле β'' - (BEDT-TTF)₂SF₅CH₂CF₂SO₃. [92] В экспериментах часто измеряется не усредненная проводимость, как в первой строчке Ур. (1.28), а усредненное сопротивление $R_{zz}^{av}(B_z) = \int_0^{\hbar\omega_c} R_{zz}(E) dE/\hbar\omega_c$, для которого этот резкий кроссовер при $\hbar\omega_c = \pi\Gamma_0$ может быть сглажен.

Заметим, что при решении системы Ур. (1.41) и (1.42) и вычислении $\sigma_{zz}(B_z)$ было важно учесть также осцилляции $\text{Re}\Sigma(\varepsilon)$, потому что как показывает прямой расчет, в сильном поле результат зависит от учета этих осцилляций. Самосогласованное борновское

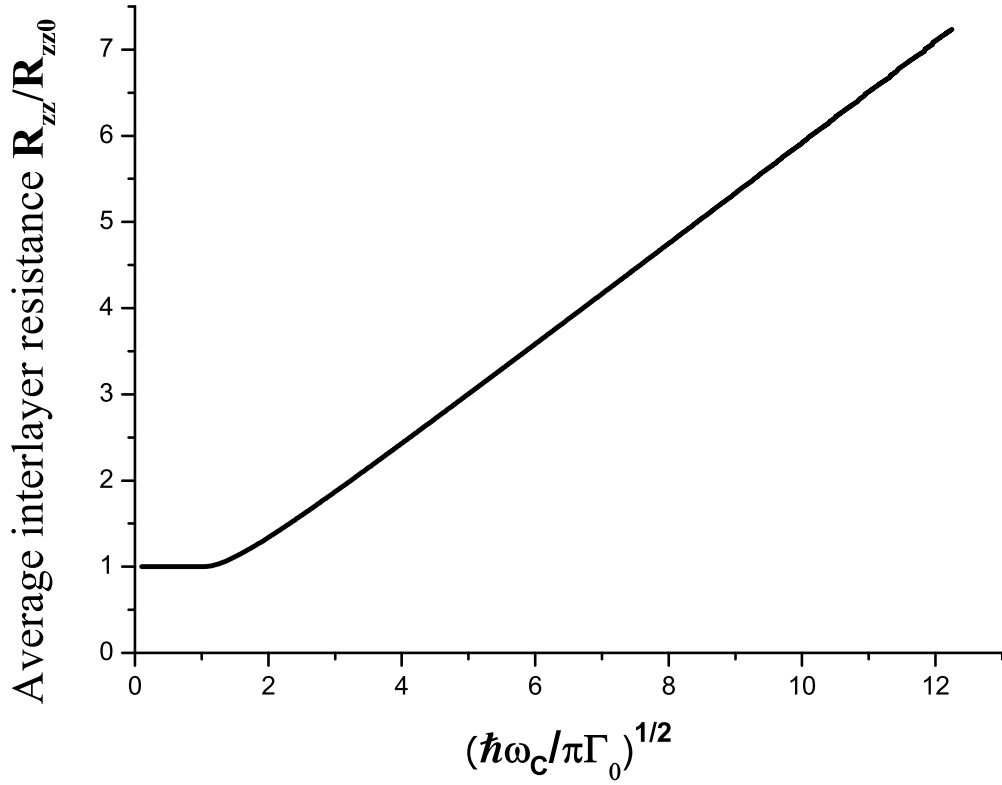


Рисунок 1.3: Усредненное межслоевое магнитосопротивление $\bar{R}_{zz} = 1/\bar{\sigma}_{zz}$ как функция $\sqrt{\hbar\omega_c/\pi\Gamma_0} \propto \sqrt{B_z}$, полученное численно из Ур. (1.41), (1.42) и (1.20). В слабом поле $\hbar\omega_c < \pi\Gamma_0$, $\bar{R}_{zz} \approx const$.

приближение, как и пренебрежение диаграммами с пересечением примесных линий случайного потенциала точечных примесей, в сильном поле дает резкие границы ПС каждого УЛ. Оно неплохо работает в качестве начального приближения, приводя к грубым качественным эффектам, таким как полученный монотонный рост межслоевого магнитосопротивления $R_{zz}(B_z) \propto B_z^{1/2}$ в сильном поле. Более точные теории, даже без учета е-е взаимодействия, предсказывают экспоненциальные хвосты плотности состояний каждого УЛ [85, 82, 84, 76, 77, 73, 74, 75, 81, 78, 79], которые могут количественно изменить зависимость $\bar{R}_{zz}(B_z)$, например, сгладить кроссовер при $B = B_c$. Электрон-электронное взаимодействие может еще больше усилить продольное межслоевое магнитосопротивление [88, 91]. Поэтому требуется дальнейшее теоретическое исследование магнитосопротивления в слоистых металлах.

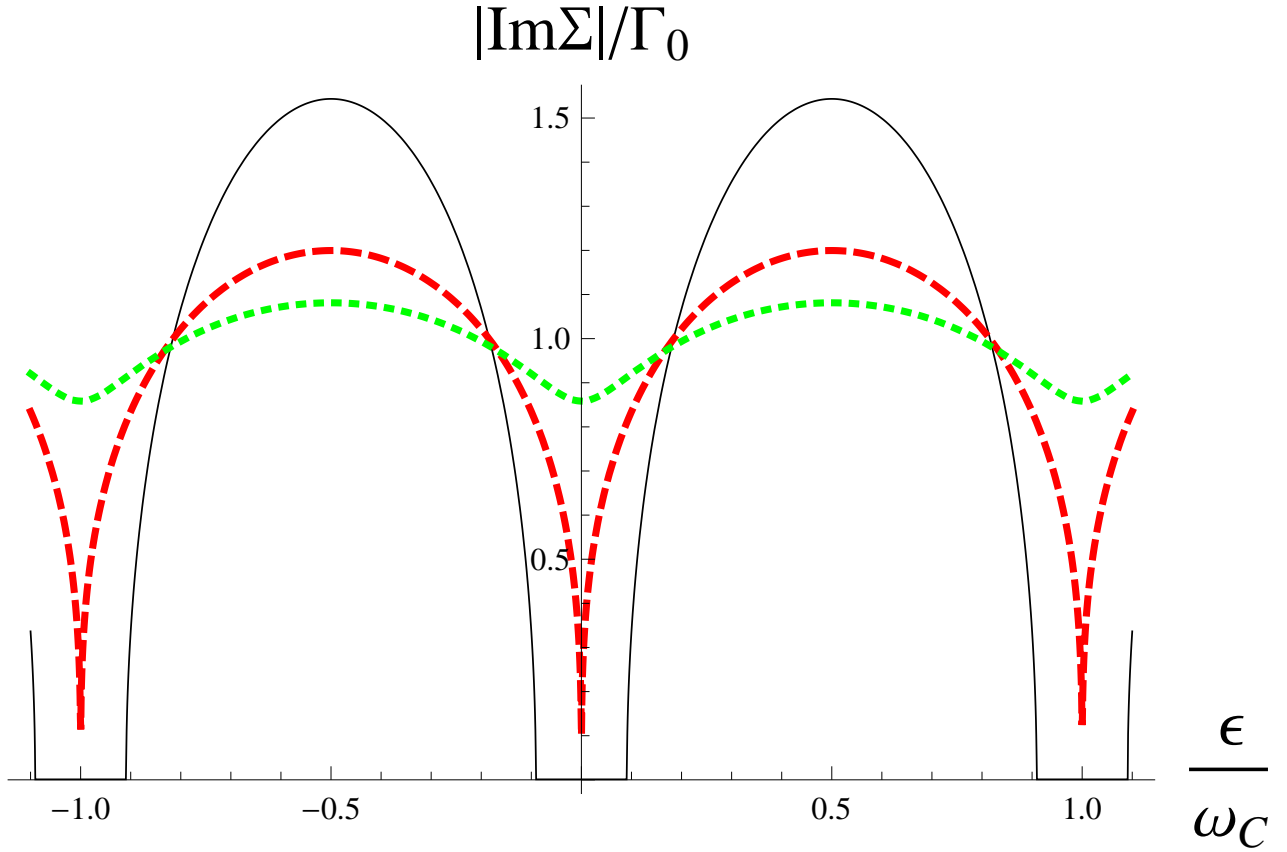


Рисунок 1.4: Мнимая часть электронной собственно-энергетической части $\text{Im}\Sigma/\Gamma_0$ как функция энергии ϵ вычисленная из Ур. (1.41) и (1.42) для трех различных значений $\hbar\omega_c/\Gamma_0 = 2\pi$ (сплошная черная линия), $\hbar\omega_c/\Gamma_0 = \pi$ (штриховая красная линия), и $\hbar\omega_c/\Gamma_0 = 2\pi/3$ (пунктирная зеленая линия). Когда $\text{Im}\Sigma = 0$, плотность состояний также равна нулю. Критическое поле B_c , при котором УЛ впервые становятся изолированными, соответствует $\hbar\omega_c/\Gamma_0 = \pi$.

1.3 Продольное межслоевое магнитосопротивление при конечном межслоевом интеграле перескока

В предыдущем разделе было показано, что в пределе малого межслоевого интеграла перескока $t_z \ll \Gamma_0 \ll \hbar\omega_c$, возникает достаточно сильное продольное межслоевое магнитосопротивление $R_{zz}(B_z)$, которое монотонно растет $R_{zz} \propto \sqrt{B_z}$ даже в рамках одночастичной модели с замороженным беспорядком и с "когерентным" межслоевым перескоком, сохраняющим импульс электронов вдоль плоскости. Однако, модель и вычисление в предыдущем разделе ограничены пределом $t_z \ll \Gamma_0, \hbar\omega_c$. В данном

разделе мы рассмотрим случай конечного межслоевого интеграла перескока, сравнимого с другими параметрами: $\Gamma_0 \lesssim 4t_z < \hbar\omega_c$. В отличие от предыдущей "туннельной" модели, в которой в формулу Кубо для межслоевой проводимости входили двумерные функции Грина на соседних слоях [см. Ур. (1.14)], в данном разделе функции Грина будут трехмерными с учетом сильно анизотропного закона дисперсии в Ур. (1.9). Обобщение вычисления предыдущего раздела на случай конечного $t_z \gtrsim \Gamma_0$ поможет также найти связь между этими двумя моделями и область применимости "туннельной" двухслоевой модели и результатов предыдущего раздела.

При $t_z \gtrsim \Gamma_0$ в качестве нулевого приближения берем Ферми газ электронов с законом дисперсии (1.9) в магнитном поле, а рассеяние на примесях рассматриваем по теории возмущений. Гамильтониан содержит два члена: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I$. Первый член

$$\hat{H}_0 = \sum_m \epsilon_{3D}(m) c_m^+ c_m \quad (1.45)$$

описывает невзаимодействующие электроны в магнитном поле с законом дисперсии в Ур. (1.9) и (1.3) и квантовыми числами $m \equiv \{n, k_y, k_z\}$. Второй член описывает взаимодействие электронов с примесями и дается Ур. (1.5) и (1.6). Как и в предыдущем разделе, примеси предполагаются случайно расположенными и точечными. Межслоевая проводимость σ_{zz} при энергии ε дается формулой Кубо, причем вершинными поправками можно пренебречь поскольку примеси короткодействующие (точечные) и разница между транспортным и обычным временем рассеяния отсутствует. Получаем после усреднения по примесям

$$\sigma_{zz}(\varepsilon) = \frac{e^2 \hbar}{2\pi} \sum_m v_z^2(k_z) [2\text{Im}G_R(m, \varepsilon)]^2, \quad (1.46)$$

где скорость электронов в межслоевом направлении z

$$v_z = \partial \epsilon_{3D} / \partial k_z = 2t_z d \sin(k_z d) / \hbar, \quad (1.47)$$

сумма по квантовым числам $m \equiv \{n, k_y, k_z\}$ (исключая спин) берется в единичном объеме, а запаздывающая функция Грина, усредненная по примесям,

$$G_R = [\varepsilon - \epsilon_{3D}(m) - \Sigma^R(\varepsilon, m)]^{-1}. \quad (1.48)$$

Температурная зависимость проводимости получается из Ур. (1.46) интегрированием по энергии согласно Ур. (1.12).

В самосогласованном борновском приближении (СБП), и даже в приближении без пересечения примесных линий, электронная собственно-энергетическая часть в Ур. (1.48)

$\Sigma^R(\varepsilon, m) = \Sigma_n^R(\varepsilon)$ не зависит от k_y и k_z , а только от энергии ε (см. [32, 68, 69], или Приложение А.1 и Ур. (1.54)-(1.57) ниже). Поскольку $\epsilon_{3D}(m)$ также не зависит от k_y , суммирование по k_y в Ур. (1.46) дает множитель, равный вырождению УЛ на одну компоненту спина в единице площади $g_{LL} = 1/2\pi l_H^2 = eB_z/2\pi\hbar c$. Межслоевая проводимость дается суммой по УЛ:

$$\sigma_{zz}(\varepsilon) = \sum_n \sigma_n(\varepsilon), \quad (1.49)$$

где вклад в σ_{zz} от УЛ с номером n

$$\sigma_n = \frac{e^2\hbar g_{LL}}{2\pi} \int \frac{dk_z}{2\pi} v_z^2(k_z) [2\text{Im}G_R(n, k_z, \varepsilon)]^2. \quad (1.50)$$

Подставляя Ур. (1.47) и (1.48) в Ур. (1.50) и интегрируя по k_z мы получаем (см. Приложение А.4)

$$\sigma_n = \frac{\sigma_0\hbar\omega_c\Gamma_0}{2\pi t_z^2 |\text{Im}\Sigma_n^R(\varepsilon)|} \text{Re} \frac{4t_z^2 - (\Delta\varepsilon)^2 + i\Delta\varepsilon |\text{Im}\Sigma_n^R(\varepsilon)|}{\sqrt{4t_z^2 - (\Delta\varepsilon - i|\text{Im}\Sigma_n^R(\varepsilon)|)^2}}, \quad (1.51)$$

где $\Delta\varepsilon \equiv \varepsilon - \epsilon_{2D}(n) - \text{Re}\Sigma_n^R(\varepsilon)$, σ_0 обозначает межслоевую проводимость в отсутствие магнитного поля, совпадающую с Ур. (1.16):

$$\sigma_0 = e^2\rho_F \langle v_z^2 \rangle \tau_0 = 2e^2 g_{LL} t_z^2 d / \hbar^2 \omega_c \Gamma_0, \quad (1.52)$$

где $\rho_F = 2g_{LL}/\hbar\omega_c d = m^*/\pi\hbar^2 d$ трехмерная ПС на уровне Ферми в отсутствие магнитного поля с учетом двухкратного вырождения по спину, $\tau_0 = \hbar/2\Gamma_0$ и $\langle v_z^2 \rangle = 2t_z^2 d^2 / \hbar^2$.

Разложение Ур. (1.51) до членов первого порядка по t_z^2 дает

$$\sigma_n = \frac{2\sigma_0\hbar\omega_c\Gamma_0 |\text{Im}\Sigma_n^R(\varepsilon)|^2}{\pi [(\Delta\varepsilon)^2 + |\text{Im}\Sigma_n^R(\varepsilon)|^2]}, \quad (1.53)$$

что совпадает с Ур. (1.17). Это показывает эквивалентность при $t_z \ll \Gamma_0$ двух подходов для вычисления межслоевой проводимости: с помощью "туннельной" двухслоевой и "трехмерной" формулы Кубо, применяемые соответственно в предыдущем и этом разделах. Раньше эквивалентность этих двух подходов была проверена без учета магнитных квантовых осцилляций при $t_z \ll \Gamma_0$ в работе [28, 57].

Насколько общая эта закономерность? Оба подхода основаны на теории возмущений для стопки изолированных двумерных слоев в магнитном поле с качестве нулевого приближения и с двумя типами возмущений: потенциалом примесей и межслоевым

электронным перескоком. Эти два подхода отличаются последовательностью, в которой учитываются эти два возмущения. Если суммировать одну и ту же подпоследовательность диаграмм (членов теории возмущений) в разной очередности, то конечный ответ от этой очередности не зависит. Но изменение очередности учета диаграмм может привести к суммированию разных подпоследовательностей. Например, если использовать с самого начала трехмерный закон дисперсии (1.9), то конечный ответ будет нелинейным по t_z^2 , как в Ур. (1.51). Кроме того, теория возмущений не всегда применима, как например вблизи перехода металл-диэлектрик. Ур. (1.53) лишь подтверждает эквивалентность "туннельного двухслоевого" и "трехмерного" подходов для вычисления межслоевого магнитосопротивления в рамках одночастичного приближения в сильно анизотропном металле (то есть вдали от перехода металл-диэлектрик) во втором порядке по t_z . Поскольку во втором порядке по t_z , оправданном при $2t_z \ll \Gamma_0$, оба подхода дают один и тот же ответ, они соответствуют суммированию одинаковой подпоследовательности диаграмм и оба применимы. "Трехмерный" подход может оказаться неприменимым лишь в пределе очень малого t_z , когда становятся существенны двумерные слабо-локализационные поправки [87] или кулоновская блокада межслоевого электронного переноса [88, 91]. "Туннельный двухслоевой" подход оказывается неприменимым при увеличении межслоевого перескока $t_z \gtrsim \sqrt{\Gamma_0 \hbar \omega_c}$, когда становятся существенными нелинейные по t_z^2 члены, как видно из Ур. (1.51) и из Рис. 1.7 и 1.8 ниже.

Для вычисления электронной собственно-энергетической части $\Sigma_n^R(\varepsilon)$, входящей в Ур. (1.51), мы используем стандартную модель трехмерного сильно анизотропного металла с короткодействующим беспорядком. В приближении без пересечения примесных линий, [72, 86, 94] функция Грина электронов, усредненная по примесям, имеет вид (см. приложение А.1)

$$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \varepsilon) = \sum_{n, k_y, k_z} \frac{\Psi_{n, k_y, k_z}^{0*}(\mathbf{r}_1) \Psi_{n, k_y, k_z}^0(\mathbf{r}_2)}{\varepsilon - \epsilon_{3D}(n, k_z) - \Sigma(\varepsilon)}, \quad (1.54)$$

где $\Psi_{n, k_y, k_z}^0(\mathbf{r})$ – электронные волновые функции в магнитном поле вдоль оси z без примесей, а электронная собственно-энергетическая часть дается Ур. (1.21):

$$\Sigma(\varepsilon) = n_i U / [1 - U G(\varepsilon)]. \quad (1.55)$$

Где функция Грина в совпадающих точках $G(\varepsilon) \equiv G(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \varepsilon)$ после интегрирования Ур. (1.54) по k_y и k_z принимает вид

$$G(\varepsilon) \equiv G(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \varepsilon) = \sum_n \frac{g_{LL}/d}{\sqrt{(\varepsilon - \epsilon_{2D}(n) - \Sigma(\varepsilon))^2 - 4t_z^2}}. \quad (1.56)$$

Система уравнений (1.55) и (1.56) позволяет найти $\Sigma(\varepsilon)$ численно.

Как было показано в предыдущем разделе, чтобы получить монотонный рост межслоевого продольного магнитосопротивления, нужно учесть рассеяние на примесях по крайней мере в самосогласованном борновском приближение (СБП). Если применимо приближение без пересечения примесных линий,[86] то СБП применимо когда $UG(\varepsilon) \sim U\rho_F \ll 1$, то есть вклад потенциала каждой примеси меньше энергии Ферми E_F , при этом концентрация примесей n_i может быть произвольной,[95] так что Γ_0 тоже произвольна [94]. В СБП Ур. (1.55) сводится к Ур. (1.31):

$$\Sigma(\varepsilon) \approx n_i U + n_i U^2 G(\varepsilon). \quad (1.57)$$

Система уравнений (1.56) и (1.57) на $\Sigma(\varepsilon)$ в СБП в квазидвумерных металлах выписывалась ранее,[32, 99, 68, 69] однако межслоевая проводимость в СБП ранее не исследовалась, а вычислялась только в простом борновском приближении. Так, в работах П.Д. Григорьева [99, 32] изучался только близкий к трехмерному предел $2\pi t_z \gg \hbar\omega_c$, где квантовые осцилляции слабы, а в работе Т. Шампеля и В.П. Минеева [68] был введен электронный резервуар, чтобы подавить магнитные кватновые осцилляции, и чтобы простое борновское приближение стало применимым.

В сильном магнитном поле, когда $\hbar\omega_c/4 > t_z, \Gamma_0$ и уровни Ландау (УЛ) не перекрываются, можно ограничиться одним УЛ при решении системы уравнений (1.56) и (1.57), которые упрощаются до

$$\Sigma_* = \frac{n_i U^2 g_{LL}/d}{\sqrt{(\Delta\varepsilon - \Sigma_*)^2 - 4t_z^2}} = \frac{\Gamma_0 \hbar\omega_c/\pi}{\sqrt{(\Delta\varepsilon - \Sigma_*)^2 - 4t_z^2}}, \quad (1.58)$$

где $\Sigma_* \equiv \Sigma_n(\varepsilon) - n_i U$ и $\Delta\varepsilon \equiv \varepsilon - \varepsilon_{2D}(n) - n_i U = \Delta\varepsilon + \text{Re}\Sigma_*$. При $t_z = 0$ получаем двумерный результат для электронной функции Грина в СБП,[71] записанный в Ур. (1.32). Заметим, что рассеяние на примесях входит в Ур. (1.58) только в комбинации $n_i U^2 g_{LL}/d = \Gamma_0 \hbar\omega_c/\pi \equiv \Gamma_*^2$. Поэтому, при $\hbar\omega_c/4 > t_z, \Gamma_0$, единственный масштаб энергии в Ур. (1.58) – это $\Gamma_* \equiv \sqrt{\Gamma_0 \hbar\omega_c/\pi}$, и в максимуме $|\text{Im}\Sigma_*| \sim \Gamma_* \propto \sqrt{B_z}$ в согласии с двумерным пределом [72, 71], что приводит к корневой зависимости продольного магнитосопротивления в Ур. (1.34). Ур. (1.58) может быть переписано в виде алгебраического уравнения четвертого порядка:

$$\Sigma_*^2 [(\Delta\varepsilon - \Sigma_*)^2 - 4t_z^2] = \Gamma_*^4. \quad (1.59)$$

Из четырех решений этого уравнения только одно удовлетворяет физическим требованиям $\Sigma_* \rightarrow 0$ при $\Delta\varepsilon \rightarrow \pm\infty$. Оно изображено на Рис. 1.5 и 1.6. Это решение дает $\text{Im}\Sigma_* \neq 0$ в

конечном интервале ширины $\sim 4\sqrt{\Gamma_*^2 + t_z^2}$, в то время как $\text{Re}\Sigma_n$ имеет изломы на границах этого интервала. Для вычисления межслоевого магнитосопротивления, подставляем это физическое решение Ур. (1.59) в Ур. (1.51). Результат для $\langle R_{zz} \rangle = \bar{\sigma}_{zz}$ показан на Рис. 1.7 и 1.8, где $\bar{\sigma}_{zz}$ – это межслоевая проводимость, усредненная по энергии на периоде $\hbar\omega_c$ магнитных квантовых осцилляций.

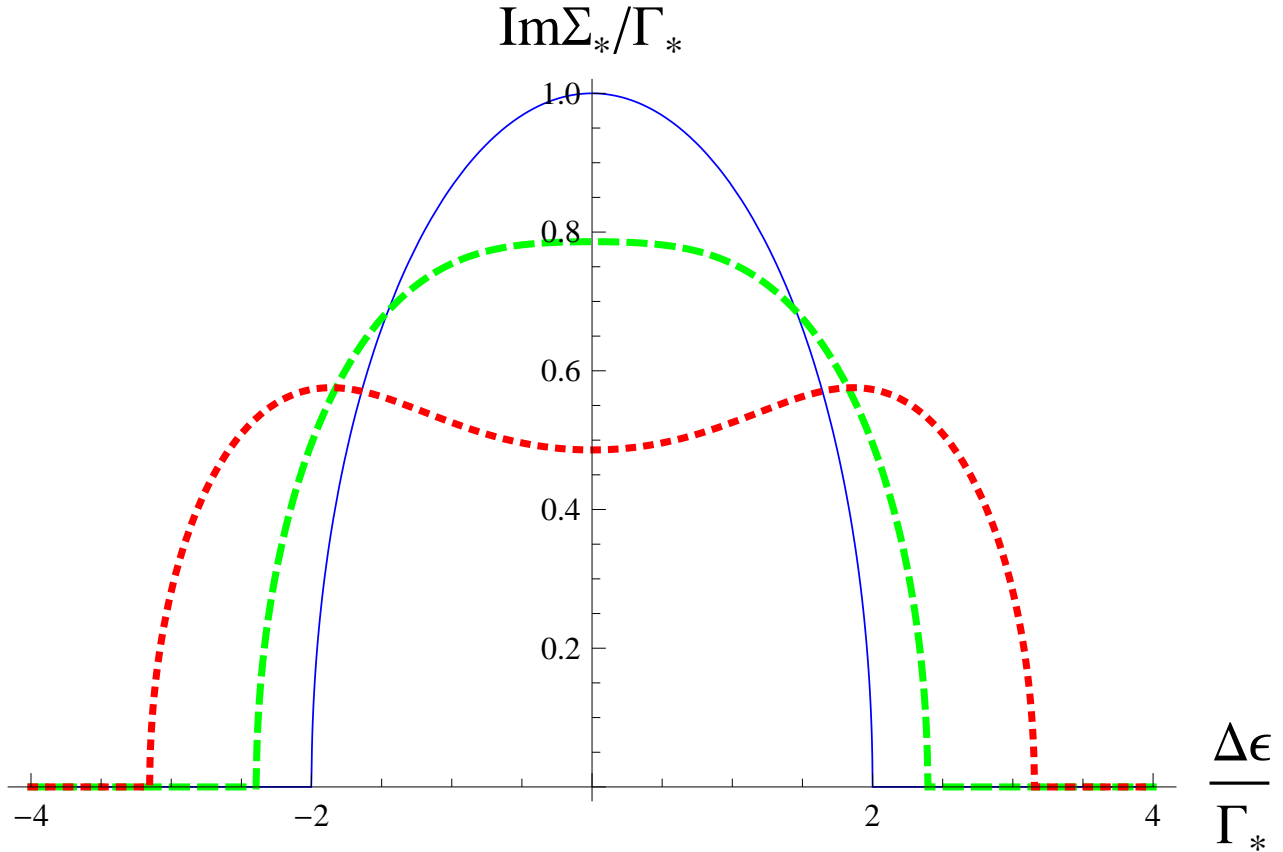


Рисунок 1.5: Мнимая часть электронной собственно-энергетической части $\text{Im}\Sigma$, полученная из решения Ур. (1.59), как функция энергии $\Delta\epsilon$, отсчитанной от ближайшего УЛ, при $t_z/\Gamma_* = 0$ (сплошная синяя линия), $t_z/\Gamma_* = 0.5$ (штриховая зеленая линия), и $t_z/\Gamma_* = 1.0$ (пунктирная красная линия).

В вычислениях проводимости в трехмерных металлах обычно пренебрегают действительной частью $\text{Re}\Sigma$, которая обычно дает лишь постоянный сдвиг энергии. Однако, в квазидвумерных металлах в сильном магнитном поле $\text{Re}\Sigma$ осциллирует как функция энергии (см. Рис. 1.6) и тоже должна быть учтена. Прямой расчет показывает, что если пренебречь $\text{Re}\Sigma_n$ в Ур. (1.51), то форма кривых на Рис. 1.7 изменится.

На Рис. 1.7 виден кроссовер от линейной к корневой зависимости продольного

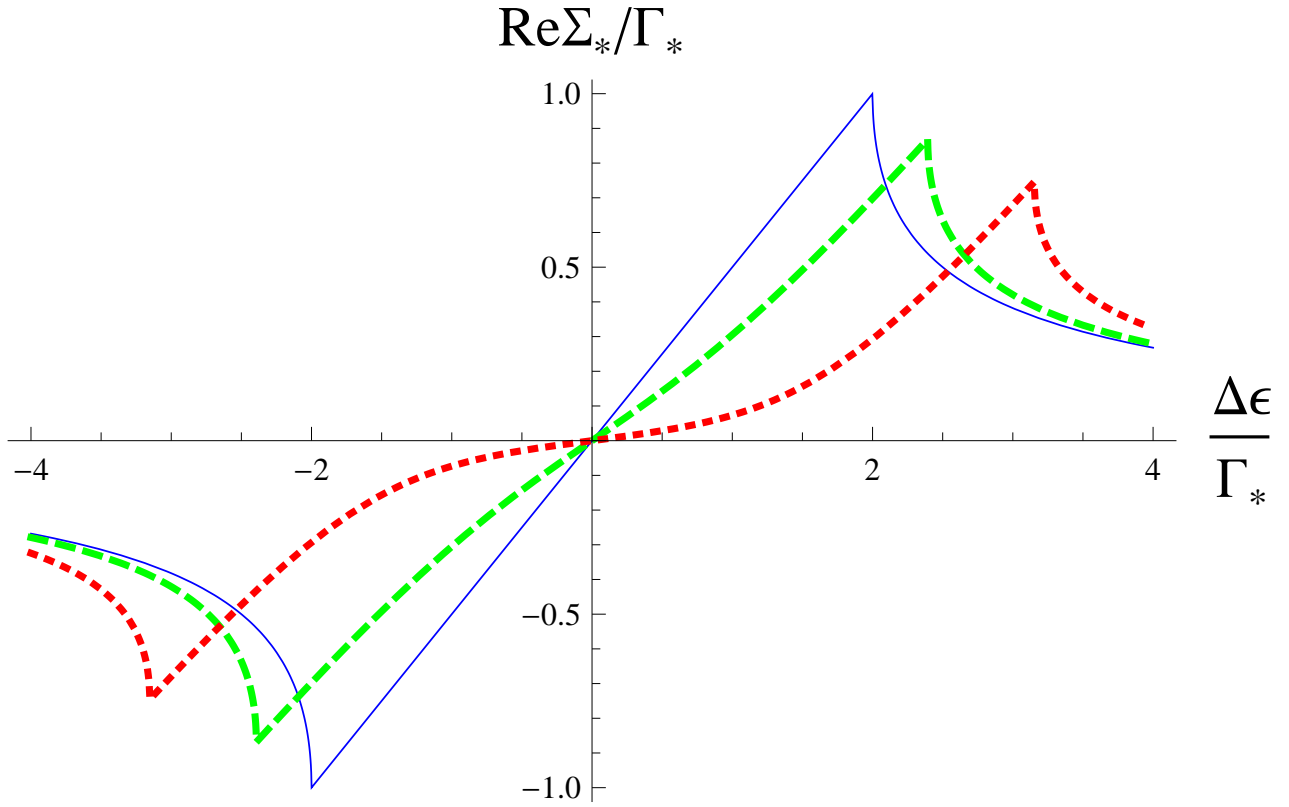


Рисунок 1.6: Действительная часть электронной собственно-энергетической части $\text{Re}\Sigma(\Delta\epsilon)$, полученная из решения Ур. (1.59), при $t_z/\Gamma_* = 0$ (сплошная синяя линия), $t_z/\Gamma_* = 0.5$ (штриховая зеленая линия), и $t_z/\Gamma_* = 1.0$ (пунктирная красная линия).

межслоевого магнитосопротивления $R_{zz}(B_z)$: нижняя кривая, соответствующая $t_z = 12\Gamma_0$, изображает линейную зависимость, а кривые при меньших t_z показывают корневую зависимость. Интервал линейного магнитосопротивления $4t_z < \hbar\omega_c \ll (4t_z)^2/\Gamma_0$ и увеличивается с ростом t_z/Γ_0 . Полученный кроссовер от линейной к корневой зависимости продольного межслоевого магнитосопротивления является общей чертой квазидвумерных металлов и наблюдался во многих экспериментах (например, см. статьи [40, 41]). Все кривые при $B_z = 0$ должны уйти к 1, что увеличивает интервал линейного магнитосопротивления по сравнению с Рис. 1.7 и 1.8. Приведенное выше вычисление применимо только в сильном поле, когда УЛ изолированы и $\hbar\omega_c/4 > t_z, \Gamma_*$. Корневая зависимость $R_{zz} \propto B_z$ в приведенном вычислении получается при $\hbar\omega_c > 2\Gamma_* \gtrsim 4t_z$, то есть в более широком интервале, чем $\hbar\omega_c \gg \Gamma_0 \gg t_z$, использованном в предыдущем разделе.

Полученная зависимость межслоевого магнитосопротивления может быть качественно (без численного расчета) понята следующим образом. Ур. (1.59) упрощается до

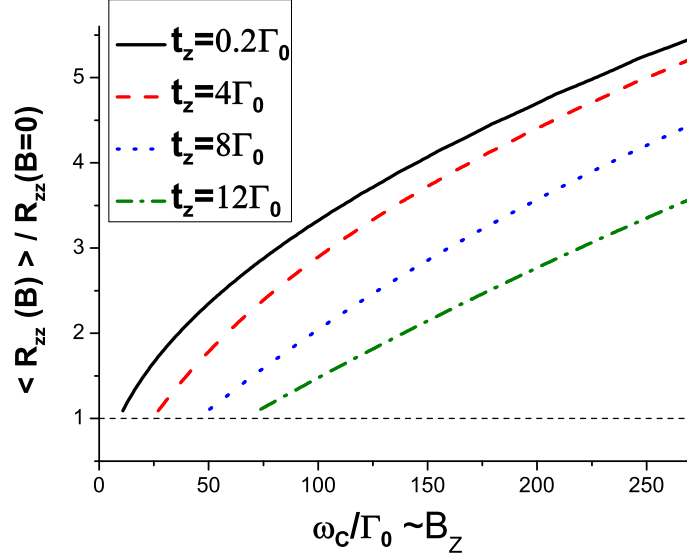


Рисунок 1.7: Среднее продольное межслоевое магнитосопротивление $\bar{R}_{zz}(B_z) = 1/\bar{\sigma}_{zz}$ как функция магнитного поля B_z/Γ_0 , вычисленное при $4t_z < \hbar\omega_c$ используя Ур. (1.51) и (1.59) при четырех различных значениях $t_z/\Gamma_0 = 0.2$ (сплошная черная линия), $t_z/\Gamma_0 = 4$ (штриховая красная линия), $t_z/\Gamma_0 = 8$ (пунктирная синяя линия) и $t_z/\Gamma_0 = 12$ (штрихпунктирная зеленая линия). При $t_z \gg \Gamma_0$ существует широкий интервал $4t_z < \hbar\omega_c \ll (4t_z)^2/\Gamma_0$ линейного магнитосопротивления (см. штрихпунктирную зеленую линию), а при меньших t_z магнитосопротивление имеет корневую зависимость от поля: $\bar{R}_{zz}(B_z) \sqrt{B_z}$ (сплошная черная и точечная синяя линии).

квадратного уравнения при $\Delta\epsilon = 0$ и имеет два решения: $\Sigma_*^2 = 2t_z^2 \pm \sqrt{4t_z^4 + \Gamma_*^4}$. Физическое решение не расходится при $t_z \rightarrow \infty$, имеет ненулевую мнимую часть, и при $t_z = 0$ совпадает с двумерным решением из предыдущего раздела или из статей [72, 71]. Все эти условия удовлетворены при знаке “–”, что при $\Delta\epsilon = 0$ дает $\text{Re}\Sigma_* = 0$ и

$$|\text{Im}\Sigma_*| = \sqrt{\sqrt{4t_z^4 + \Gamma_*^4} - 2t_z^2}. \quad (1.60)$$

Подставляя это в Ур. (1.51) получаем

$$\sigma_n(\Delta\epsilon = 0) = \frac{2\sigma_0\hbar\omega_c\Gamma_0}{\pi\Gamma_*^2} = 2\sigma_0. \quad (1.61)$$

Таким образом, в минимумах осцилляций межслоевое магнитосопротивление опускается до значений не меньше $R_{zz}(B=0)/2$.

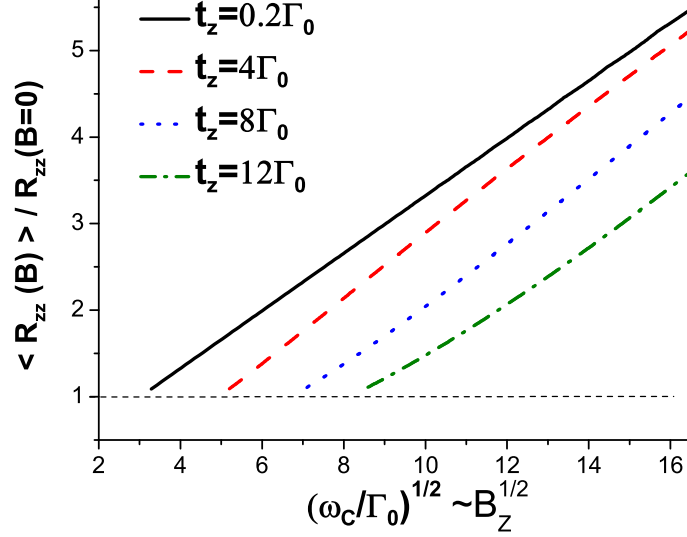


Рисунок 1.8: Среднее продольное межслоевое магнитосопротивление $\bar{R}_{zz}(B_z) = 1/\bar{\sigma}_{zz}$ как функция квадратного корня из магнитного поля $\sqrt{B_z}$, вычисленное при $4t_z < \hbar\omega_c$ используя Ур. (1.51) и (1.59) при четырех различных значениях $t_z/\Gamma_0 = 0.2$ (сплошная черная линия), $t_z/\Gamma_0 = 4$ (штриховая красная линия), $t_z/\Gamma_0 = 8$ (пунктирная синяя линия) и $t_z/\Gamma_0 = 12$ (штрих-пунктирная зеленая линия). При $t_z \lesssim \Gamma_0$ магнитосопротивление $\bar{R}_{zz}(B_z) \propto \sqrt{B_z}$ (сплошная черная и штриховая красная линии почти прямые). При большем $t_z \gg \Gamma_0$ эта зависимость меняется и $\bar{R}_{zz}(B_z) \propto B_z$ (пунктирная синяя и штрих-пунктирная зеленая линии ближе к параболам).

В пределе $\hbar\omega_c > 4t_z \gg \sqrt{\Gamma_0 \hbar\omega_c}$ каждый УЛ дает существенный вклад в межслоевую проводимость в интервале $-2t_z \lesssim \Delta\epsilon \lesssim 2t_z$. Это следует из Ур. (1.59) и видно из Рис. 1.9, где изображена межслоевая проводимость как функция энергии $\Delta\epsilon$ (отсчитанной от ближайшего УЛ). Эта зависимость $\sigma_{zz}(\Delta\epsilon)$ имеет форму купола с шириной $W \approx 4t_z$, совпадающей с шириной зоны вдоль оси z в отсутствие беспорядка. Проводимость, усредненная по периоду $\hbar\omega_c$ квантовых осцилляций, тогда равна

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{zz} &= \int_{-\hbar\omega_c/2}^{\hbar\omega_c/2} \frac{d\epsilon}{\hbar\omega_c} \sigma_{zz}(\Delta\epsilon) \approx \sigma_{zz}(0) \frac{\pi W}{4 \hbar\omega_c} \\ &= \sigma_0 (2\pi t_z / \hbar\omega_c) \propto 1/B_z. \end{aligned} \quad (1.62)$$

Это предсказывает в квазидвумерных металлах линейное межслоевое магнитосопротивление $R_{zz} = 1/\bar{\sigma}_{zz} \propto B_z$ в интервале $4t_z < \hbar\omega_c \ll (4t_z)^2/\Gamma_0$ магнитного

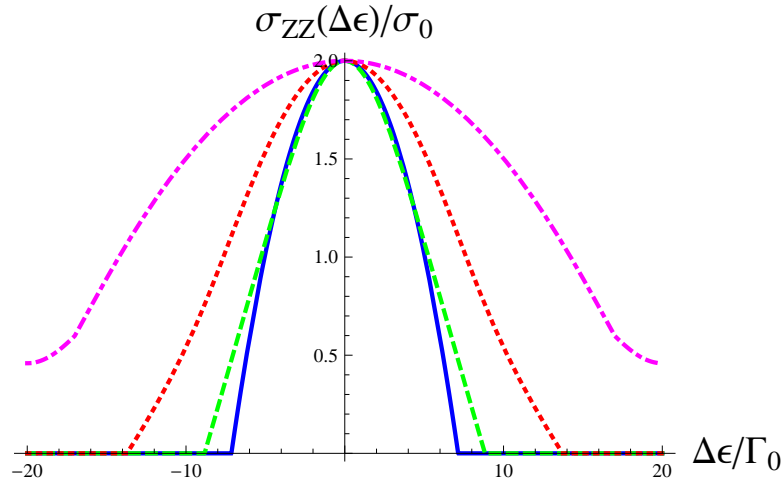


Рисунок 1.9: Межслоевая проводимость $\sigma_{zz}(\Delta\epsilon)$ вычисленная согласно Ур. (1.51) и (1.59) в пределе сильного поля $\hbar\omega_c/\Gamma_0 = 40$ как функция энергии, отсчитанной от ближайшего УЛ причетырех различных значениях $t_z/\Gamma_0 = 0.1$ (сплошная синяя линия), $t_z/\Gamma_0 = 2$ (штриховая зеленая линия), $t_z/\Gamma_0 = 5$ (пунктирная красная линия), и $t_z/\Gamma_0 = 10$ (штрих-пунктирная пурпурная линия). В пределе $2t_z^2 \gg \Gamma_0\hbar\omega_c$ межслоевая проводимость как функция энергии вблизи УЛ имеет форму полуэллипса с шириной $4t_z$. В обратном пределе $\Gamma_0\hbar\omega_c \gg t_z^2$ "зона проводимости" от каждого УЛ имеет ширину $\approx 2\sqrt{\Gamma_0\hbar\omega_c}$.

поля. Ур. (1.62) также предсказывает более сильную зависимость $\bar{\sigma}_{zz}$ от t_z : $\bar{\sigma}_{zz} \propto t_z^3$, в отличие от обычной зависимости $\bar{\sigma}_{zz} \approx \sigma_0 \propto t_z^2$. На Рис. 1.7 и 1.8 эта необычная зависимость от t_z проявляется в уменьшении $\langle R_{zz} \rangle / R_{zz0} = \sigma_0 / \bar{\sigma}_{zz}$ при одном и том же $\hbar\omega_c/\Gamma_0$ с увеличением t_z . Полученная неквадратичная зависимость $\bar{\sigma}_{zz} \propto t_z^3$ также означает, что "двухслоевой" подход, используемый в предыдущем разделе, становится не применимым при $t_z \gtrsim \Gamma_* = \sqrt{\Gamma_0\hbar\omega_c/\pi}$.

В противоположном пределе $\hbar\omega_c \gg \Gamma_* \gtrsim t_z$ "ширина зоны проводимости" от каждого УЛ равна $W \approx 4\Gamma_*$, и для монотонной части проводимости вместо второй строчки Ур. (1.62) получаем $\bar{\sigma}_{zz}/\sigma_0 \approx 2\sqrt{\Gamma_0/\hbar\omega_c} \propto 1/\sqrt{B_z}$, или

$$\bar{R}_{zz}(B) / \bar{R}_{zz}(0) \approx \sqrt{\hbar\omega_c/4\Gamma_0} \propto \sqrt{B_z} \quad (1.63)$$

в согласии с предыдущим разделом и Рис. 1.8.

Магнитное поле B_{cr} кроссовера от линейной к корневой зависимости магнитосопротивления $R_{zz}(B_z)$ может быть использовано для оценки значения межслоевого интеграла перескока: $t_z \sim \sqrt{\Gamma_0\hbar\omega_c}$, где $\omega_c = eB_{cr}/m^*c$ соответствует

полю кроссовера. Однако, чтобы разделить линейную и корневую зависимости магнитосопротивления, требуется широкий интервал магнитного поля. на Рис. 1.8 это поле кроссовера может быть определено только на точечной синей линии при $\sqrt{\hbar\omega_c/\Gamma_0} \approx 11$. Этот кроссовер можно различить также штрих-пунктирной зеленой кривой на Рис. 1.8 при $\sqrt{\hbar\omega_c/\Gamma_0} \approx 15$.

Полученный монотонный рост продольного межслоевого магнитосопротивления, как и магнитные квантовые осцилляции, происходит от квантования УЛ, но может наблюдаться при температурах значительно больших расстояния между УЛ, $T \gg \hbar\omega_c$, когда магнитные квантовые осцилляции экспоненциально подавлены. Согласно Ур. (1.12) и (1.46), температурное размытие функции распределения Ферми не влияет на монотонный рост магнитосопротивления в сильном поле, который зависит только от механизма рассеяния. Поэтому при высокой температуре, когда электронное рассеяние на фононах играет основную роль, монотонный рост магнитосопротивления ослабляется или даже пропадает. Длинноволновый беспорядок, который практически не приводит к релаксации импульса из-за малости угла рассеяния, но приводит к локальному сдвигу энергии Ферми на масштабах много больших ларморовского радиуса (например, на масштабах размера образца), подавляет магнитные квантовые осцилляции аналогично температуре, но не подавляет описанный монотонный рост магнитосопротивления. Поэтому, даже если магнитные квантовые осцилляции подавлены, продольное межслоевое магнитосопротивление может наблюдаться и давать полезную информацию об электронной структуре вещества. В этом смысле, продольное межслоевое магнитосопротивление аналогично медленным осцилляциям магнитосопротивления, изучаемым в разделах 2.2 и 2.3 диссертации и возникающим в противоположном пределе $t_z > \hbar\omega_c$. [31]

Подведем итог проведенных расчетов этой главы. Главным теоретическим предсказанием является монотонный рост продольного межслоевого магнитосопротивления $R_{zz}(B_z)$. Этот рост имеет разное поведение в зависимости от соотношения трех параметров размерности энергии: (1) межслоевого интеграла перескока t_z , (2) расстояния между уровнями Ландау (УЛ) $\hbar\omega_c$, и (3) уширения Γ_0 УЛ в слабом поле, которое связано с временем τ упругого рассеяния электронов на короткодействующих примесях: $\Gamma_0 = \hbar/2\tau$. В сильном магнитном поле и при малом межслоевом интеграле перескока $t_z < \sqrt{\Gamma_0 \hbar\omega_c}$, получается корневая зависимость среднего (по периоду квантовых осцилляций) продольного межслоевого магнитосопротивления $\bar{R}_{zz}(B_z) = \bar{\sigma}_{zz}^{-1}(B_z) \propto \sqrt{B_z}$. При этом межслоевая проводимость квадратична по межслоевому интегралу перескока:

$\bar{\sigma}_{zz} \propto t_z^2$. Этот результат получен двумя разными подходами: используя "трехмерную" формулу Кубо (этот раздел) и используя "двухслоевую" модель туннелирования электронов между двумя соседними слоями (предыдущий раздел 1.2). Вычисление этого раздела показало, что эта "двухслоевая" модель, ограничивающаяся вторым порядком по межслоевому интегралу перескока t_z , применима только при $t_z \ll \sqrt{\Gamma_0 \hbar \omega_c}$. В сильном поле эта область применимости "двухслоевой" модели оказалась шире, чем область $t_z \ll \Gamma_0$, предполагаемая при ее выводе. При $t_z \gtrsim \sqrt{\Gamma_0 \hbar \omega_c}$, когда "двухслоевая" модель не применима, необходимо с самого начала использовать трехмерный закон дисперсии электронов из Ур. (1.9). Вычисление этого раздела, использующее трехмерные формулы Кубо и закон дисперсии электронов (1.9), подтверждает результат $\bar{R}_{zz}(B_z) \propto \sqrt{B_z}$ раздела 1.2 при $t_z \ll \sqrt{\Gamma_0 \hbar \omega_c} \ll \hbar \omega_c$ и предсказывает линейное продольное межслоевое магнитосопротивление $\bar{R}_{zz}(B_z) = 1/\bar{\sigma}_{zz} \propto B_z$ в интервале $4t_z < \hbar \omega_c \ll (4t_z)^2/\Gamma_0$ магнитного поля, в котором также имеется необычная зависимость проводимости $\bar{\sigma}_{zz}$ от межслоевого интеграла перескока: $\bar{\sigma}_{zz} \propto t_z^3$.

Если $t_z > \sqrt{\Gamma_0 \hbar \omega_c}$, магнитное поле B_{cr} кроссовера от линейной к корневой зависимости магнитосопротивления $R_{zz}(B_z)$ может быть использовано для оценки значения межслоевого интеграла перескока $t_z \sim \sqrt{\Gamma_0 \hbar \omega_c^{cr}}$ из экспериментальных данных. Если $t_z \ll \sqrt{\Gamma_0 \hbar \omega_c}$, то магнитное поле B_{cr} кроссовера к корневой зависимости магнитосопротивления $R_{zz}(B_z)$ может быть использовано для оценки из экспериментальных данных значения $\Gamma_0 = \hbar/2\tau$, определяемого рассеянием на короткодействующих примесях.

Измерение монотонного роста продольного межслоевого магнитосопротивления намного проще измерения квантовых осцилляций магнитосопротивления, потому что конечная температура или длинноволновый беспорядок почти не влияют на $\bar{R}_{zz}(B_z)$. Таким образом, экспериментальное исследование продольного межслоевого магнитосопротивления предлагается в качестве простого дополнительного инструмента для исследования электронной структуры сильно анизотропных квази-двумерных соединений в широком диапазоне параметров. Полученный монотонный рост продольного межслоевого магнитосопротивления $\bar{R}_{zz}(B_z)$ также позволяет объяснить многочисленные экспериментальные данные по магнитосопротивлению в сильно анизотропных слоистых металлах.[31, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48] Этому сравнению теории и эксперимента посвящен следующий раздел.

1.4 Сравнение с экспериментами по продольному межслоевому магнитосопротивлению и обсуждение

В этом разделе в основном представлены результаты совместного экспериментального и теоретического исследования межслоевого магнитосопротивления [48] (работа №5 из списка публикаций) на примере сильно анизотропного органического металла α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄. Это соединение имеет сильную анизотропию и межслоевой интеграл перескока [51] $t_{\perp} \sim 30 \mu\text{eV}$ при атмосферном давлении. При температуре $\approx 8.5 \text{ K}$ и атмосферном давлении в этом соединении происходит переход в состояние с волной зарядовой плотности, который может быть подавлен дополнительным внешним давлением $P > P_c \approx 2.5 \text{ kbar}$. [104, 105]. Чтобы избежать дополнительных усложнений, связанных индуцируемой полем волной зарядовой плотности, [106, 107] в эксперименте было приложено давление в 6 kbar, существенно превышающее P_c , и температура выше 1 K, так что в эксперименте вещество было в металлическом состоянии. Его поверхность Ферми состоит из слабо гофрированного цилиндра (квази-двумерная зона) и пары гофрированных открытых листов (квази-одномерная зона). Межслоевой интеграл перескока при $P = 6 \text{ kbar}$, оцененный из ширины пика когерентности в угловой зависимости межслоевого магнитосопротивления, [108, 109] несколько больше чем при атмосферном давлении и составляет $t_{\perp}(6\text{kbar}) \simeq 45 \mu\text{eV}$. Условие малости межслоевого интеграла перескока $b_* \equiv \hbar\omega_c/t_{\perp} \gg 1$ легко выполняется при доступном магнитном поле $B_z \gg t_{\perp}m_c/e\hbar \simeq 0.5 \text{ T}$, где $m_c \approx 1.3m_e$ – циклотронная масса. Как будет показано ниже, межслоевая проводимость при поле выше 2 T определяется в основном квазидвумерными носителями, поэтому мы можем сравнивать ее с теоретическими предсказаниями разделов 1.2 и 1.3.

Эксперименты проводились на оборудовании в лаборатории сильных магнитных полей (г. Гренобль, Франция) экспериментальной группой из института низких температур им. В. Мейснера (Гархинг, Германия). Некоторые результаты этого эксперимента изложены в совместной публикации [48]. На Рис. 1.10 отложены исходные данные (штриховая серая линия) полевой зависимости межслоевого магнитосопротивления $R_{zz}(B)$ в органическом металле α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄ в магнитном поле, перпендикулярном проводящим слоям, $\mathbf{B} \parallel z$, и его монотонная часть \bar{R}_{zz}^B (сплошная черная линия), полученная отфильтровыванием осциллирующей части проводимости. Заметим, что из-за очень большой амплитуды осцилляций, сравнимой с монотонным фоновым сопротивлением, среднее сопротивление не равно обратной усредненной проводимости $\bar{R}_{zz}(B) \neq 1/\bar{\sigma}_{zz}(B)$.

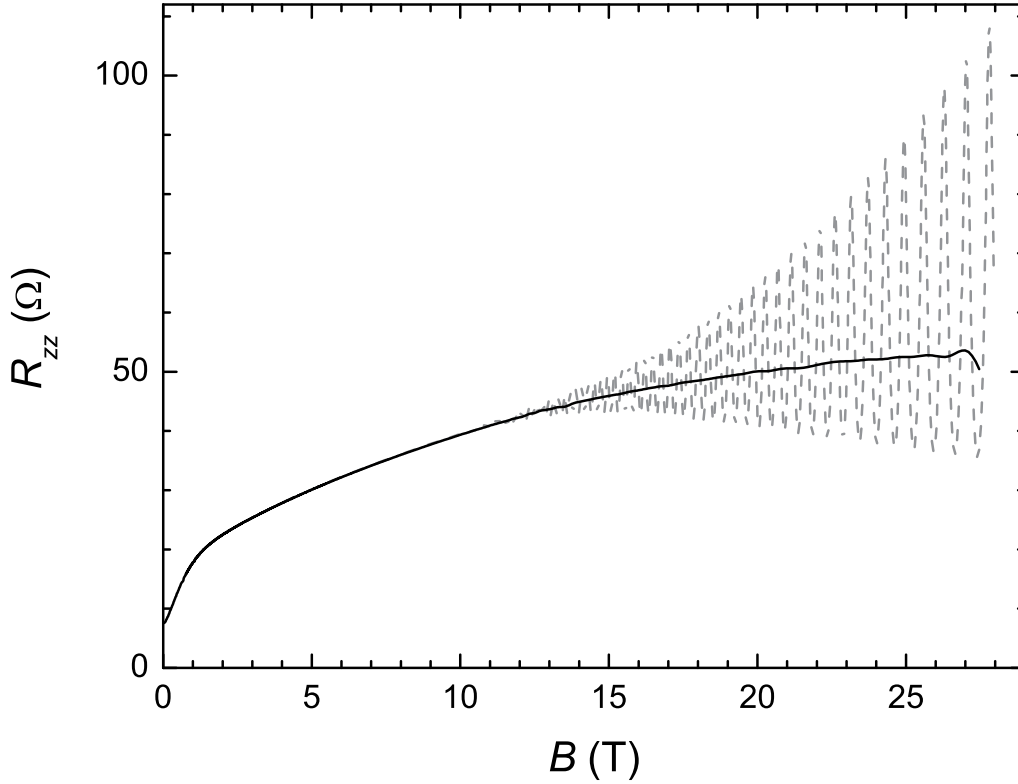


Рисунок 1.10: Межслоевое магнитосопротивление $R_{zz}(B)$ в α -(BEDT-TTF) $_2$ KHg(SCN) $_4$, измеряемое как функция перпендикулярного к проводящим слоям магнитного поля при температуре $T = 1.6$ К (штриховая серая линия), и его монотонная часть \bar{R}_{zz} (жирная сплошная черная линия), полученная отфильтровыванием осцилляций проводимости (см. текст). Рисунок взят из совместной статьи [48] (№ 5 в списке публикаций диссертанта).

Экспериментальные данные на Рис. 1.10 и 1.11 обрабатывались в терминах проводимости $\sigma_{zz}(B) = 1/R_{zz}(B)$, а не сопротивления (отфильтровывалась осциллирующая часть проводимости). Поэтому, для извлечения монотонной части, измеряемое сопротивление сначала инвертировалось для получения проводимости, затем осцилляции вычитались используя фильтр Фурье, и затем снова бралась обратная величина от результата, чтобы получить фоновое магнитосопротивление $R_{zz}^B(B)$, показанное на Рис. 1.10 и 1.11 сплошной жирной линией. С этим связано, в частности, отклонение этой линии вниз от прямой на Рис. 1.11. Ответ на вопрос, что нужно усреднять – проводимость $\sigma_{zz}(B)$ или сопротивление $R_{zz}(B)$ для сравнения с теоретическими предсказаниями в Ур. (1.29) и (1.30) в случае очень сильных осцилляций, зависит от методики эксперимента и требует дальнейшего анализа. В теории в разделах 1.2 и 1.3 вычисляется проводимость, а измеряется обычно

сопротивление.

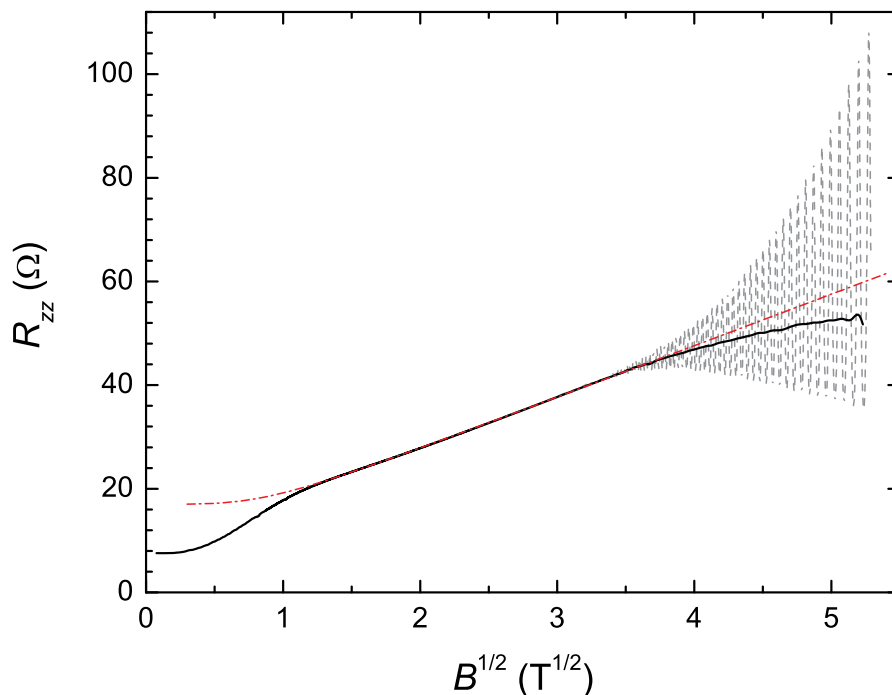


Рисунок 1.11: Те же экспериментальные данные, что и на Рис. 1.10, отложенные как функция $\sqrt{B_{zz}}$ (штриховая серая и сплошная черная линии). При поле в интервале между 1.5 и 16 Т монотонная часть магнитосопротивления линейна в этих координатах, что согласуется с Ур. (1.29) и (1.30). Подгонка экспериментальных данных теоретической зависимостью в Ур. (1.29) в этом интервале полей (штрих-пунктирная красная линия) дает среднее время рассеяния $\tau \approx 10$ ps. Рисунок взят из совместной статьи [48] (№ 5 в списке публикаций диссертанта).

Изложенная в разделах 1.2 и 1.3 теория предсказывает [см. Ур. (1.29) и (1.30)], что при $\omega_c \tau \gg 1$ и $\hbar \omega_c / t_{\perp} \gg 1$ среднее продольное межслоевое магнитосопротивление $\bar{R}_{zz}(B_z) \propto \sqrt{B_z}$. Для сравнения наблюдаемой зависимости $R_{zz}(B_z)$ с этим предсказанием, на Рис. 1.11 отложены экспериментальные данные R_{zz} как функция \sqrt{B} . Из этого графика видно, что фоновое магнитосопротивление действительно следует этому теоретическому предсказанию в интервале полей $B > 1.2$ Т. Данные в этом интервале можно подогнать считая магнитосопротивление суммой члена с корневой зависимостью, описываемой Ур. (1.29) и (1.30)), и постоянного (не зависящего от поля) члена, сравнимого с $\bar{R}_{zz}(B = 0)$. Результат такой подгонки изображен штрих-пунктирной красной линией на Рис. 1.11 и дает оценку для времени рассеяния $\tau = 10$ ps. Не зависящий от магнитного поля B

член, добавленный в подгонку, появляется из-за дополнительных механизмов рассеяния (например, дислокаций) и, возможно, из-за электрических контактов.

В поле ниже 1.5 Т условия сильного поля $\omega_c\tau \gg 1$ и $\hbar\omega_c/t_\perp \gg 1$, приводящие к корневой зависимости магнитосопротивления, не выполнены, что приводит к отклонениям от линейной по \sqrt{B} зависимости. Дополнительно, нужно учесть носителей заряда на квази-одномерных листах поверхности Ферми (ПФ), которые вносят примерно такой же вклад в плотность состояний на уровне Ферми, что и рассмотренные выше электроны на квази-двумерных частях ПФ. Вклад в проводимость σ_{zz} от квази-одномерных листов ПФ быстро уменьшается с ростом поля (приблизительно, квадратично) для всех направлений поля кроме соизмеримых с кристаллом, когда поле направлено вдоль одного из векторов трансляции кристаллической решетки (так называемых, "магических углов Лебеда") [6, 110, 111]. Из-за низкой кристаллической симметрии α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄, ближайшее соизмеримое направление существенно (на $\approx 13^\circ$) отклоняется от оси z -axis, вдоль которой было направлено поле в нашем эксперименте.[112] Поэтому, квази-одномерных носителей в σ_{zz} сильно подавлен в магнитном поле $B \gtrsim B_0 = \hbar/(e\tau v_F a_z \tan 13^\circ)$, приложенном перпендикулярно слоям. Подставляя время рассеяния $\tau = 10$ ps, скорость Ферми на квази-одномерных листах[113] $v_F = 1.2 \times 10^5$ m/s, и постоянную решетки перпендикулярно слоям[112] $a_z = 2.0$ nm, получаем оценку $B_0 \approx 1.1$ Т. Поэтому, резкий наклон магнитосопротивления в слабом поле $B_0 \sim 1$ Т мы объясняем "заморозкой" вклада квази-одномерных носителей заряда. В поле выше ~ 1 Т проводимость предположительно определяется только носителями заряда на квази-двумерных частях поверхности Ферми.

При большом поле $B > 16$ Т, когда осцилляции магнитосопротивления становятся сравнимы с монотонной фоновой частью (см. Рис. 1.10 и 1.11), возникают вопросы о методе усреднения осцилляций (в проводимости или в сопротивлении) для извлечения фонового магнитосопротивления. Вероятно, с этим связано небольшое отклонение усредненного магнитосопротивления от прямой на на Рис. 1.11. Кроме этого, при $B > 16$ Т и сильных квантовых осцилляциях, члены, нелинейные по амплитуде осцилляций, вносят вклад в проводимость, аналогично Ур. (19) и (21) в статье [32]. Эти дополнительные члены можно оценить сверху как $\Delta\sigma_{zz} \propto R_{D*}^2 \approx \exp(-2\pi/\omega_c\tau)$, где фактор Дингла R_{D*} определен рассеянием на точечных примесях. Подставляя $\tau = 10$ ps и эффективную электронную массу $m^* = 1.3$ мы получаем $\Delta\sigma_{zz} \propto \exp(-B_*/B)$, где $B_* \approx 5$ Т. Этот эффект, как и указанная выше неопределенность в способе усреднения осцилляций магнитосопротивления, может быть причиной небольшого

отклонения фонового магнитосопротивления от прямой на на Рис. 1.11 при $B > 16$ Т. В целом, данные на Рис. 1.11 являются надежным экспериментальным подтверждением корневой зависимости продольного межслоевого магнитосопротивления, предсказанного в разделах 1.2 и 1.3 (см. Ур. (1.29) и (1.30)).

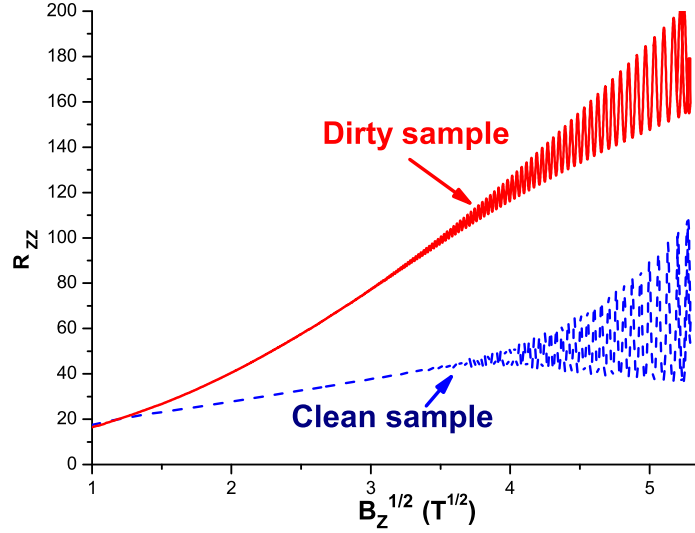


Рисунок 1.12: Межслоевое магнитосопротивление R_{zz} в α -(BEDT-TTF) $_2$ KHg(SCN) $_4$ в "чистом" образце с $\tau \approx 10$ ps (штриховая синяя линия) и в "грязном" образце с $\tau \approx 3$ ps (сплошная красная линия), отложенные как функция $\sqrt{B_z}$. Из этого графика видно, что в "грязном" образце линейная зависимость $\bar{R}_{zz}(\sqrt{B_z})$ начинается с магнитного поля в 3 раза большего чем в "чистом" образце, в согласии с оценкой поля кроссовера в Ур. (1.44). Экспериментальные данные получены группой М. Kartsovnik из Walther-Meissner-Institute for Low Temperature Research (Гархинг, Германия) и частично опубликованы в совместной статье №5 списка публикаций диссертанта.

Интересно также проследить, как меняются экспериментальные кривые фонового магнитосопротивления при изменении τ . Изложенная в разделе 1.2.4 теория [см. Ур. (1.44)] предсказывает, что корневой рост магнитосопротивления начинается с магнитного поля, соответствующего $\omega_c \tau \approx \pi/2$. Следовательно можно ожидать, что в более грязном образце, соответствующем меньшему τ , монотонный рост продольного межслоевого магнитосопротивления начинается с большего поля. На Рис. 1.12 отложены экспериментальные данные по межслоевому магнитосопротивлению R_{zz} в α -(BEDT-

$\text{TTF})_2\text{KHg}(\text{SCN})_4$ в "чистом" образце с $\tau \approx 10$ ps (штриховая черная линия, совпадающая с данными на Рис. 1.11) и в "грязном" образце с $\tau \approx 3$ ps (сплошная красная линия), отложенные как функция $\sqrt{B_{zz}}$. Отношение значений τ в этих двух образцах, равное приблизительно 3, было получено на основе данных об остаточном сопротивлении при $T \rightarrow 0$ в отсутствие магнитного поля. Из Рис. 1.12 видно, что линейная зависимость $\bar{R}_{zz}(\sqrt{B_{zz}})$ в грязном образце начинается с магнитного поля, которое в ~ 3 раза больше, чем в чистом образце. Это согласуется с оценкой поля кроссовера $\omega_c \tau \approx \pi/2$ в Ур. (1.44).

Монотонный рост продольного межслоевого магнитосопротивления $\bar{R}_{zz}(B_z)$ наблюдался во многих других сильно анизотропных слоистых металлах.[31, 40, 42, 43, 44, 45, 46, 47] Например, близкая к корневой зависимость $\bar{R}_{zz}(B_z)$ наблюдалась также в органическом металле κ -(BEDT-TTF) $_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$ (см. Рис. 1.13).[43] В этом веществе условие $\hbar\omega_c \gg \Gamma_0, t_\perp$ также выполняется при доступном магнитном поле $B_z \gtrsim 1\text{T}$. В соединениях с большим t_z наблюдалось также линейное магнитосопротивление в некотором интервале полей и даже кроссовер от линейной к корневой зависимости $\bar{R}_{zz}(B_z)$ при повышении поля B_z в органических металлах семейства β^n -(BEDT-TTF) $_4(\text{H}_2\text{O})\text{M}(\text{C}_2\text{O}_4)_3\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$, где $\text{M}=\text{Ga}, \text{Fe}$ (см. Рис. 4 в статье [40]). Эти эксперименты находятся в согласии с расчетами, проведенными в разделе 1.3.

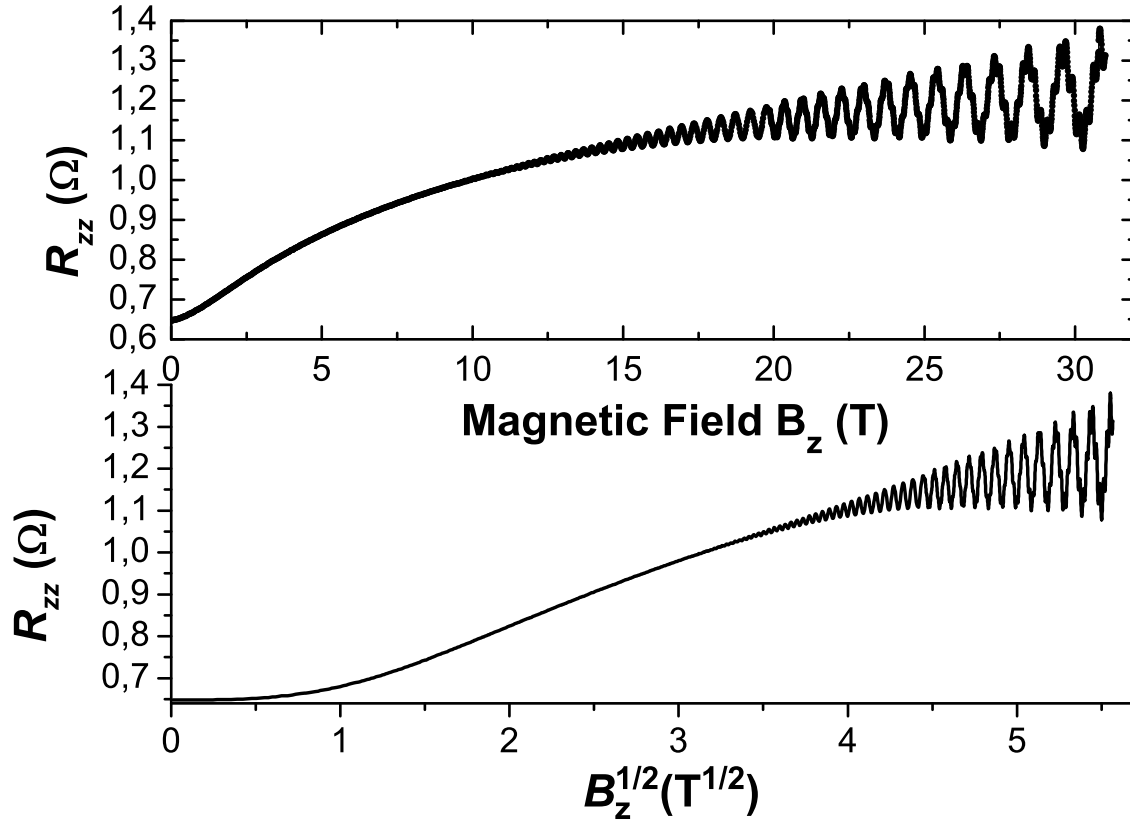


Рисунок 1.13: Продольное межслоевое магнитосопротивление $R_{zz}(B_z)$ в органическом металле $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu(NCS)_2$ как функция магнитного поля B_z (верхний график) и как функция квадратного корня из магнитного поля $\sqrt{B_z}$ (нижний график). Экспериментальные данные из статьи [43] в виде файла любезно предоставлены автором этой статьи W. Kang. Из графиков видно, что среднее магнитосопротивление растет приблизительно $\propto \sqrt{B_z}$ в согласии с Ур. (1.29) и (1.30). Небольшие отклонения от теоретической зависимости, наблюдающиеся при поле $B > 10\text{T}$, вероятно, связаны с магнитным пробоем в этом соединении при $B \gtrsim 10\text{T}$.

Глава 2

Магнитные квантовые осцилляции в сильно-анизотропных квазидвумерных металлах

2.1 Введение

Магнитные квантовые осцилляции являются традиционным и одним из самых эффективных инструментов для экспериментального изучения электронной структуры и геометрии поверхности Ферми в металлах.[1, 2, 3, 4] Они были предложены Л.Д. Ландау в 1930 [114] и измерены де Гаазом и ван Альфеном в том же году [115] в намагниченности. Поэтому квантовые осцилляции намагниченности были названы эффектом де Гааза - ван Альфена (дГВА). В обычных трехмерных металлах хорошее количественное описание этого эффекта дает формула Лифшица и Косевича (Л-К) [116, 1]:

$$\tilde{M}(B) \sim \frac{1}{\pi^2 \Phi_0^{3/2}} \sum_m \frac{A_m \sqrt{B}}{\sqrt{A_m'' m^*}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^{3/2}} \sin \left(k \frac{c A_m}{e \hbar c} \pm \frac{\pi}{4} \right) R_D(k) R_T(k) R_S(k) \quad (2.1)$$

где \tilde{M} есть осциллирующая часть намагниченности, B – индукция магнитного поля, $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e}$ есть квант магнитного потока, первая сумма по m есть сумма по всем экстремальным сечениям поверхности Ферми, A_m – площадь экстремального сечения, A_m'' – ее вторая производная по импульсу вдоль магнитного поля, вторая сумма по k есть сумма по гармоникам, $\omega_c = eB/m^*c$ есть циклотронная частота, m^* – эффективная масса электрона, фактор Дингла[117, 118]

$$R_D(k) \exp(-2\pi k \Gamma / \hbar \omega_c) \quad (2.2)$$

происходит от рассеяния электронов на примесях, температурный фактор затухания гармоник

$$R_T(k) = \frac{2\pi^2 T k / \hbar\omega_c}{\text{sh}(2\pi^2 T k / \hbar\omega_c)}, \quad (2.3)$$

и так называемый "спиновый" множитель уменьшения амплитуды квантовых осцилляций

$$R_S(k) = \cos\left(\pi k \frac{m^*}{m_e}\right) \quad (2.4)$$

Этот множитель связан с тем, что квантовые осцилляции для электронов с противоположными ориентациями спина вдоль магнитного поля в общем случае не совпадают по фазе, поскольку в Зеемановское расщепление входит масса свободного электрона m_e , а в расстояние между уровнями Ландау (УЛ) входит перенормированная (эффективная) масса m^* .

В двумерных и квазидвумерных соединениях наблюдаются существенные отклонения от формулы Л-К, особенно когда затухание гармоник слабо. С принципиальной точки зрения, эта проблема может быть легко решена, поскольку намагниченность есть термодинамическая величина, которая определяется только плотностью состояний. Проблема состоит в том, что формула Дингла в Ур. (2.2), полученная в трехмерном пределе в одноэлектронном приближении в предположении слабых осцилляций плотности состояний, вообще говоря не применима для описания рассеяния в двумерном случае. Поэтому расчет плотности состояний в двумерном металле в магнитном поле с учетом рассеяния на примесях и е-е взаимодействия до сих пор в общем случае не выполнен. Даже описание рассеяния на примесях в двумерном случае оказалось намного сложнее, чем в трехмерном, поскольку из-за вырождения уровней Ландау необходимо суммировать весь ряд теории возмущений. В двумерном случае в сильном магнитном поле плотность состояний точно не вычислена даже без учета е-е взаимодействия, несмотря на то что много работ было посвящено этой проблеме (например, [72, 71, 73, 74, 75, 81, 82, 84, 76, 77, 85, 78, 79]). По-видимому, е-е взаимодействием в двумерном случае также нельзя пренебрегать, если число заполненных уровней Ландау (УЛ) $n_{LL}^F \approx E_F / \hbar\omega_c \sim 1$, поскольку имеются указания на зависимость плотности состояний от положения химического потенциала, а также на температурную зависимость фактора Дингла. В пределе, когда энергия Ферми E_F много больше расстояния между уровнями Ландау и их ширины из-за рассеяния, е-е взаимодействие ослаблено малым параметром $\sqrt{\hbar\omega_c / E_F}$.

В рамках приближения двумерного электронного газа, вывод формулы для квантовых осцилляций намагниченности еще проще, чем в трехмерном случае, поскольку отсутствует дополнительное интегрирование по импульсам электронов вдоль магнитного поля. В

результате получается простая формула,[4] которую часто называют двумерным аналогом формулы Л-К:

$$\tilde{M} = \frac{2\mu}{\pi\Phi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \sin\left(\frac{2\pi k\mu}{\hbar\omega_c}\right) R_D(k) R_T(k) R_S(k) \quad (2.5)$$

где $\mu = E_F$ - химический потенциал. Фактор Дингла $R_D(k)$ в Ур. (2.5) вообще говоря не известен, но в пределе слабых квантовых осцилляций может быть приближенно взят в виде (2.2), а факторы затухания гармоник даются формулами (2.3)-(2.4), как и в трехмерном случае. Эта формула отличается от формулы Л-К в Ур. (2.1) степенью k в сумме по гармоникам и большей амплитудой осцилляций. Данная формула применима только в чисто двумерном пределе и не учитывает осцилляций химического потенциала, которые могут быть существенны в двумерном случае, если $T, \Gamma \ll \hbar\omega_c$. Кроме этого, одночастичное приближение в двумерной электронной системе менее оправдано, чем в трехмерном металле. Поэтому, в двумерных электронных системах иногда оказываются существенными поправки от электрон-электронного взаимодействия.[137]

В сильно анизотропных квазидвумерных металлах, закон дисперсии электронов (в кристаллах с достаточной симметрией) в приближении сильной связи [1] дается Ур. (1.9). Если интеграл межслоевого перескока $t_z \sim \hbar\omega_c$, вывод трехмерных формул в Ур. (2.1)-(2.5) вообще говоря не верен, поскольку он предполагает разложение (до первого неисчезающего члена) по параметру $\hbar\omega_c/t_z$, который в квазидвумерных металлах не мал. Однако в одночастичном приближении и в предположении постоянной Γ (пределе слабых квантовых осцилляций плотности состояний) можно обобщить Ур. (2.5) на случай квазидвумерного электронного газа с законом дисперсии (1.9).[129] При $\hbar\omega_c \sim t_z$, но при $\hbar\omega_c \ll E_F$, когда заполнено много уровней Ландау, теория Ферми жидкости все еще применима и можно использовать одночастичное приближение для электронов с перенормированным сильно анизотропным законом дисперсии в Ур. (1.9), не предполагая параметр $\hbar\omega_c \sim t_z$ малым. Тогда функция Грина электронов в совпадающих точках дается формулой (1.56), причем сумма по УЛ может быть представлена в виде суммы по гармоникам с помощью формулы Пуассона:

$$G_R(\varepsilon) = -\frac{2\pi i g_{LL}}{\hbar\omega_c d} \sum_{k \in N} \left[1 + 2(-1)^k \exp\left\{2\pi i k \frac{\varepsilon - \Sigma(\varepsilon)}{\hbar\omega_c}\right\} J_0\left(\frac{4\pi k t_z}{\hbar\omega_c}\right) \right]. \quad (2.6)$$

В одночастичном приближении и в предположении постоянной мнимой части электронной собственно-энергетической части $\text{Im}\Sigma = \Gamma_0$, плотность электронных состояний такого Ферми-газа дается суммой постоянного и осциллирующего слагаемых:

$$\rho(E, B) = -\text{Im}G_R(E) / \pi = \rho_0(E, B) + \tilde{\rho}(E, B),$$

где осциллирующая часть плотности состояний при $E \gg \hbar\omega_c$ может быть записана в виде ряда по гармоникам[129]

$$\tilde{\rho}(E, B) = \frac{4g_{LL}}{\hbar\omega_c} \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l \cos\left(\frac{2\pi l E}{\hbar\omega_c}\right) J_0\left(\frac{4\pi l t_z}{\hbar\omega_c}\right) R_D(l) R_S(l) \quad (2.7)$$

В этой формуле $g_{LL} = B/\Phi_0$ есть кратность вырождения уровней Ландау, а $J_0(x)$ есть функция Бесселя первого рода. Множитель $J_0(4\pi l t_z/\hbar\omega_c)$ отличает эту формулу от двумерного предела. Неосциллирующая часть плотности состояний

$$\rho_0(E, B) = \frac{2g_{LL}}{\hbar\omega_c} (1 + n_R(E)) \quad (2.8)$$

где $n_R(E)$ есть отношение плотности электронного резервуара к средней плотности состояний на квази-двумерной части поверхности Ферми. Электронный резервуар может происходить от открытых листов (квазиодномерных частей) поверхности Ферми, которые не вносят прямого вклада в магнитные квантовые осцилляции плотности состояний, поскольку уровни энергии на них не осциллируют как уровни Ландау.

Если известна плотность состояний, то можно вычислить термодинамический потенциал

$$\Omega(\mu, B, T) = -T \int_0^{\infty} \rho(E, B) \ln \left[1 + \exp\left(\frac{\mu - E}{T}\right) \right] dE = \Omega_0(\mu, B, T) + \tilde{\Omega}(\mu, B, T) \quad (2.9)$$

где μ есть химический потенциал, а осциллирующая часть термодинамического потенциала дается выражением[129]

$$\tilde{\Omega} = 2g_{LL}T \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^l}{l} \cos\left(\frac{2\pi l \mu}{\hbar\omega_c}\right) J_0\left(\frac{4\pi l t_z}{\hbar\omega_c}\right) R_D(l) R_T(l) R_S(l). \quad (2.10)$$

Осциллирующая часть намагниченности при постоянном химическом потенциале[129]

$$\begin{aligned} \tilde{M}(B) &= -\frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial B} \Big|_{\mu=const} = \frac{2g_{LL}}{\pi B} \varepsilon_F \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} R_D(l) R_T(l) R_S(l) \times \\ &\times \left\{ \sin\left(\frac{2\pi l \mu}{\hbar\omega_c}\right) J_0\left(\frac{4\pi l t_z}{\hbar\omega_c}\right) + \frac{2t_z}{\mu} \cos\left(\frac{2\pi l \mu}{\hbar\omega_c}\right) J_1\left(\frac{4\pi l t_z}{\hbar\omega_c}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

В пределе $t_z \gg \hbar\omega$ можно воспользоваться асимптотическими разложениями функций Бесселя при большом значении аргумента:

$$J_0(x) \approx \sqrt{2/\pi x} \cos(x - \pi/4), \quad x \gg 1 \quad (2.12)$$

$$J_1(x) \approx \sqrt{2/\pi x} \sin(x - \pi/4), \quad x \gg 1 \quad (2.13)$$

Подставляя эти асимптотические выражения в Ур. (2.11) мы приходим к трехмерной формуле Лифшица-Косевича в Ур. (2.1).

Формула (2.11) дает удобное выражение для осцилляций намагниченности в квазидвумерных металлах, не предполагающее малости параметра $\hbar\omega_c/t_z$. При выводе этой формулы были сделаны два предположения. Первое, что закон Дингла затухания гармоник верен и в квазидвумерных металлах, что эквивалентно предположению о постоянной (не зависящей от магнитного поля, энергии и квантовых чисел) мнимой части электронной собственно-энергетической части $\text{Im}\Sigma = \Gamma_0$. Второе, что химический потенциал $\mu(B)$ постоянный, то есть пренебрегая его осциллирующей зависимостью от магнитного поля. Оба эти предположения верны в трехмерном пределе $t_z \gg \hbar\omega_c$, но могут нарушаться при $t_z \lesssim \hbar\omega_c$. Если нарушение закона Дингла затухания гармоник приводит к изменению амплитуд более высоких гармоник, то есть к изменению формы осцилляций, то осцилляции химического потенциала, кроме изменения формы осцилляций намагниченности, могут приводить к перемешиванию частот [138] (важно если имеется несколько фундаментальных частот магнитных квантовых осцилляций) и изменению температурной зависимости более высоких гармоник [139]. Осцилляции химического потенциала сильны (то есть сравнимы с расстоянием между УЛ) только в двумерных (обычно, искусственных) металлах, например, для GaAs-AlGaAs гетероструктур [133, 134], но могут также наблюдаться в некоторых природных металлах [135]. Тем не менее, квантовые осцилляции химического потенциала μ в природных металлах обычно подавлены магнитоотрицательностью, как впервые было показано в работе [140]. Это наблюдение квантовых осцилляций объема образца не удивительно, поскольку делокализованные электроны дают главный вклад в модуль упругости металлов. [136] Поэтому, даже в очень анизотропных (почти двумерных) слоистых органических металлах, как например β'' -(BEDT-TTF)₂SF₅CH₂CF₂SO₃, квантовые осцилляции химического потенциала пренебрежимо малы, как было экспериментально показано из анализа формы осцилляций намагниченности, [92] которая оказалась соответствующей теории при постоянном химическом потенциале (см. Рис. 3 в [92]). Поэтому, на качественном уровне эффект де Гааза - ван Альфена хорошо описывается формулой (2.11), а влияние осцилляций химического потенциала на намагниченность в квазидвумерных металлах будет рассмотрено в Приложении Б.1.

В отличие от намагниченности, квантовые осцилляции магнитосопротивления в квазидвумерных металлах приобретают некоторые качественно новые черты, которые не описываются стандартной трехмерной теорией. Некоторым из этих качественных

изменений посвящена эта глава.

Квантование электронного спектра в магнитном поле приводит к магнитным квантовым осцилляциям не только намагниченности, но и всех других наблюдаемых электронных свойств, как термодинамических, так и транспортных (см. главу 4 в [4]). Электронная проводимость также проявляет магнитные квантовые осцилляции. Этот эффект был открыт Шубниковым и де Гаазом даже на несколько месяцев раньше, чем эффект де Гааза - ван Альфена [119]. Квантовые осцилляции магнитосопротивления (эффект Шубникова - де Гааза (ШдГ)) в рамках стандартной теории, развитой для трехмерных металлов (см. [120], главу 11 в [1] или параграф 90 в [121]), происходят главным образом от осцилляций времени рассеяния электронов $\tau(\varepsilon)$, которое в рамках борновского приближения обратно пропорционально осциллирующей плотности электронных состояний $\rho(\varepsilon)$: $\tau(\varepsilon) \propto \rho^{-1}(\varepsilon)$. В результате осцилляции продольного магнитосопротивления даются формулой

$$\tilde{\sigma}(B) \sim \sum_m \frac{1}{\sqrt{A_m''}} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{p}} R_T(p) R_D(p) R_s(p) \cos \left[2\pi p \left(\frac{F_m}{B} - \frac{1}{2} \right) \pm \frac{\pi}{4} \right] \sim \frac{\partial M}{\partial B}, \quad (2.14)$$

где кроме суммы по гармоникам p еще берется сумма по всем экстремальным сечениям поверхности Ферми m . Применительно к квазидвумерным металлам с законом дисперсии в Ур. (1.9) эта формула дает

$$\sigma_{zz}^{3D}(B) = \sigma_0 \left\{ 1 + 2 \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2\pi^2 t_z}} \cos \left(\frac{4\pi t_z}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4} \right) R_D^{tot} R_T \cos \left(\frac{2\pi \mu}{\hbar\omega_c} \right) \right\}, \quad (2.15)$$

где σ_0 дается Ур. (1.52), совпадающим с Ур. (1.16).

Также как и в случае намагниченности, трехмерные формулы (2.14) и (2.15) не применимы к квазидвумерным металлам при $t_z \lesssim \hbar\omega_c$, поскольку предполагает разложение по малому параметру $t_z/\hbar\omega_c$ до первого не исчезающего члена. Обобщение формулы (2.14) для эффекта Шубникова - де Гааза на случай $t_z \sim \hbar\omega_c$ оказывается более нетривиальным, чем для намагниченности, определяемой только плотностью состояний. Конечно, речь не идет о решении проблемы квантового эффекта Холла [76], что не возможно в рамках трехмерной теории магитосопротивления и не нужно при конечном t_z . В следующем разделе мы покажем, что даже когда ситуация почти трехмерная, то есть когда дисперсия электронов в межслоевом направлении больше расстояния между уровнями Ландау ($t_z > \hbar\omega_c$) и можно использовать трехмерный подход к вычислению магнитосопротивления, учет следующих членов разложения по параметру $t_z/\hbar\omega_c$ приводит к новым качественным эффектам, которые могут быть

использованы для извлечения полезной информации о металле по осцилляционной зависимости магнитосопротивления. В частности, ниже будут объяснены и исследованы так называемые "медленные" осцилляции магнитосопротивления и сдвиг фазы биений осцилляций термодинамических и транспортных электронных свойств. Впервые эти эффекты были наблюдаемы в экспериментальных работах [160] и объяснены в работах [33, 31, 157] диссертанта. Изложенное ниже (в разделе 2.2) теоретическое описание этих явлений соответствует работе [32] (№ 8 в списке публикаций диссертанта). Приведенное в разделе 2.3 сравнение с экспериментом опубликовано в статьях № 9 и 10 в списке публикаций диссертанта, а материалы приложения Б.1 в статье № 11 этого списка.

Поперечное магнитосопротивление в двумерных электронных системах изучалось теоретически во многих работах [71, 72, 28]. Попытки теоретического описания эффекта Шубникова - де Гааза в квази-двумерных металлах также проводились [128, 141, 142], однако, в них были сделаны слишком сильные приближения или рассматривался другой параметрический предел. Поэтому в этих работах не были предсказаны существенные качественные различия с трехмерной формулой (2.15). В частности, "медленные" осцилляции и сдвиг фазы биений магнитосопротивления, наблюдаемые во многих органических металлах [148, 149, 150, 151, 152, 153], оставались загадкой. Ниже мы рассмотрим все эти явления.

2.2 Магнитные квантовые осцилляции межслоевой проводимости

2.2.1 Общие формулы для межслоевой проводимости

Как и в предыдущей главе (раздел 1.3), рассмотрим квазидвумерный металл в магнитном поле, перпендикулярном проводящим слоям: $\vec{B} \parallel \vec{z}$ (обобщение на случай наклонного поля дается перенормировкой межслоевого интеграла перескока в Ур. (3) и рассмотрено в главе 3). Электронный спектр дается Ур. (1.9) и (1.3):

$$\epsilon(n, k_z) = \hbar\omega_c (n + 1/2) - 2t_z \cos(k_z d) \quad (2.16)$$

где t_z – межслоевой интеграла перескока, k_z – волновой вектор электронов, перпендикулярный проводящим слоям, d – межслоевое расстояние, $\omega_c = eB/m^*c$ – циклотронная частота. $\hbar\omega_c$ и t_z предполагаются много меньше энергии Ферми $E_F \approx \mu$. В отличие от предыдущей главы, где изучался предел $4t_z < \hbar\omega_c$, в этой главе мы рассмотрим

случай $t_z \gtrsim \hbar\omega_c$.

Как и в разделе 1.3, для вычисления проводимости мы используем трехмерную формулу Кубо [154], и процедура вычисления продольного магнитосопротивления во многом похожа на вычисления без магнитного поля (см. [154], раздел 7.1.2), в отличие от вычисления поперечного магнитосопротивления (см. [121]). Набор квантовых чисел в магнитном поле $m \equiv \{n, k_z, k_y\}$ вместо \vec{p} , и закон дисперсии дается Ур. (2.16). В этом разделе мы рассмотрим только перпендикулярную к проводящим слоям компоненту проводимости σ_{zz} , поскольку эта компонента легче как для измерений, так и для теоретического описания. Без вершинных поправок (которыми для точечных примесей можно пренебречь), формула Кубо дает [см. Ур. (1.46)]

$$\sigma_{zz} = \frac{e^2 \hbar}{V} \sum_m v_z^2(m) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} |2\text{Im}G_R(m, \varepsilon)|^2 (-n'_F(\varepsilon)) \quad (2.17)$$

где объем V нормирует сумму по квантовым числам m , e – заряд электрона, v_z скорость электрона, определяемая из закона дисперсии в Ур. (2.16) и описываемая Ур. (1.47), $n'_F(\varepsilon) = -1/\{4T \text{ch}^2[(\varepsilon - \mu)/2T]\}$ – производная от функции распределения Ферми как и в Ур. (1.13), запаздывающие функции Грина электронов $G_R(m, \varepsilon)$ связаны с собственно-энергетической частью $\Sigma^R(m, \varepsilon)$ стандартным соотношением в Ур. (1.48), которое дает

$$\text{Im}G_R(m, \varepsilon) = \frac{\text{Im}\Sigma^R(m, \varepsilon)}{[\varepsilon - \epsilon(m) - \text{Re}\Sigma^R(m, \varepsilon)]^2 + [\text{Im}\Sigma^R(m, \varepsilon)]^2}. \quad (2.18)$$

Электронная собственно-энергетическая часть $\Sigma^R(m, \varepsilon)$ происходит от рассеяния. Главный вклад в сопротивление при низкой температуре происходит от рассеяния на короткодействующих примесях, которые как и в предыдущей главе мы аппроксимируем точечными. Мы также пренебрежем диаграммами с пересечением примесных линий в собственно-энергетической части (вклад этих диаграмм в трехмерном пределе пренебрежимо мал). Тогда электронная собственно-энергетическая часть зависит только от энергии: $\Sigma^R(m, \varepsilon) = \Sigma^R(\varepsilon)$ (см. Приложение А.1). Это очень облегчает вычисления, поскольку сумма по квантовым числам m в формуле (1.46) может быть вычислена аналитически.

В действительной части $\text{Re}\Sigma^R(\varepsilon)$ электронной собственно-энергетической части можно оставить только малое осциллирующее слагаемое $\text{Re}\tilde{\Sigma}^R(\varepsilon)$, поскольку неосциллирующее и слабо зависящее от энергии слагаемое $\text{Re}\Sigma^R(\varepsilon)$ приводит лишь к сдвигу химического потенциала и не влияет на проводимость. Малое осциллирующее слагаемое $\text{Re}\tilde{\Sigma}^R(\varepsilon)$ входит в комбинации $\varepsilon^* \equiv \varepsilon - \text{Re}\tilde{\Sigma}^R(\varepsilon)$. Напротив, мнимая часть электронной собственно-

энергетической части $\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)$ описывает релаксацию импульса электронов и важна для проводимости.

Выполняя суммирование по k_y in (1.46) и заменяя интегрирование по k_z интегрированием по энергии $\varepsilon' \equiv \varepsilon(n, k_z)$, получаем

$$\sigma_{zz} = e^2 N_{LL} d \int \frac{d\varepsilon'}{\pi} \sum_n |v_z(\varepsilon', n)| \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} 4 |\text{Im}G_R(\varepsilon', \varepsilon)|^2 (-n'_F(\varepsilon)) \quad (2.19)$$

где $N_{LL} \equiv B/\Phi_0 d = g_{LL}/d$ – плотность электронов на одном УЛ, $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e$ – квант потока магнитного поля, и скорость электронов $v_z(\varepsilon, n)$ дается Ур. (Б.12). Теперь преобразуем сумму по уровням Ландау (УЛ) в сумму по гармоникам, используя формулу Пуассона (См. Приложение Б.2). Подставляя (Б.13) в (2.19) получаем

$$\sigma_{zz} = e^2 N_{LL} \sum_{k=-\infty}^{\infty} (-1)^k \frac{2td^2}{\hbar k} J_1\left(\frac{4\pi k t_z}{\hbar\omega_c}\right) \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} (-n'_F(\varepsilon)) I_z(\varepsilon, k) \quad (2.20)$$

где для нулевой гармоники $k = 0$ следует использовать разложение $J_1(kx)/k = x/2$, а интеграл $I_z(\varepsilon, k)$ по ε' с функцией Грина в Ур. (2.18) дает:

$$I_z(\varepsilon, k) \equiv \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} 4 |\text{Im}G_R(\varepsilon', \varepsilon)|^2 \exp\left(\frac{2\pi i k \varepsilon'}{\hbar\omega_c}\right) = \quad (2.21)$$

$$= \exp\left(\frac{2\pi i k \varepsilon^*}{\hbar\omega_c}\right) \left(\frac{1}{|\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)|} + \frac{2\pi k}{\hbar\omega_c}\right) R_D(k, \varepsilon) \quad (2.22)$$

где $\varepsilon^* \equiv \varepsilon - \text{Re}\tilde{\Sigma}^R(\varepsilon)$ и фактор Дингла

$$R_D(k, \varepsilon) = \exp(-2\pi |k| |\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)| / \hbar\omega_c) \quad (2.23)$$

имеет вид, близкий к обычному фактору Дингла $R_D(k) = \exp(-2\pi k \Gamma_0 / \hbar\omega_c)$ в Ур. (2.2). Собирая формулы (2.20) и (2.22) получаем

$$\begin{aligned} \sigma_{zz} &= e^2 N_{LL} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} (-n'_F(\varepsilon)) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^k 2t_z d^2}{\hbar k} J_1\left(\frac{4\pi k t_z}{\hbar\omega_c}\right) \times \\ &\times \exp\left(\frac{2\pi i k \varepsilon^*}{\hbar\omega_c}\right) \left(\frac{1}{|\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)|} + \frac{2\pi k}{\hbar\omega_c}\right) R_D(k, \varepsilon). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Заметим, что это выражение имеет дополнительный ”квантовый” член $2\pi k / \hbar\omega_c$ в дополнение к стандартному члену $1/|\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)|$ в круглых скобках во второй строчке. Этот член не может быть получен из транспортного уравнения Больцмана (сравните, например, с результатами в работах [33] и [31]). Проанализируем, откуда берется этот член. Функция $[2\text{Im}G_R(\varepsilon', \varepsilon)]^2 = G_A^2 + G_R^2 - 2G_A G_R$ в Ур. (2.21) имеет один полюс первого

прядка и один полюс второго порядка в каждой комплексной полуплоскости. Полюс первого порядка появляется от последнего члена $-2G_A G_R$, а полюс второго порядка от члена $G_A^2 + G_R^2$. В стандартной теории проводимости учитываются только полюса первого порядка, происходящие от произведения $G_A G_R$. Вклад от полюсов второго порядка в интеграл в Ур. (2.22) достаточно велик, и для k -той гармоники $\sim 2\pi k \Gamma_0 / \hbar \omega_c$. Однако при $t_z \gg \hbar \omega_c$ основной вклад в осцилляции магнитосопротивления в Ур. (2.22) происходит из осцилляций $1/|\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)|$. Поэтому, в трехмерных металлах вклад от полюсов второго порядка мал по параметру $\hbar \omega_c / 2t_z \sim \hbar \omega_c / \varepsilon_F \ll 1$ и может не учитываться. Однако, в квазидвумерных металлах, для которых $\hbar \omega_c / 2t_z \sim 1$, вклад от полюсов второго порядка в магнитные квантовые осцилляции проводимости нужно учитывать.

Для дальнейшего расчета проводимости из Ур. (2.24) необходим явный вид $|\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)|$.

2.2.2 Самосогласованное борновское приближение: разложение по гармоникам

Как и в предыдущей главе, для вычисления $|\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)|$ мы воспользуемся самосогласованным борновским приближением. Диаграммное представление соответствующего уравнения Дайсона для электронной собственно-энергетической части изображено на Рис. 2.1. Член первого порядка, изображенный одиночной штриховой линией на Рис. 2.1, после усреднения по примесям приводит только постоянному сдвигу химического потенциала и может быть опущен.

$$\Sigma = \text{---} \cdot + \text{---} \triangle \text{---}$$

Рисунок 2.1: Уравнения Дайсона для электронной собственно-энергетической части в самосогласованном борновском приближении. Двойная сплошная линия изображает точную функцию Грина. В отличие от Рис. 1.1, правая часть содержит только два члена.

Соответствующее аналитическое выражение [см. Ур. (1.57)]

$$\Sigma^R(m, \varepsilon) = \left\langle \sum_i U^2 G(r_i, r_i, E) \right\rangle = n_i U^2 \int d^3r G(r, r, E) \quad (2.25)$$

где сумма \sum_i берется по всем примесям, угловые скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по положениям примесей, n_i – концентрация случайно расположенных примесей [156, 94].

Электронная функция Грина $G(r, r, E)$ в Ур. (2.25) содержит собственно-энергетическую часть, определяемую из того же Ур. (2.25). Усредненная по примесям функция Грина однородна вдоль проводящей плоскости. Поэтому, можно записать

$$G(r, r, E) = |\phi(z)|^2 G(E). \quad (2.26)$$

Волновая функция электронов $\phi(z)$ вдоль оси z не входит в конечный ответ, поскольку исчезает после интегрирования по z в Ур. (2.25), и функция Грина в совпадающих точках принимает вид (см. Ур. (31) в работе [129])

$$G(E) = \frac{-i\pi g_{LL}}{\hbar\omega_c} \left[1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k J_0 \left(\frac{4\pi k t_z}{\hbar\omega_c} \right) \exp \left(2\pi i k \frac{E - \Sigma(E)}{\hbar\omega_c} \right) \right]. \quad (2.27)$$

Формулы (2.26) и (2.27) могут быть получены суммированием по квантовым числам $m \equiv \{n, k_z, k_x\}$ в стандартной формуле для функции Грина в совпадающих точках, являющейся частным случаем Ур. (1.54):

$$G(r, r, E) = \sum_{n, k_z, k_x} \frac{\Psi_{n, k_z, k_x}^*(r) \Psi_{n, k_z, k_x}(r)}{E - \epsilon(n, k_z) - \Sigma(E)}. \quad (2.28)$$

Электронная волновая функция $\Psi_{n, k_z, k_x}(r)$ в калибровке Ландау дается выражением [93]

$$\Psi_{n, k_z, k_x}(r) = \frac{e^{i(k_x x + k_z z)}}{\sqrt{L_x L_z}} \chi_n(y - y_0) \phi(z)$$

где $y_0 = -c\hbar k_x / eB$, а для интегрирования по k_x в Ур. (2.28) используется условие нормировки $\int_{-\infty}^{\infty} |\chi_n(y)|^2 dy = 1$. Дальнейшее вычисление суммы в Ур.(2.28) аналогично проделанным при выводе Ур. (1.46).

Борновское приближение, описываемое Ур. (2.25)), учитывает только первый член разложения по малому параметру $\pi U N_{LL} / \hbar\omega_c = \pi f / d$, где f – амплитуда рассеяния на примесях. При этом среднее значение мнимой части собственно-энергетической части связано с временем свободного пробега и с температурой Дингла $T_D = \Gamma_0 / \pi = \hbar / 2\pi\tau$: $\langle |\text{Im}\Sigma^R(m, \varepsilon)| \rangle = \Gamma_0 = \pi k_B T_D$.

Система уравнений (2.25-2.27) дает

$$|\text{Im}\Sigma^R(m, \varepsilon)| = \Gamma_0 \left(1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k J_0 \left(\frac{4\pi k t_z}{\hbar\omega_c} \right) \cos \left(\frac{2\pi k \varepsilon^*}{\hbar\omega_c} \right) R_D(k, \varepsilon) \right). \quad (2.29)$$

Вместе с Ур. (2.23) это дает нелинейное уравнение на $\text{Im}\Sigma^R(m, \varepsilon)$. Мы можем его решить аналитически в пределе сильного затухания гармоник, раскладывая по малому параметру

$R_D \sqrt{\hbar\omega_c/2\pi^2 t_z}$, который примерно равен отношению осциллирующей к постоянной части плотности электронных состояний.

Ниже, для изучения предела сильного затухания квантовых осцилляций, нам потребуется разложение до второго порядка по параметру $R_D \sqrt{\hbar\omega_c/2\pi^2 t_z}$. При этом в Ур. (2.29) достаточно оставить только член первого порядка:

$$|\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)| \approx \Gamma_0 \left\{ 1 - 2J_0 \left(\frac{4\pi t_z}{\hbar\omega_c} \right) \cos \left(\frac{2\pi \varepsilon}{\hbar\omega_c} \right) R_{0D} \right\}, \quad (2.30)$$

где $R_{0D} = \exp(-2\pi\Gamma_0/\hbar\omega_c)$. Медленно осциллирующий член второго порядка в электронной собственно-энергетической части отсутствует, поскольку вклад от действительной части $\Sigma^R(\varepsilon)$ сокращает вклад от произведения первых гармоник в факторе Дингла в Ур. (2.23) и в Ур. (2.29). В этом можно убедиться прямым расчетом: во втором порядке по параметру $R_D \sqrt{\hbar\omega_c/2\pi^2 t_z}$, произведение

$$\cos \left(\frac{2\pi (\varepsilon - \text{Re}\tilde{\Sigma}^R(\varepsilon))}{\hbar\omega_c} \right) \exp \left(\frac{-2\pi |\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)|}{\hbar\omega_c} \right) = \cos \left(\frac{2\pi \varepsilon}{\hbar\omega_c} \right) R_{0D} \quad (2.31)$$

не дает медленно осциллирующего члена. Ур. (2.31) легко проверить прямой подстановкой в него Ур. (2.25) и (2.27).

2.2.3 Магнитные осцилляции межслоевой проводимости. Медленные осцилляции и сдвиг фазы биений.

Если затухание высших гармоник квантовых осцилляций достаточно сильное, то можно ограничиться только первыми гармониками. Тогда подставляя Ур. (2.30) и (2.31) в Ур. (2.24), получаем следующее выражение для межслоевой проводимости:

$$\begin{aligned} \sigma_{zz} = \sigma_0 \int d\varepsilon [-n'_F(\varepsilon)] \times & \quad (2.32) \\ \times \left\{ \frac{1 - \frac{\hbar\omega_c}{\pi t_z} J_1 \left(\frac{4\pi t_z}{\hbar\omega_c} \right) \cos \left(\frac{2\pi \varepsilon^*}{\hbar\omega_c} \right) R_D(\varepsilon)}{\left[1 - 2J_0 \left(\frac{4\pi t_z}{\hbar\omega_c} \right) \cos \left(\frac{2\pi \varepsilon^*}{\hbar\omega_c} \right) R_D(\varepsilon) \right]} - \right. \\ \left. - \frac{2\Gamma_0}{t_z} J_1 \left(\frac{4\pi t_z}{\hbar\omega_c} \right) \cos \left(\frac{2\pi \varepsilon^*}{\hbar\omega_c} \right) R_D(\varepsilon) \right\}, \end{aligned}$$

где неосциллирующая часть проводимости $\sigma_0 \approx (2e^2 g_{LL} 2t_z^2 d^2)/(\hbar^2 \omega_c \Gamma_0)$ совпадает с Ур. (1.16).

Если интеграл межслоевого перескока достаточно велик, $4\pi t_z \gg \hbar\omega_c$, можно использовать разложение функций Бесселя при большом значении аргумента:

$$\begin{aligned} J_0(x) &\approx \sqrt{2/\pi x} \cos(x - \pi/4), \quad x \gg 1 \\ J_1(x) &\approx \sqrt{2/\pi x} \sin(x - \pi/4), \quad x \gg 1. \end{aligned}$$

Тогда, снова разлагая по малому параметру $(R_D \sqrt{\hbar\omega_c/2\pi^2 t_z})$ и используя стандартные тригонометрические формулы, мы получаем

$$\begin{aligned} \sigma_{zz} = \sigma_0 \left\{ 1 + 2\sqrt{\frac{\hbar\omega_c(1+a^2)}{2\pi^2 t_z}} \cos\left(\frac{2\pi\mu}{\hbar\omega_c}\right) \cos\left(\frac{4\pi t_z}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4} + \phi_b\right) R_D^{tot} R_T + \right. \\ \left. + \frac{\hbar\omega_c}{2\pi^2 t_z} R_D^2 \sqrt{1+a_S^2} \cos\left[2\left(\frac{4\pi t_z}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4} + \phi_S\right)\right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

где сдвиг фазы биений

$$\phi_b = \arctan(a_\phi); \quad a_\phi = \frac{\hbar\omega_c}{2\pi t_z} \left(1 + \frac{2\pi\Gamma_0}{\hbar\omega_c}\right), \quad (2.34)$$

а фаза медленных осцилляций

$$\phi_S = \arctan(a_S)/2 \quad \text{где} \quad a_S = \hbar\omega_c/2\pi t_z. \quad (2.35)$$

Множитель температурного затухания гармоник R_T дается обычным выражением (2.3) формулы Лифшица-Косевича. Этот множитель возникает от интегрирования быстро осциллирующей функции ε с производной от функции распределения Ферми (1.13) и присутствует только в быстрых шубниковских осцилляциях. Медленно осциллирующий член [в последней строчке в формуле (2.33)] не зависит от ε , а только от t_z . Следовательно, этот член не приобретает температурного затухания в рамках данной модели, учитывающей только упругое рассеяние на примесях. Поэтому, несмотря на то, что амплитуда медленных осцилляций содержит фактор Дингла в квадрате, она может быть больше амплитуды быстрых шубниковских осцилляций [описываемых первой строчкой в Ур. (2.33)] при температуре T выше или порядка температуры Дингла $T_D \equiv \Gamma_0/\pi k_B$.

Если к рассеянию на примесях добавить температурно-зависящее рассеяние на фононах или электрон-электронное взаимодействие, которое вносит дополнительный вклад Γ_T/π в температуру Дингла $T_D = (\Gamma_0 + \Gamma_T)/\pi$, то появится температурное затухание медленных осцилляций, которое все равно будет намного слабее, чем затухание быстрых квантовых осцилляций, описываемое Ур. (2.3). В нормальных трехмерных металлах [1]

электрон-электронное взаимодействие приводит к мнимой части собственной энергии $\Gamma_{ee} = \hbar/2\tau_{ee} \sim (k_B T)^2 / \mu$, а рассеяние на фононах к $\Gamma_{ph} = \hbar/2\tau_{ph} \sim (k_B T) (k_B T / \hbar\omega_D)^2$. Можно приближенно (феноменологически) учесть вклад этих видов взаимодействия в квантовые осцилляции плотности состояний, введя дополнительный множитель затухания гармоник, который можно назвать температурно-зависящим фактором Дингла:

$$R_{TD} \approx \exp[-\pi(1/\omega_c\tau_{ee} + 1/\omega_c\tau_{ph})]. \quad (2.36)$$

Этот множитель входит в квадрате в амплитуду медленных осцилляций и определяет их температурное затухание. Температура T_{SO} , при которой медленные осцилляции подавляются, определяется условием $\pi(1/\omega_c\tau_{ee}(T_{SO}) + 1/\omega_c\tau_{ph}(T_{SO})) \approx 1$. В эксперименте [31] (см. следующий раздел) медленные осцилляции подавляются лишь при температуре $T_{SO} \approx 9K$, в то время как быстрые шубниковские осцилляции подавляются при температуре $T < 1K$.

Индекс "tot" в факторе Дингла R_D^{tot} быстрых квантовых осцилляций означает, что этот множитель происходит не только из-за рассеяния на короткодействующих примесях, как R_D в медленных осцилляциях [31], но происходит также от длинноволновых кристаллических дефектов, таких как макроскопические неоднородности образца, дислокации и др. Макроскопические неоднородности образца приводят к усреднению по энергии Ферми, а значит по фазе быстрых квантовых осцилляций в измеряемой проводимости или намагниченности. Напротив, медленные осцилляции практически не зависят от положения энергии Ферми, поэтому они не подавляются неоднородностями энергии Ферми вдоль образца на макроскопическом масштабе. Поэтому, факторы Дингла в медленных и быстрых осцилляциях отличаются.

Уравнение (2.33) имеет несколько качественных отличий от Ур. (2.15), получаемого из трехмерной теории, пренебрегающей всеми членами более высокого порядка по параметру $\sqrt{\hbar\omega_c/t_z}$. Первое качественное отличие – это появление "медленных" осцилляций, описываемых последней строчкой в Ур. (2.33):

$$\sigma_{zz}^{slow} = \frac{\sigma_0 \hbar\omega_c}{2\pi^2 t_z} R_D^2 \sqrt{1 + a_S^2} \cos \left[2 \left(\frac{4\pi t_z}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4} + \phi_S \right) \right]. \quad (2.37)$$

Как было указано выше, температурное затухание амплитуды этих медленных осцилляций не содержит обычного множителя R_T из Ур. (2.3), а значит оно оказывается на порядки слабее, чем температурное затухание быстрых шубниковских осцилляций. Кроме этого, частота медленных осцилляций

$$F_{slow} = \frac{2t_z B}{\hbar\omega_c} = \frac{2t_z m^* c}{e\hbar \cos \theta} \propto \frac{t_z(\theta)}{\cos \theta} \propto \frac{J_0(k_F d \tan \theta)}{\cos \theta} \quad (2.38)$$

имеет немонотонную зависимость от угла наклона θ магнитного поля \mathbf{B} из-за немонотонной зависимости $t_z(\theta)$, приближенно описываемой Ур. (3). Отметим, что частота F_b биений (амплитудной модуляции) шубниковских осцилляций, связана с частотой медленных осцилляций простым соотношением $F_{slow} = 2F_b$. Частота F быстрых шубниковских осцилляций в квазидвумерных металлах с цилиндрической ПФ, в отличие от частоты медленных осцилляций F_{slow} и биений F_b , монотонно возрастает с увеличением угла наклона поля θ по косинусоидальному закону: $F(\theta) = F(0)/\cos\theta$.

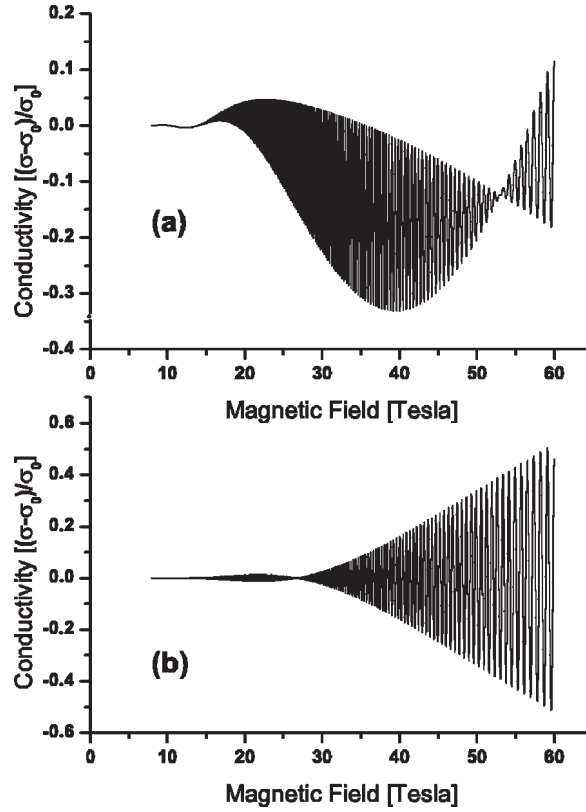


Рисунок 2.2: Межслоевая проводимость как функция магнитного поля, описываемая Ур. (2.33) (Рис. а) и стандартной трехмерной формулой (2.15) (Рис. б) при одинаковых параметрах, близких к экспериментам в органическом металле β -(BEDT-TTF) $_2$ IBr $_2$ в наклонном поле: температура Дингла $T_D \equiv \Gamma_0/\pi = 0.4\text{K}$, $T_D^{tot} = 1.0\text{K}$, температура $T = 1.2\text{K}$, частота биений $F_b = 10\text{T}$. Разница между трехмерной формулой (2.15) (Рис. б) и новой формулой (2.33) (Рис. а) очень велика.

На Рис. 2.2 сравнивается общий вид межслоевой проводимости как функции магнитного поля, описываемой Ур. (2.33) (Рис. 2.2а) и стандартной трехмерной формулой (2.15) (Рис. 2.2б) при одинаковых параметрах, близких к экспериментам. Разница

между этими зависимостями очень большая. Например, внешний узел биений (минимум амплитуды осцилляций) сдвинут с $B_{node}^{LK}=26.7T$ к $B_{node}=53T$. Следующий узел при меньшем поле также сдвинут, но намного слабее: с $11.5T$ к $13.5T$. Если использовать разницу положений этих двух узлов для определения частоты биений F_b согласно трехмерной формуле (2.15), дающей:

$$B_{node}^{3D}/2F_b = 4/(4n - 1), \quad n = 1, 2, 3.., \quad (2.39)$$

или

$$\Delta B_{node}^{3D} \equiv B_{node1}^{3D} - B_{node2}^{3D} = 8F_b/3 - 8F_b/7 = 32F_b/21, \quad (2.40)$$

получаем $F_b = 26T$ вместо правильного значения $F_b = 10T$. Похожая ошибка получается если определять частоту биений только по одному внешнему узлу при $n=1$ и $B = 53T$ согласно формуле (2.39): $F_b \approx 20T$ вместо $F_b = 10T$. Биения осцилляций магнитосопротивления в слоистых квазидвумерных металлах используют для экспериментального определения интеграла межслоевого перескока $2t_z = F_b(\hbar\omega_c/B)$. Таким образом, полученное расхождение теоретически ожидаемого положения узлов биений с упрощенной формулой (2.39) может привести к существенной (в разы) ошибке извлекаемого значения $2t_z$. Полученное выше Ур. (2.33) означает, что Ур. (2.39) не верно при $4t_z \sim \hbar\omega_c$ и должно быть заменено на

$$B_{node}/2F_b = 4/(4n - 1 - 4\phi_b/\pi), \quad n = 1, 2, 3.. \quad (2.41)$$

где сдвиг фазы ϕ_b дается Ур. (2.34).

На Рис. 2.2а также заметны "медленные" осцилляции магнитосопротивления, поскольку проводимость на этом рисунке, усредненная по периоду быстрых квантовых осцилляций, медленно осциллирует с изменением магнитного поля с частотой $F_{slow} \approx 2F_b$.

Приведенное вычисление предполагало магнитное поле перпендикулярным проводящим слоям. Конечный угол θ наклона магнитного поля можно приближенно учесть перенормировкой циклотронной частоты $\omega_c \rightarrow \omega_c \cos \theta$ и межслоевого интеграла перескока [25] согласно Ур. (3): $t(\theta) = t(0) J_0(k_F d \tan \theta)$, где $\hbar k_F$ – импульс Ферми в проводящей плоскости.

Вышеизложенные расчеты также не учитывают спиновое расщепление. Поскольку рассеяние на примесях не зависит от спина электронов, спиновое расщепление можно учесть в конечном ответе добавив суммирование по спину:

$$\sigma_{zz}(\mu) \rightarrow [\sigma_{zz}(\mu - \Delta_B) + \sigma_{zz}(\mu + \Delta_B)]/2, \quad (2.42)$$

где $\Delta_B = \hbar e B / m_e c$ – сдвиг энергии Ферми для каждой компоненты спина из-за Зеемановского расщепления. Суммирование по спину в Ур. (2.42) заменено усреднением, поскольку σ_0 в Ур. (2.32) и (2.33) уже учитывает две компоненты спина.

Перемешивание осцилляций химического потенциала с другими осциллирующими членами в Ур. (2.32) и (2.33) не приводит к заметным поправкам в амплитуду медленных осцилляций. Даже если осцилляции химического потенциала не подавлены магнитострикцией [97, 140], их вклад в медленные осцилляции содержит дополнительные малые множители R_T^2 и $(R_D^{tot}/R_D)^2$ по сравнению с основным медленно-осциллирующим членом в Ур. (2.33) и (2.37), в чем несложно убедиться прямой подстановкой Ур. (Б.2) в (2.33). Медленные осцилляции отсутствуют в намагниченности (см. Приложение Б.3), поскольку в намагниченности нет подходящего перемешивания близких частот, отличающихся на величину гофрировки ПФ.

Заметим, что как медленные осцилляции, так и ненулевой сдвиг фазы биений ϕ_b осцилляций проводимости по сравнению с осцилляциями намагниченности, можно получить и в рамках кинетического уравнения Больцмана [33, 31] (статьи 9 и 10 в списке публикаций), также раскладывая по параметру $\hbar\omega_c/t_z$, однако их значения могут отличаться в силу дополнительного "квантового" члена в Ур. (2.24). Мы не будем здесь приводить вывод этих эффектов вторым менее строгим способом, а отметим лишь разницу получаемых ответов. Фазовый сдвиг биений в Ур. (2.34), полученный из формулы Кубо, больше чем полученный из уравнения Больцмана [см. работу [33], формулу (9)] в $(1 + 2\pi\Gamma_0/\hbar\omega_c)$ раз. Эта разница происходит от "квантового" члена $2\pi k/\hbar\omega_c$ в дополнение к стандартному члену $1/|\text{Im}\Sigma^R(\varepsilon)|$ в круглых скобках во второй строке формулы (2.24). Как будет показано ниже (см. Рис. 2.6), больший фазовый сдвиг биений, получаемый из формулы Кубо, намного лучше согласуется с экспериментом. Медленно осциллирующий член в Ур. (2.33), полученный из формулы Кубо, не отличается от полученного из уравнения Больцмана [см. [31], формула (4)] во втором порядке по фактору Дингла.

2.3 Сравнение с экспериментом и обсуждение

Для детального сравнения изложенной теории с экспериментальными наблюдениями мы выбрали слоистый квазидвумерный органический металл β -(BEDT-TTF)₂IBr₂. Этот материал имеет достаточно простое поведение без сверхструктуры или неустойчивостей типа волн зарядовой или спиновой плотности. Это вещество остается нормальным металлом при охлаждении до температуры сверхпроводящего перехода $T_c \approx$

2 К [159]. Электронные свойства этого соединения определяются единственной цилиндрической поверхностью Ферми,[158] слабо ($\simeq 1\%$) гофрированной в направлении, перпендикулярном проводящим BEDT-TTF слоям [160, 147]. Таким образом, это вещество идеально подходит для сравнения вышеизложенной теории с экспериментом, а также для определения электронных параметров этого соединения на основе рассматриваемых эффектов.

Эксперименты проводились на монокристалле β -(BEDT-TTF)₂IBr₂ при температуре от $T \approx 0.56$ К в магнитном поле до 16 Т, полностью подавляющем сверхпроводимость. Изучаемый кристалл β -(BEDT-TTF)₂IBr₂ имеет размеры $0.6 \times 0.3 \times 0.12 \text{mm}^3$ и является очень чистым: $[R(290\text{K})/R(2\text{K})] \geq 3000$. Чтобы гарантировать одинаковые условия наблюдения квантовых осцилляций проводимости σ_{zz} и намагниченности M (в частности, одинаковую ориентацию поля, которая очень важна), измерения проводились на оборудовании, позволяющем одновременную запись магнитного момента и электрического сопротивления [148]. Экспериментальная установка также позволяла менять угол θ между направлением поля и нормалью к проводящим ab слоям без разморозки образца, что позволило изучать также угловую зависимость рассматриваемых эффектов. Экспериментальные результаты этого раздела опубликованы в статьях [33] и [31] (статьи 9 и 10 в списке публикаций).

На Рис. 2.3 представлена типичная измеренная полевая зависимость межслоевого магнитосопротивления $R_{\perp} = R_{zz} \approx \sigma_{zz}^{-1}$ и углового момента силы $\vec{\tau}_{osc} = [\vec{M} \times \vec{B}]$, позволяющего определить намагниченность M . Экспериментальные данные находятся в согласии с более ранними работами [26, 165].

Циклотронные орбиты на цилиндрической поверхности Ферми дают быстрые квантовые осцилляции магнитосопротивления, эффект Шубникова - де Гааза (эффект ШдГ), изображенные на Рис. 1а, и осцилляции де Гааза - ван Альфена (эффект дГВА) (Рис. 1б) с частотой $F = 3930$ Т, соответствующей площади экстремального сечения ПФ $S \approx 0.53S_{BZ}$ (S_{BZ} площадь зоны Бриллюэна). Амплитуда осцилляций ШдГ и дГВА модулирована из-за слабой гофрировки ПФ. В интервале магнитного поля между 7 и 16 Т наблюдаются отчетливые биения квантовых осцилляций с несколькими узлами. Сравнение частоты биений и фундаментальной частоты быстрых осцилляций дает оценку величине гофрировки: $\Delta S/S = 2F_{\text{beat}}/F \simeq 10^{-2}$. Положения узлов биений осцилляций магнитосопротивления оказываются сдвинуты относительно биений осцилляций дГВА, и эта сдвигка зависит от магнитного поля.

Для количественного сравнения сдвига фазы биений из Ур. (2.34) с наблюдаемыми

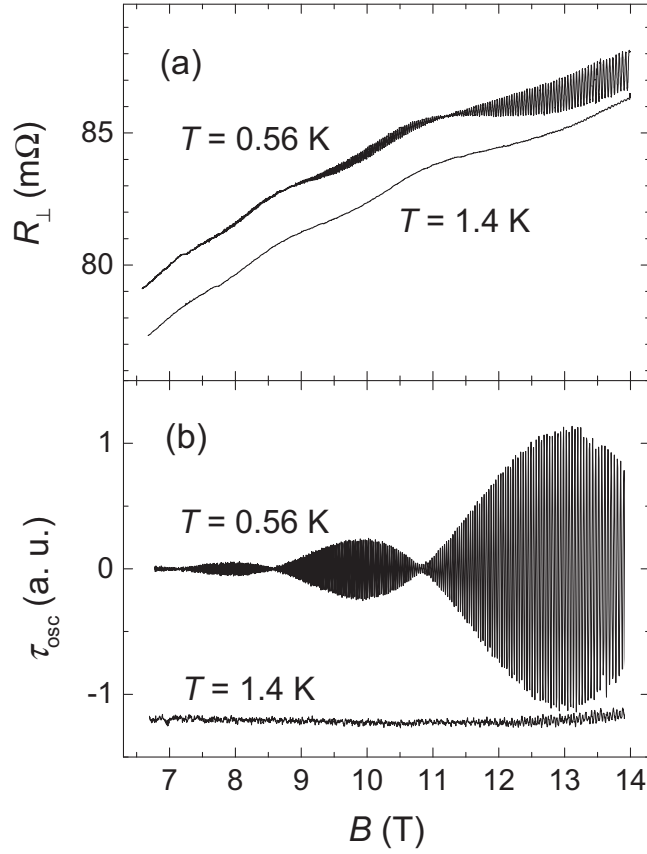


Рисунок 2.3: Межслоевое магнитосопротивление $R_{\perp}(B) = R_{zz}(B)$ (a) и осциллирующая часть магнитного момента силы $\tau_{osc}(B)$ (b) в монокристалле β -(BEDT-TTF) $_2$ IBr $_2$ как функция величины магнитного поля B при угле наклона поля $\theta \approx -15^\circ$. Кривые при разных температурах сдвинуты для ясности рисунка. Экспериментальные данные взяты из совместной статьи [31] (№ 10 в списке публикаций).

данными, было удобно взять угол наклона поля $\theta \approx 14.8^\circ$, поскольку при таком угле наклона отчетливо наблюдается максимальное число узлов биений в доступных в эксперименте полях до 16 Т. Соответствующие экспериментальные данные приведены на Рис. 2.4. Положения нескольких первых узлов биений намагиченности и межслоевого магнитосопротивления отложены на Рис. 2.5 в масштабе обратного магнитного поля, где эти положения согласно Ур. (2.39) должны быть линейны по номеру узла биений. Это выполняется для положений узлов биений осцилляций намагиченности (см. сплошные кружки и линейную подгонку на Рис. 2.5). Однако, положения узлов биений осцилляций магнитосопротивления (незакрашенные кружки на Рис. 2.5) отклоняются от этой простой зависимости, как и предсказывает Ур. (2.41). Это отклонение от линейной зависимости

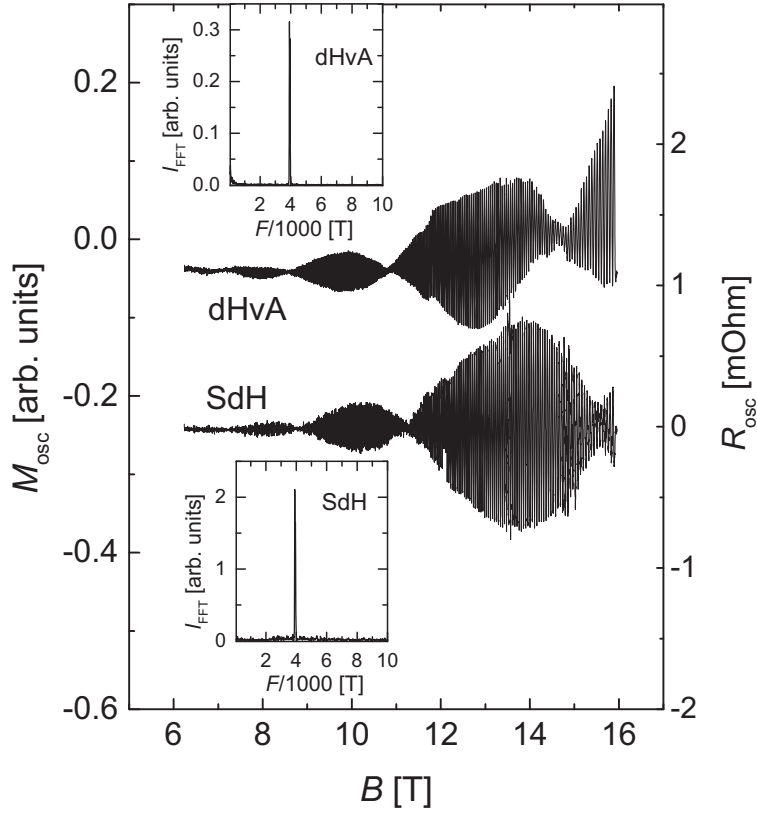


Рисунок 2.4: Измеренная осциллирующая часть намагниченности M_{osc} (левая шкала) и межслоевого магнитосопротивления $R_{osc}(B) = \tilde{R}_{zz}(B)$ (правая шкала) в монокристалле β -(BEDT-TTF) $_2$ IbBr $_2$ как функция величины магнитного поля B при угле наклона поля $\theta \approx 14.8^\circ$. На вложенных рисунках приведены соответствующие амплитуды гармоник, полученные преобразованием Фурье. Рисунок взят из совместной статьи [33] (№ 9 в списке публикаций).

отложено на Рис. 2.6 как функция магнитного поля. Из Рис. 2.6 видно, что сдвиг фазы биений ϕ_b растет с ростом магнитного поля и неплохо согласуется с Ур. (2.34). Стандартная трехмерная теория предсказывает $\phi_b = 0$ (см. Ур. 2.15). На Рис. 2.6 сплошной линией изображено предсказание вышеизложенной теории и Ур. (2.34), основанных на формуле Кубо. Пунктирная линия – предсказание теории, основанной на решении кинетического уравнения Больцмана [33] и дающей сдвиг фазы биений $\phi_b = \arctan(\hbar\omega_c/2\pi t_z)$ вместо Ур. (2.34).

Кроме сдвига фазы биений, на Рис. 2.3а отчетливо видны медленные осцилляции магнитосопротивления, которые отсутствуют в намагниченности на Рис. 2.3б. Эти

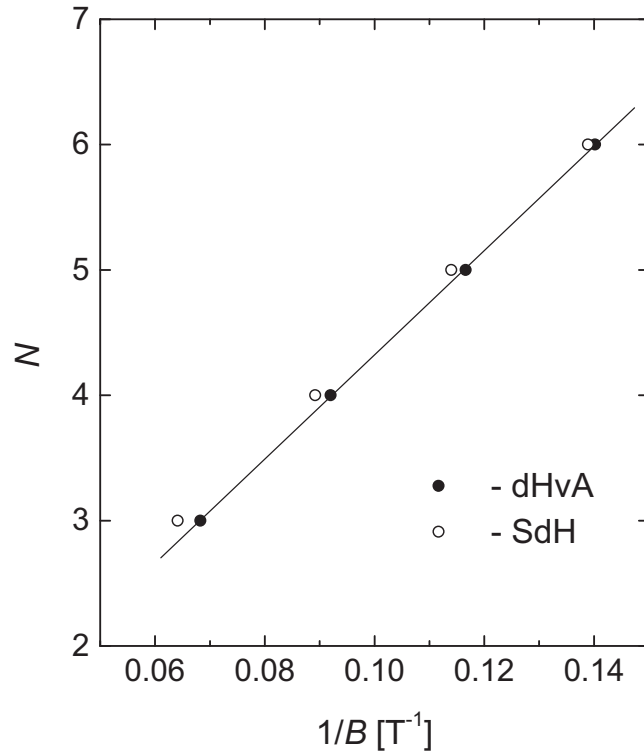


Рисунок 2.5: Положения нескольких узлов биений намагиченности M_{osc} (закрашенные кружки) и межслоевого магнитосопротивления $R_{osc}(B) = \tilde{R}_{zz}(B)$ (незакрашенные кружки) в β -(BEDT-TTF)₂IBr₂ отложенные как функция обратного магнитного поля $1/B$. Прямая линия - линейная подгонка данных по намагиченности. Рисунок взят из совместной статьи [33] (№ 9 в списке публикаций).

медленные осцилляции впервые наблюдались в этом же квазидвумерном органическом металле β -(BEDT-TTF)₂IBr₂ в 1988 году [161, 26]. Похожие осцилляции наблюдались также в других слоистых органических проводниках, например в β -(BEDT-TTF)₂I₃ [162, 163], κ -(BEDT-TTF)₂Cu₂(CN)₃ [164], и в κ -(BEDT-TSF)₂C(CN)₃ [152]. Поскольку поведение этих медленных осцилляций во многом похоже на поведение эффекта ШдГ, в этих работах было предположено, что они возникают из-за дополнительных очень малых карманов ПФ. Однако, зонные расчеты, которые обычно верно предсказывают топологию ПФ в органических металлах (см., например, монографию [10]), не объясняют такую малую группу носителей заряда ни в одном из перечисленных соединений. Эти медленные осцилляции оставались загадкой на протяжении более 10 лет, пока они не были объяснены в работах диссертанта [31, 32, 157].

В отличие от быстрых шубниковских осцилляций, медленные осцилляции

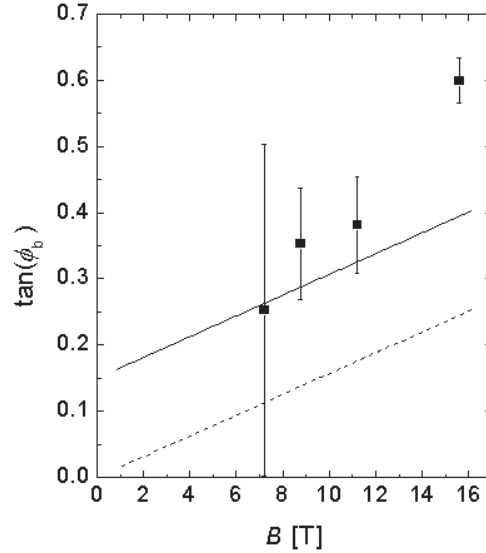


Рисунок 2.6: Сравнение результатов различных теоретических моделей с экспериментальными данными по сдвигу фазы биений ϕ_b осцилляций межслоевой проводимости в β -(BEDT-TTF) $_2$ IBr $_2$. Экспериментальные точки отложены вместе с их погрешностями. Стандартная трехмерная теория предсказывает $\phi_b = 0$ (см. Ур. 2.15). Сплошная линия - предсказание вышеизложенной теории и Ур. (2.34), основанных на формуле Кубо. Пунктирная линия – предсказание теории, основанной на решении кинетического уравнения Больцмана [33].

магнитосопротивления на Рис. 2.3а практически не подавляются повышением температуры до 1.4К и выше. Это видно из сравнения двух кривых на Рис. 2.3а при температурах 0.56К и 1.4К: при температуре 0.56К хорошо видны быстрые шубниковские осцилляции, которые становятся практически подавленными при 1.4К. Напротив, амплитуда медленных осцилляций практически не изменилась при повышении температуры от 0.56К до 1.4К. Это качественное отличие происходит из-за другой природы этих медленных осцилляций. Частота быстрых шубниковских осцилляций связана с положением энергии Ферми, которое размывается при конечной температуре согласно функции распределения Ферми в Ур. (1.13). Поэтому уменьшается и амплитуда шубниковских осцилляций с повышением температуры. Частота медленных осцилляций связана не с энергией Ферми, а только с зонным параметром межслоевого интеграла

перескока t_z , величина которого не зависит от температуры (в рамках "когерентного" или зонного механизма межслоевого электронного переноса). Поэтому не слишком высокие температуры не подавляют медленные осцилляции магнитосопротивления. Это качественное отличие находится в полном согласии с Ур. (2.33).

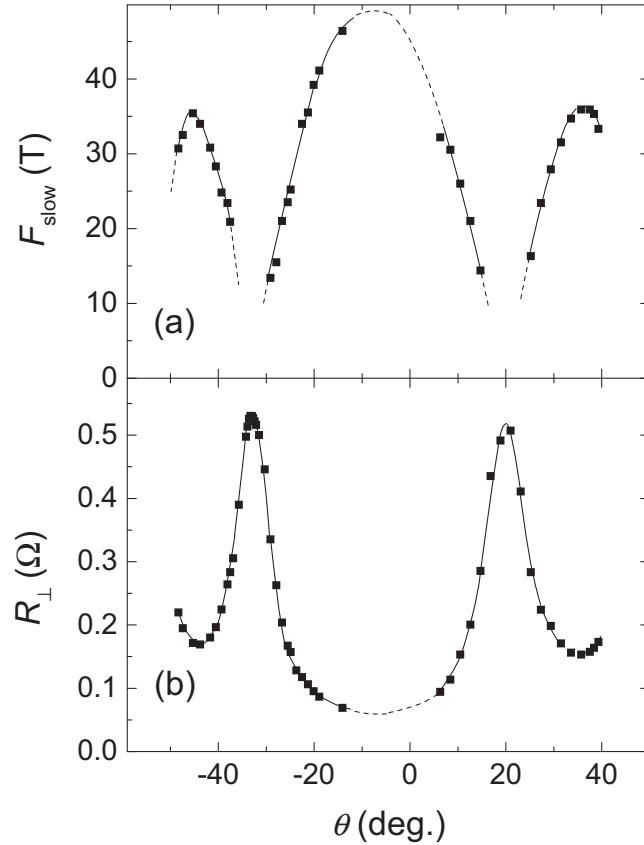


Рисунок 2.7: Измеренная угловая зависимость частоты $F_{slow}(\theta)$ медленных осцилляций (a) и монотонной части магнитосопротивления $R_{zz}(\theta)$ при $B = 14$ Т и $T = 0.44$ К (b) в β -(BEDT-TTF) $_2$ IBr $_2$. Линии проведены для наглядности. Рисунок взят из совместной статьи [31] (№ 10 в списке публикаций).

Другое важное качественное отличие медленных осцилляций, описываемых последней строчкой в Ур. (2.33) или Ур. (2.37), от быстрых Шубниковских осцилляций – это немонотонная зависимость их частоты F_{slow} от угла наклона магнитного поля, описываемая Ур. (2.38). Поэтому были проведены измерения медленных осцилляций магнитосопротивления при различных направлениях магнитного поля. Экспериментальные данные о зависимости частоты медленных осцилляций от угла наклона поля $F_{slow}(\theta)$ представлены на Рис. 2.7а.[167]

В отличие от частоты быстрых Шубниковских осцилляций, имеющей типичную для квазидвумерных металлов зависимость $1/\cos\theta$, частота медленных осцилляций показывает сильную немонотонную зависимость от угла θ , согласующуюся с Ур. (2.38). Такое поведение напоминает частоту биений $F_{\text{beat}}(\theta)$. При определенных направлениях магнитного поля, удовлетворяющих условию $J_0(k_F d \tan\theta) = 0$ и почти периодически повторяющихся при изменении $\tan\theta$, площади циклотронных орбит в квазидвумерных металлах становятся практически независимыми от положения орбиты в k -пространстве [25] (см. Ур. (3) и обсуждение за ним или введение к главе 3). Это приводит к периодическому уменьшению F_{beat} до нуля [165]. При этих же углах классическая (монотонная) часть магнитосопротивления резко увеличивается [24], приводя к так называемым угловым осцилляциям магнитосопротивления (AMRO) [26, 166]. На Рис. 2b отложена измеренная угловая зависимость магнитосопротивления нашего образца при $B = 14$ Т, демонстрирующая резкие пики при $\theta \approx 33^\circ$ и -20° . Она явно коррелирует с угловой зависимостью F_{slow} : последняя резко уменьшается при тех же углах (называемых углами Ямаджи, см. абзац после Ур. (3) или введение к главе 3), при которых магнитосопротивление имеет пики.

Было бы также интересно напрямую сравнить угловые зависимости F_{slow} и F_{beat} . К сожалению, быстрые Шубниковские осцилляции обычно наблюдаются в достаточно малом интервале полей в нашем эксперименте, поэтому частота биений не может быть надежно измерена в широком интервале углов θ . Однако, оценки сделанные для нескольких углов (см., например, данные на Рис. 2.3 и 2.4) обнаруживают соотношение $F_{\text{slow}}(\theta) \approx 2F_{\text{beat}}(\theta)$ в пределах экспериментальной погрешности. Таким образом можно заключить, что медленные осцилляции и биения имеют одну физическую природу, и что оба эти эффекта связаны с гофрировкой цилиндрической поверхности Ферми, определяемой межслоевым интегралом перескока t_z . Все эти экспериментальные выводы находятся в согласии с теорией в разделе 2.2 и, в частности, с Ур. (2.33).

Итак, выше мы подтвердили представленное теоретическое описание и доступность экспериментального изучения медленных осцилляций. Их наблюдать оказывается намного проще, чем шубниковские осцилляции. Какую информацию можно получить о веществе по измерениям медленных осцилляций?

Частота медленных осцилляций при $\theta = 0$, также как и частота биений (более сложных для наблюдения), может быть использована для определения величины межслоевого интеграла перескока t_z . Согласно Ур. (2.38),

$$t_z = F_{\text{slow}} \hbar \omega_c / 8\pi B = F_{\text{slow}} \hbar e / 8\pi m^* c, \quad (2.43)$$

где m^* – эффективная масса, которую можно определить, например, из температурной зависимости амплитуды шубниковских осцилляций согласно Ур. (2.3). В β -(BEDT-TTF)₂IBr₂ частота медленных осцилляций $F_{slow}(\theta = 0) \approx 45\text{T}$, а эффективная масса известна $m^* \approx 4.2m_e$, так что Ур. (2.43) дает значение $t_z = F_{slow}\hbar e/8\pi m^*c \approx 0.8 \cdot 10^{-16}\text{erg} \approx 0.6\text{K} \approx 50\mu\text{eV}$ в разумном согласии с измеряемой анизотропией проводимости. Определение межслоевого интеграла перескока по частоте медленных осцилляций является довольно точным и относительно простым способом извлечения этого зонного параметра из эксперимента.

Угловая зависимость частоты медленных осцилляций $F_{slow}(\theta)$ позволяет определить значение импульса Ферми в проводящей плоскости согласно Ур. (2.38). Однако, для этой цели можно также использовать измерение угловой зависимости монотонной части межслоевого магнитосопротивления $\bar{R}_{zz}(\theta)$, которое значительно проще, поскольку для каждой ориентации поля требует измерения сопротивления только при одном значении магнитного поля, а не в широком диапазоне полей. Для импульсных магнитов это не имеет существенного значения, однако в постоянных магнитах измерение угловой зависимости $\bar{R}_{zz}(\theta)$ на порядки быстрее и проще, чем измерение $F_{slow}(\theta)$. Тем не менее, наличие возможного дополнительного источника информации о соединении может оказаться полезным.

Еще одно интересное и полезное свойство медленных осцилляций – то что температура Дингла $T_D = \Gamma_0/\pi$, определяющая их затухание, отличается от температуры Дингла T_D^{tot} быстрых шубниковских осцилляций. Природа этого отличия уже обсуждалась нами в параграфе между Ур. (2.36) и (2.37) в связи с индексом "tot" в факторе Дингла в Ур. (2.33): T_D в медленных осцилляциях учитывает только короткодействующие примеси, а T_D^{tot} в быстрых шубниковских осцилляциях учитывает также длинноволновые дефекты и макроскопические вариации уровня Ферми вдоль образца. Сравнение T_D и T_D^{tot} на основе экспериментальных данных позволяет оценить вклад короткодействующих примесей в полную температуру Дингла.

На Рис. 2.8 построены "дингловские графики" для быстрых шубниковских и медленных осцилляций на основе экспериментальных данных в β -(BEDT-TTF)₂IBr₂ при $T = 0.44\text{K}$. Амплитуда быстрых (Рис. 2.8a) и медленных (Рис. 2.8b) осцилляций магнитосопротивления $R_{zz}(B)$ отнормированы и отложены как функция обратного магнитного поля. Подгонка к Ур. (2.2), изображенная линиями на Рис. 2.8, дает значения $T_D^{tot} \approx 0.8\text{K}$ и $T_D \approx 0.15\text{K}$, отличающиеся в 5 раз. Таким образом можно сделать заключение, что в данном образце β -(BEDT-TTF)₂IBr₂ основной вклад в фактор

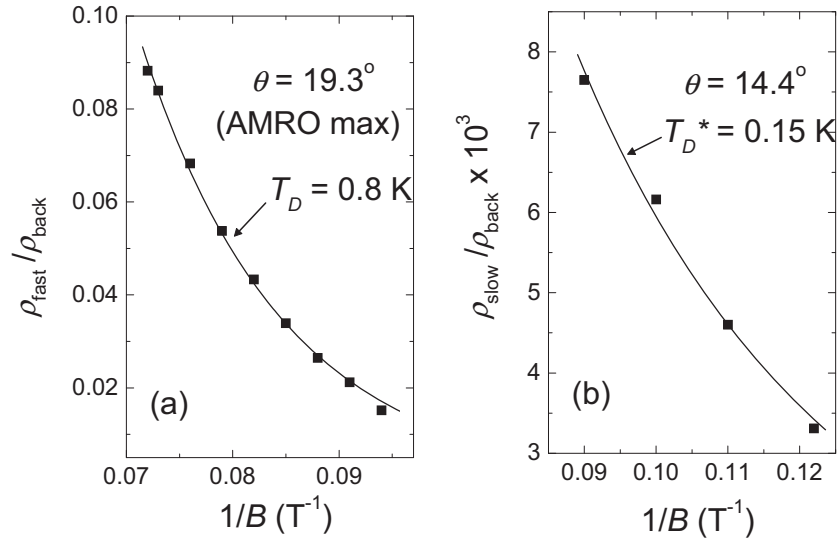


Рисунок 2.8: Амплитуда быстрых (а) и медленных (б) осцилляций магнитосопротивления $R_{zz}(B)$, измеренные в β -(BEDT-TTF) $_2$ IBr $_2$ при $T = 0.44$ К. Эти амплитуды отнормированы на среднее значение магнитосопротивления и отложены как функция обратного магнитного поля. Линии являются подгонкой к Ур. (2.33) и (2.2). Рисунок взят из совместной статьи [31] (№ 10 в списке публикаций).

Дингла затухания квантовых осцилляций дают длинноволновые дефекты или даже макроскопические вариации уровня Ферми вдоль образца, а вовсе не короткодействующие примеси, дающие лишь $\approx 20\%$ в полную температуру Дингла.

Глава 3

Угловая зависимость

магнитосопротивления: некоторые ее

особенности в сильно анизотропных

слоистых квазидвумерных металлах и

ее использование для определения

закона дисперсии электронов

3.1 Введение

Как было указано в общем введении, определение электронной структуры сильно-коррелированных электронных проводников является фундаментальной проблемой современной физики конденсированного состояния. Большинство активно изучаемых в настоящее время проводящих материалов, таких как высокотемпературные купратные и железосодержащие сверхпроводники, органические металлы, соединения редкоземельных элементов и другие, как правило, характеризуются высокой квазидвумерной анизотропией. Угловые и полевые зависимости магнитосопротивления и намагниченности, в особенности квантовые магнитные осцилляции [4], позволяют выявить даже тонкие детали электронной дисперсии и геометрии поверхности Ферми [6], причем часто именно эти тонкие детали оказываются определяющими в электронных свойствах.

Большое число публикаций посвящено экспериментальному определению

геометрии поверхности Ферми (ПФ) и закона дисперсии электронов в купратных сверхпроводниках [172, 173], в MgB_2 , [174] в органических металлах (см., например, обзоры [6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13]) и многих других соединениях. Определение геометрии ПФ (а не только площади экстремальных сечений) на основе данных по магнитным квантовым осцилляциям обычно основывается на сравнении с результатами зонных расчетов, которые не всегда являются однозначными. Интерпретация угловой зависимости магнитосопротивления также не всегда однозначна, поскольку обычно основана на подгонке численных расчетов с большим количеством подгоночных параметров. [14, 17, 18] Быстрое и эффективное извлечение геометрии ПФ и электронной дисперсии по экспериментальным данным квантовых и угловых осцилляций магнитосопротивления хотя бы в каком-то контролируемом приближении является важной задачей, требующей надежного теоретического описания и удобных аналитических формул.

В квазидвумерных металлах со сложным анизотропным законом дисперсии обычно имеется набор малых параметров, который помогает реализации такого теоретического описания. Напомним (см. введение), что ПФ, определяемая уравнением $\epsilon(\mathbf{k}) = E_F$, в квазидвумерных металлах является гофрированным цилиндром с осью вдоль z . Если гофрировка ПФ меньше импульса Ферми вдоль проводящего слоя, то эта гофрировка может быть рассмотрена как малый параметр, по которому можно разложить угловые зависимости монотонной части магнитосопротивления и частоты квантовых осцилляций.

Закон дисперсии электронов в квазидвумерных металлах может быть представлен в виде разложения в ряд Фурье в цилиндрических координатах:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \sum_{\nu, \mu \geq 0} \epsilon_{\mu\nu}(k) \cos(\nu k_z c^*) \cos(\mu\phi + \phi_{\mu\nu}), \quad (3.1)$$

где целые числа $\nu, \mu \geq 0$, импульс электронов $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ (мы положили $\hbar = 1$ в этом и следующем разделах), c^* межслоевое расстояние, коэффициенты $\epsilon_{\mu\nu}(k)$ являются действительными функциями абсолютной величины импульса в плоскости $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, и $\phi = \arctan(k_y/k_x)$ – азимутальный угол импульса электронов. В кристаллах с моноклинной или более высокой симметрией μ в Ур. (3.1) является четным числом, то есть $\epsilon_{\mu\nu}(k) = 0$ для всех нечетных μ . В кристаллах с триклинной симметрией единственное условие на закон дисперсии электронов есть $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon(-\mathbf{k})$, и закон дисперсии в Ур. (3.1) может содержать также члены с одновременно нечетными μ и ν . Для простоты, ниже мы будем рассматривать случай моноклинной или более высокой симметрии, когда μ четное.

Зависимость импульса Ферми $k_F(\phi, k_z)$ от азимутального угла ϕ и компоненты

импульса k_z может также быть разложена в ряд Фурье:[173]

$$k_F(\phi, k_z) = \sum_{\nu \geq 0} k_\nu(\phi) \cos(\nu k_z c^*) \quad (3.2)$$

$$= \sum_{\mu, \nu \geq 0} k_{\mu\nu} \cos(\nu k_z c^*) \cos(\mu\phi + \phi_{\mu\nu}). \quad (3.3)$$

Влияние различных гармоник $k_{\mu\nu}$ на форму ПФ проиллюстрировано в таблице 1 в работе [173] и в таблице 4 работы [180]. Фаза $\phi_{\mu\nu}$ в Ур. (3.3) обычно равна нулю, но может быть также равна $\pi/2$ для нечетных ν и определенных типах кристаллической симметрии (см. раздел 3.3b ниже).

Если в законе дисперсии в Ур. (3.1) коэффициент ϵ_{00} существенно больше других коэффициентов $\epsilon_{\mu\nu}$, то отношения $\epsilon_{\mu\nu}/\epsilon_{00}$ можно считать малыми параметрами и устроить по ним разложение. В пределе слабой гофрировки, соотношения между первыми коэффициентами разложений в Ур. (3.3) и (3.1) приведено в приложении В.1. Обычно, бывает достаточно оставить только несколько первых членов в разложениях (3.1) или (3.3). Например, если межслоевой интеграл перескока $t_z(\phi) \sim \epsilon_{01}$ много меньше энергии Ферми в плоскости $E_F = \epsilon_{00}$, хорошо работает приближение сильной связи, и можно оставить только члены с $\nu = 0$ и $\nu = 1$ в Ур. (3.1):

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon(k, \phi) - 2t_z(\phi) \cos(k_z c^*). \quad (3.4)$$

Если магнитное поле направлено вдоль оси z в квазидвумерном металле с законом дисперсии (3.4), а межслоевой интеграл перескока в нулевом приближении не зависит от импульса: $\epsilon_{0,1} > \epsilon_{\mu \neq 0,1}$ или $t_z(\phi) \approx const$, то имеются два экстремальных сечения ПФ A_{ext} внутри замкнутых кривых, удовлетворяющих уравнению $\epsilon(k_x, k_y) \pm 2t_z = E_F$. Соответственно, две близкие фундаментальные частоты $F_{1,2} = (c/2\pi e\hbar) A_{ext}$ появляются в магнитных квантовых осцилляциях, приводящие к биениям.[4] Температурная зависимость амплитуд квантовых осцилляций дает циклотронную массу для каждой экстремальной орбиты: $m_{ext}^* \equiv (1/2\pi) [\partial A_{ext} / \partial E]$. Частота биений $\Delta F = F_1 - F_2$ определяет значение межслоевого интеграла перескока (сравните с Ур. (2.43) для связи с частотой медленных осцилляций): $4t_z = \Delta F (e\hbar/m_{ext}^* c)$. Однако, разница площадей двух экстремальных сечений ПФ $\Delta A_{ext} = 2\pi e\hbar \Delta F / c$, а значит и частота биений, зависит от направления магнитного поля \mathbf{B} , определяемого двумя углами: полярным углом θ по отношению к оси z и азимутальным углом φ вращения вокруг оси z : $\tan \varphi = B_y / B_x$ (см. Рис. 3.1). Мы будем использовать символ ϕ для азимутального угла импульса электронов, а символ φ для азимутального угла магнитного поля \mathbf{B} .

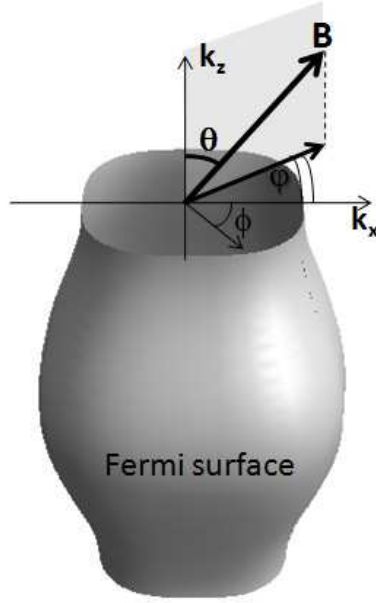


Рисунок 3.1: Иллюстрация ПФ, описываемой Ур. (3.42), и обозначений углов, используемых в тексте. Параметры на графике $m = 4$, $\beta = 0.05$ и $2C_1 t_z / E_F = 0.2$.

Для аксиально-симметричного закона дисперсии, ΔA_{ext} не зависит от азимутального угла φ и имеет простую угловую зависимость [25], аналогичную Ур. (3):

$$\Delta A_{ext} \propto J_0(c^* k_F \tan \theta), \quad (3.5)$$

где J_0 функция Бесселя и $k_F = k_{00}$ – импульс Ферми. Ур. (3.5) верно в первом порядке по межслоевому интегралу перескока t_z и впервые было получено из геометрических соображений [25] для объяснения угловых осцилляций магнитосопротивления [26] в квазидвумерных органических металлах. Поскольку разница $\Delta A_{ext}(\theta)$ между двумя экстремальными сечениями ПФ в квазиклассическом пределе пропорциональна $t_z(\theta)$, Ур (3.5) указывает на аналогичную угловую зависимость межслоевого интеграла перескока t_z , описываемую Ур. (3). Это дает угловые осцилляции межслоевой проводимости, поскольку $\sigma_{zz} \propto t_z^2(\theta)$ согласно Ур. (1.16) или (1.52). Ур. (3) позже было подтверждено квантово-механическим вычислением амплитуды межслоевого туннелирования электронов в наклонном магнитном поле.[28] Углы θ_m , соответствующие нулям функции Бесселя,

$$J_0(c^* k_F \tan \theta_m) = 0, \quad (3.6)$$

называются углами Ямаджи и используются для определения k_F . При этих углах магнитосопротивление имеет максимумы. Амплитуда и резкость этих максимумов растут с увеличением магнитного поля и определяются параметром ¹ $\omega_c\tau$. В рамках тау-приближения и кинетического уравнения Больцмана была получена удобная аналитическая формула [24] в Ур. (2), которая неплохо описывает угловые осцилляции магнитосопротивления для закона дисперсии в Ур. (1), изотропного в проводящей плоскости и с независимым от импульса интегралом межслоевого перескока t_z .

Обычно, закон дисперсии электронов в проводящих плоскостях $\epsilon(k_x, k_y)$ анизотропен: и Ур. (3), (3.5) и (3.6) приобретают зависимость от азимутального угла φ . Имеется существенная практическая необходимость в простых аналитических формулах для этой зависимости угловых и квантовых осцилляций магнитосопротивления от φ , которые могли бы быть использованы для извлечения параметров анизотропии внутрислоевого закона дисперсии электронов из экспериментальных данных.

Широко используемая аналитическая формула для зависимости площади экстремального сечения ПФ от азимутального угла наклона магнитного поля φ , выведенная в 2000г. С. Bergemann и др.[173] и представленная в Ур. (3.33) ниже, учитывает гофрировку ПФ только в первом порядке, что не достаточно для правильного определения даже главного члена внутрислоевой анизотропии закона дисперсии электронов (см. разделы 3.2.4 и 3.2.5 ниже). Другая простая и широко используемая формула [166, 175, 176, 177] для зависимости углов Ямаджи θ_n от азимутального угла наклона магнитного поля φ имеет вид

$$\tan \theta_n \approx \pi (n - 1/4) / p_B^{\max} c^*, \quad (3.7)$$

где $p_B^{\max} = p_B^{\max}(\varphi)$ – максимальное значение проекции импульса Ферми на проекцию направления магнитного поля в плоскости проводящих слоев.[166] Эта формула была впервые выведена в работе [166] из стандартной формулы Шокли-Чемберса (см. Ур. (3.8) или параграф 9.3 в учебнике [3]), получаемой в рамках кинетического уравнения Больцмана в тау-приближении. Кроме этого, при выводе Ур. (3.7) было использовано приближение седловой точки, предполагающее что z -компонента электронной скорости быстро осциллирует при движении электрона вдоль классической траектории в магнитном поле. Это верно только при больших углах наклона θ магнитного поля от нормали к слоям, когда $\tan \theta \gg 1/c^* p_B^{\max}(\varphi)$, и только в сильном поле и в очень чистых образцах, когда

¹Фактор Дингла затухания квантовых осцилляций также определяется этим параметром $\omega_c\tau$, но в отличие от фактора Дингла, затухание угловых осцилляций не экспоненциальное.

$\omega_c \tau \cos \theta \gg 1$. Для малых углов наклона θ этот вывод не применим, потому что даже для первого угла Ямаджи $c^* p_B^{\max}(\varphi) \tan \theta \sim 1$.

Ниже (в разделе 3.2) мы покажем, что Ур. (3.7) верно только для эллиптической формы ПФ в плоскости слоев и только в пределе $\omega_c \tau \cos \theta \gg 1$. С некоторой малой погрешностью, эта формула может быть применена к любой вытянутой (близкой к эллиптической) форме ПФ. Однако, Ур. (3.7) дает абсолютно неверный ответ для зависимости углов Ямаджи от φ когда ПФ в проводящих слоях имеет симметрию тетрагональную (как в купратах и пниктидах) или гексагональную (как в MgB_2 [174] или графите [171]).

Как было сказано во введении к диссертации, угловая зависимость межслоевого магнитосопротивления, описываемая Ур. (2), предполагает закон дисперсии электронов в Ур. (1), который имеет ряд ограничений: (1) он изотропен в проводящих слоях (в плоскости k_x, k_y), что не выполняется в кристаллах низшей категории кристаллической симметрии [27], например, в органических металлах; (2) интеграл перескока t_z не зависит от импульса, что также не выполняется во многих квазидвумерных проводниках, например, в Sr_2RuO_4 и $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$. Кроме этого, (3) Ур. (2) не учитывает дополнительную угловую зависимость межслоевого магнитосопротивления, возникающую из-за продольного межслоевого магнитосопротивления $R_{zz}(B_z)$ в сильно-анизотропных слоистых проводниках, рассмотренного в главе 1; и (4) возможны другие "некогерентные" механизмы межслоевого переноса электронов, которые также будут приводить к другой угловой зависимости магнитосопротивления. В этой главе мы рассмотрим некоторые из указанных эффектов. Первые два эффекта (сложный анизотропный закон дисперсии) рассмотрены в разделе 3.2, где магнитное поле предполагается достаточно слабым, чтобы были применимы понятие трехмерной поверхности Ферми и квазиклассическое описание. Другие два эффекта будут рассмотрены в разделе 3.3.

Цель раздела 3.2 этой главы – на основе уже стандартного квазиклассического описания и тау-приближения вывести новые аналитические формулы для зависимости от угла φ площади поперечного сечения ПФ, углов Ямаджи и магнитосопротивления. При этом будет исследована область применимости широко используемых ранее полученных аналитических результатов. Цель последнего раздела 3.3 этой главы – выйти за рамки стандартного описания и найти, как изменяются стандартные формулы для угловой зависимости магнитосопротивления из-за новых эффектов (в частности, рассмотренных в главе 1), присущих сильно-анизотропным слоистым металлам в магнитном поле.

3.2 Определение параметров анизотропии закона дисперсии электронов в проводящих слоях по угловой зависимости магнитосопротивления в рамках стандартной теории

Материалы этого раздела соответствуют работе [178] (№ 12 в списке публикаций диссертанта). План этого раздела следующий. В §3.2.1 мы определим связь (и ее область применимости) между зависимостью площади сечения ПФ от k_z и угловой зависимостью магнитосопротивления. Эта связь показывает, в частности, что геометрические углы Ямаджи и максимумы магнитосопротивления совпадают в пределе $\omega_c \tau \cos \theta \gg 1$ и $t_z/E_F \ll 1$. В §3.2.2 будет получено точное выражение для углов Ямаджи для эллиптической формы ПФ. В разделах §3.2.3-3.2.5 мы получим соотношения между первыми членами разложения закона дисперсии и угловой зависимостью сечения ПФ. В частности, для анизотропного закона дисперсии $\epsilon(k_x, k_y)$ в Ур. (3.4) будет найден главный зависящий от φ член в угловой зависимости сечения ПФ $A(k_{z0}, \theta, \varphi)$. Как будет показано на основе численного расчета, этот результат имеет широкую область применимости и может применяться даже к почти квадратной ПФ, наблюдаемой в купратах и других высокотемпературных сверхпроводниках. В разделе §3.2.6 мы обсудим, как полученные результаты могут помочь наблюдать и анализировать магнитные квантовые осцилляции. В частности, будут предложены оптимальные направления магнитного поля для наблюдения зависимости частоты квантовых осцилляций от φ .

3.2.1 Связь между угловой зависимостью магнитосопротивления в тау-приближении и геометрией поверхности Ферми

Кинетическое уравнение Больцмана в тау-приближении хорошо работает для электронов в трехмерных нормальных металлах.[1, 3, 121] В сильно анизотропных квазидвумерных металлах это приближение применимо, если интеграл межслоевого перескока $t_z \gg \hbar\omega_c, \Gamma_0$, то есть когда металл является практически трехмерным с точки зрения движения и рассеяния электронов, а магнитное поле не слишком сильным. Как было показано в предыдущих главах, в этом случае кинетическое уравнение Больцмана в тау-приближении применимо с точностью до поправок по малому параметру $t_z/\hbar\omega_c$. В этом разделе для вычисления магнитосопротивления как функции направления магнитного поля,

определяемого полярным θ и азимутальным φ углами, мы также ограничимся пределом $t_z \gg \hbar\omega_c, \Gamma_0$ и воспользуемся кинетическим уравнением Больцмана, которое для квазидвумерных металлов (с замкнутыми электронными траекториями) дает известную формулу Шокли-Чемберса для тензора проводимости в магнитном поле [3]:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\theta, \varphi) = \frac{e^2}{4\pi^3\hbar^2} \int dk_{z0} \frac{m_H^* \cos\theta / \omega_H}{1 - \exp(-2\pi/\omega_H\tau)} \quad (3.8)$$

$$\times \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} v_\alpha(\psi, k_{z0}) v_\beta(\psi - \psi', k_{z0}) e^{-\psi'/\omega_H\tau} d\psi' d\psi.$$

В этой формуле импульсное пространство параметризуется компонентой импульса вдоль магнитного поля $k_H = k_{z0} \cos\theta$, электронной энергией E , и "углом" $0 < \psi < 2\pi$ вращения в перпендикулярной магнитному полю плоскости поперечного сечения изоэнергетической поверхности Ферми [1, 3]. Эффективная (циклотронная) масса для данной электронной орбиты

$$m_H^* \equiv \frac{1}{2\pi} \frac{\partial A}{\partial E} = \frac{1}{2\pi e' (k_F)} \frac{\partial A}{\partial k_F}, \quad (3.9)$$

где $A = A(k_H, E_F)$ – площадь поперечного сечения ПФ, перпендикулярного магнитному полю \mathbf{B} при импульсе $k_H \parallel \mathbf{B}$. Циклотронная частота орбиты $\omega_H \equiv eB/m_H^*c$, и $v_\alpha(\psi, k_H)$ – компонента электронной скорости на ПФ. В общем случае, время рассеяния τ в интеграле (3.8) также может зависеть от импульса (или от положения на ПФ). Например, если имеется анизотропное электрон-электронное взаимодействие из-за близости к переходу в волну зарядовой/спиновой плотности, то рассеяние вблизи определенных "горячих" точек ПФ намного сильнее, как это обычно имеет место в высокотемпературных сверхпроводниках и многих других соединениях. Однако, если рассеяние обусловлено главным образом рассеянием на короткодействующих примесях, то τ изотропно и зависит только от плотности состояний на уровне Ферми.

Для закона дисперсии (3.4) компонента электронной скорости вдоль оси z (совпадающей с осью цилиндрической ПФ) дается Ур. (1.47) и зависит только от k_z :

$$v_z(k_z) = (2c^*t_z/\hbar) \sin(c^*k_z). \quad (3.10)$$

Координата k_z точки K ПФ удовлетворяет Ур. (3.27), где $\varphi + \phi'$ – азимутальный угол проекции этой точки K на плоскость $x-y$. Приближенно, это нелинейное уравнение может быть решено методом итераций. В нулевом порядке

$$k_z^{(0)} = k_{z0} - k_F \cos(\phi') \tan\theta, \quad (3.11)$$

а в следующих порядках

$$k_z^{(i+1)} = k_{z0} - k_F (\phi' + \varphi, k_z^{(i)}) \cos(\phi') \tan \theta. \quad (3.12)$$

”Угол” ψ , входящий в формулу Шокли-Чемберса (3.8), соответствует приращению площади поперечного сечения при заданном приращении энергии [1, 3]:

$$d\psi = \frac{1}{m_H^* v_\perp} \frac{dk}{\partial E} = \frac{dk \partial k_\perp}{m_H^* \partial E},$$

где v_\perp – скорость Ферми в заданной точке ПФ, а k_\perp компонента импульса Ферми, перпендикулярная ПФ. В общем случае, ψ от углов ϕ' и ϕ вращения в плоскости сечения и в плоскости $x-y$. Площадь поперечного сечения, помноженная на $\cos \theta$ равна площади проекции в плоскости $x-y$, а ψ связан с углом ϕ вращения в плоскости $x-y$ соотношением

$$\frac{d\psi}{d\phi} = \frac{k_F(\phi, k_z)}{m_H^* \cos \theta} \frac{\partial k_F(\phi, E)}{\partial E}. \quad (3.13)$$

Для цилиндрической ПФ $k_F(\phi) = k_F$, и ψ совпадает с углом ϕ .

Покажем, что в пределе $\omega_H \tau \gg 1$ существует простая связь между угловой зависимостью $\sigma_{zz}(\theta, \varphi)$, выраженной Ур. (3.8), и геометрией ПФ. При $\omega_H \tau \gg 1$ экспонента $e^{-\psi'/\omega_H \tau} \approx 1$, и Ур. (3.8) дает

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\theta, \varphi) = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar^2} \int dk_{z0} \frac{m_H^* \cos \theta / \omega_H}{1 - \exp(-2\pi/\omega_H \tau)} \left(\int_0^{2\pi} v_\alpha(\psi, k_{z0}) d\psi \right)^2. \quad (3.14)$$

С помощью Ур. (3.13) преобразуем интеграл

$$\begin{aligned} I &\equiv \int_0^{2\pi} d\psi v_z(\psi, k_{z0}) \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \frac{k_F(\phi, k_z)}{m_H^* \cos \theta} \frac{\partial k_F(\phi, E)}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial k_z} \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \frac{k_F(\phi, k_z)}{m_H^* \cos \theta} \frac{\partial k_F(\phi, k_z)}{\partial k_z}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Производная

$$\frac{\partial k_F(\phi, k_z)}{\partial k_z} = \frac{\partial k_F[\phi, k_z(k_{z0}, \phi)]}{\partial k_{z0} \cdot (\partial k_z / \partial k_{z0})}. \quad (3.16)$$

Из Ур. (3.27) в первом порядке по t_z получаем $\partial k_z / \partial k_{z0} = 1$. Следовательно, Ур. (3.15) принимает вид

$$I = \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{m_H^* \cos \theta} \frac{\partial k_F^2(\phi, k_z)}{2\partial k_{z0}} = \frac{\partial A(k_{z0}, \theta, \varphi_0)}{\partial k_{z0} m_H^*},$$

где площадь поперечного сечения A дается Ур. (3.26).

С учетом определения I из Ур. (3.14) получаем

$$\sigma_{zz}(\theta, \varphi) = \frac{e^2 \tau \cos \theta}{8\pi^4 \hbar^2} \int \frac{dk_{z0}}{m_H^*} \left(\frac{\partial A(k_{z0}, \theta, \varphi)}{\partial k_{z0}} \right)^2. \quad (3.17)$$

Подобное соотношение без строгого вывода было предложено в работе [166]. Ур. (3.17) означает, что угловая зависимость межслоевой проводимости σ_{zz} и среднего квадрата от частной производной $\partial A/\partial k_{z0}$ от площади поперечного сечения ПФ по импульсу вдоль поля совпадают в пределе $\omega_H \tau \gg 1$ и $t_z/E_F \ll 1$. В частности, мы получаем хорошо известный результат, что геометрические углы Ямаджи, определяемые минимумами квадрата производной ($\partial A/\partial k_{z0}$), совпадают с минимумами межслоевой проводимости при $\omega_H \tau \gg 1$. Рис. 3.6 иллюстрирует, как угловая зависимость межслоевой проводимости изменяется с уменьшением $\omega_c \tau$.

Ур. (3.17) также означает, что угловая зависимость площади поперечного сечения ПФ важна не только для экспериментов по магнитным квантовым осцилляциям, но и для экспериментов по угловой зависимости межслоевого магнитосопротивления. Следующие 4 подраздела будут посвящены связи между законом дисперсии (3.1) или (3.3) и угловой зависимостью площади поперечного сечения ПФ.

3.2.2 Эллиптическая поверхность Ферми в проводящей плоскости

В этом подразделе мы выведем простую аналитическую формулу для геометрических углов Ямаджи (соответствующих не зависящей от k_{z0} в первом порядке по t_z площади сечения ПФ $A(k_{z0}, \theta, \varphi)$) для эллиптического закона дисперсии в проводящих слоях

$$\epsilon(k_x, k_y) \equiv k_x^2/2m_x + k_y^2/2m_y = \epsilon(k) [1 + \beta \cos 2\phi], \quad (3.18)$$

где $\epsilon(k) = k^2/2m$, $m \equiv 2m_x m_y / (m_x + m_y)$ и $\beta \equiv (m_x - m_y) / (m_x + m_y)$. Форма ПФ для такого закона дисперсии также эллиптическая. Эллипс может быть получен из круга растяжением Λ_x вдоль какого-то направления в плоскости, например, вдоль оси x : $x \rightarrow \lambda x$. Рассмотрим сечение ПФ плоскостью, пересекающей ось k_z в точке k_{z0} и перпендикулярной магнитному полю $\mathbf{B} = B\mathbf{n}$, где единичный вектор

$$\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z) = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta). \quad (3.19)$$

Для изотропной (в плоскости x, y) ПФ площадь этого сечения не зависит от азимутального угла φ . В первом порядке по t_z/E_F , она также не зависит от k_{z0} при определенных направлениях \mathbf{n}_{Yam} магнитного поля, соответствующих углам Ямаджи $\theta = \theta_{Yam}$,

определяемыми Ур. (3.6). После растяжения Λ_x , направление магнитного поля также меняется:

$$\mathbf{n} \rightarrow \Lambda_x(\mathbf{n}) = \frac{(n_x/\lambda, n_y, n_z)}{\sqrt{(n_x/\lambda)^2 + n_y^2 + n_z^2}}. \quad (3.20)$$

Однако, площадь сечения ПФ плоскостью, перпендикулярной $\mathbf{n}_1 = \Lambda_x(\mathbf{n}_{Yam})$ остается не зависящей от k_{z0} , если она не зависела от k_{z0} до растяжения. Следовательно, направление $\mathbf{n}_1 = \Lambda_x(\mathbf{n}_{Yam})$ соответствует новым углам Ямаджи $\theta_{Yam}(\varphi)$. Полярный θ_1 и азимутальный φ_1 углы связаны с компонентами вектора $\mathbf{n}_1 = (n_{1x}, n_{1y}, n_{1z})$ соотношениями

$$\tan \theta_1 = \frac{\sqrt{n_{1x}^2 + n_{1y}^2}}{n_{1z}}, \quad \tan \varphi_1 = \frac{n_{1y}}{n_{1x}}. \quad (3.21)$$

Собирая Ур. (3.20) и (3.21) получаем связь между старыми и новыми углами Ямаджи $\theta_{Yam}^* = \Lambda_x(\theta_{Yam})$

$$\frac{\tan \theta_{Yam}^*}{\tan \theta_{Yam}} = \frac{\sqrt{n_x^2/\lambda^2 + n_y^2}}{n_z \tan \theta_{Yam}} = \sqrt{\frac{\cos^2 \varphi}{\lambda^2} + \sin^2 \varphi}. \quad (3.22)$$

Угол φ здесь – это угол до растяжения Λ_x . Он связан с новым азимутальным углом φ_1 после растяжения соотношением:

$$\tan \varphi_1 = \lambda \tan \varphi.$$

Теперь, после простой тригонометрической алгебры получаем

$$\frac{\tan \theta_{Yam}^*}{\tan \theta_{Yam}} = \frac{\cos \varphi}{\lambda} \sqrt{1 + \tan^2 \varphi_1} = \frac{\sqrt{1 + \tan^2 \varphi_1}}{\sqrt{\lambda^2 + \tan^2 \varphi_1}} = \frac{1}{\sqrt{\lambda^2 \cos^2 \varphi_1 + \sin^2 \varphi_1}}. \quad (3.23)$$

Для эллиптического закона дисперсии (3.18) максимальное значение проекции импульса Ферми на проекцию магнитного в плоскости проводящих слоев дается формулой

$$p_B^{\max} = \sqrt{(p_1 \cos \varphi)^2 + (p_2 \sin \varphi)^2}, \quad (3.24)$$

где $p_1^2 = 2m_x \epsilon_F$ и $p_2^2 = 2m_y \epsilon_F$. Правая часть Ур. (3.23) совпадает с p_2/p_B^{\max} . Следовательно, обобщение углов Ямаджи для эллиптического закона дисперсии (3.18) записывается в виде

$$J_0 [c^* p_B^{\max}(\varphi) \tan \theta_n] = 0. \quad (3.25)$$

С учетом формулы (3.17), верной при $\omega_c \tau \gg 1$, это означает, что максимумы на угловой зависимости магнитосопротивления для квазидвумерного металла с эллиптическим законом дисперсии (3.18) в проводящей плоскости также даются Ур. (3.25) и (3.24).

Приближенно, Ур. (3.25) совпадает с условием в Ур. (3.7) для минимумом межслоевой проводимости, полученным [166, 6] в приближении седловой точки из формулы Шокли-Чемберса (3.8). Как было указано во введении к этой главе, это приближение предполагает, что z -компонента электронной скорости быстро осциллирует при движении электрона вдоль классической траектории в магнитном поле. Это верно только при больших углах наклона θ магнитного поля от нормали к слоям, когда $\tan \theta \gg 1/c^* p_B^{\max}(\varphi)$, и только в сильном поле и в очень чистых образцах, когда $\omega_c \tau \cos \theta \gg 1$. Одновременно, эти два условия выполняются очень редко. Для малых углов наклона θ вывод соотношения (3.7) в работе [166] строго говоря не применим, и для первого угла Ямаджи $c^* p_B^{\max}(\varphi) \tan \theta \approx 1$. Причина, по которой Ур. (3.7) хорошо описывает экспериментальные результаты в некоторых органических металлах, [6] происходит из-за ее совпадения с точным геометрическим условием (3.25) для углов Ямаджи для эллиптической ПФ, что согласно Ур. (3.17) дает максимумы магнитосопротивления. Таким образом, Ур. (3.25) и (3.24) подтверждают результат работы [166] для случая эллиптической ПФ. С некоторой небольшой погрешностью Ур. (3.25) и (3.7) могут быть использованы для вытянутой, но не эллиптической ПФ (см. Рис. 3.2). Однако, для ПФ с тетрагональной или гексагональной симметрией в проводящей плоскости, Ур. (3.25) и (3.7) дают абсолютно неправильный результат (см. Рис. 3.3). Следовательно, для такой геометрии ПФ требуется другой подход, изложенный в следующем разделе.

3.2.3 Разложение площади поперечного сечения по гармоникам

Произвольное направление магнитного поля \mathbf{B} определяется двумя углами: полярным θ и азимутальным φ . В отсутствие рассеяния, в импульсном пространстве электроны двигаются вдоль плоскости, перпендикулярной магнитному полю, которая пересекает ось k_z в некоторой точке $k_z = k_{z0}$. Площадь поперечного сечения ПФ такой плоскостью $A = A(k_{z0}, \theta, \varphi)$ дается интегралом

$$A(k_{z0}, \theta, \varphi) = \int_0^{2\pi} d\phi' k_F^2(\varphi + \phi', k_z) / (2 \cos \theta), \quad (3.26)$$

где переменная интегрирования ϕ' есть разница между азимутальными углами точки на ПФ и направления магнитного поля, а k_z в этой точке ПФ удовлетворяет уравнению

$$k_z = k_{z0} - k_F(\varphi + \phi', k_z) \tan \theta \cos \phi'. \quad (3.27)$$

Ур. (3.26) и (3.27) позволяют вычислить площадь поперечного сечения $A(k_{z0}, \theta, \varphi, k_F c^*)$ численно для любой заданной ПФ, определяемой функцией $k_F(\phi, k_z)$ или

коэффициентами $k_{\mu\nu}$ ее разложения по гармоникам в Ур. (3.3). На практике обычно решается обратная задача определения геометрии ПФ из экспериментальных данных об угловой зависимости магнитосопротивления или частоты квантовых осцилляций. Тогда прямая процедура подгонки экспериментальных данных параметрами $k_{\mu\nu}$ в разложении (3.3) слишком неоднозначна из-за большого числа подгоночных параметров $k_{\mu\nu}$. Обычно, коэффициенты $k_{\mu\nu}$ быстро уменьшаются с увеличением μ и ν . Аналогично, в разложении по гармоникам площади поперечного сечения

$$A(k_{z0}, \theta, \varphi) = \sum_{\mu, \nu} A_{\mu\nu}(\theta) \cos[\mu\varphi + \delta_{\mu\nu}] \cos(\nu c^* k_{z0}) \quad (3.28)$$

коэффициенты $A_{\mu\nu}(\theta)$ быстро уменьшаются с ростом μ и ν . Поэтому, имеет смысл подгонять только первые несколько членов в разложениях по гармоникам площади поперечного сечения в Ур. (3.28) и ПФ в Ур. (3.3). Первые коэффициенты $A_{\mu\nu}(\theta)$ могут быть найдены аналитически в главном порядке по $k_{\mu\nu}$. Аналитическая формула для коэффициентов $A_{\mu\nu}(\theta)$ особенно полезна из-за их сложной зависимости от θ . Как было показано в разделе 3.2.1, в пределе $\omega_c \tau \gg 1$ и $t_z/E_F \ll 1$, коэффициенты $A_{\mu\nu}(\theta)$ напрямую связаны с угловой зависимостью магнитосопротивления соотношением (3.17).

В нулевом порядке по коэффициентам $k_{\mu\nu}$ в разложении (3.3), то есть для цилиндрической ПФ без гофрировки вдоль k_z и асимметрии в плоскости x - y , получается тривиальный результат $A^{(0)} = \pi k_F^2 / \cos \theta$, где $k_F \equiv k_{00}$.

В первом порядке по коэффициентам $k_{\mu\nu}$, можно пренебречь зависимостью $k_F(\phi, k_z)$ в Ур. (3.27) и подставлять

$$k_z \approx k_{z0} - k_F \tan \theta \cos \phi' \quad (3.29)$$

в Ур. (3.3) и (3.26). Это дает поправку первого порядка в угловую зависимость площади поперечного сечения:

$$\begin{aligned} A^{(1)}(k_{z0}, \theta, \varphi) &= \int_0^{2\pi} d\phi' \frac{k_F^2(\varphi, \phi', k_{z0}) - k_{00}^2}{2 \cos \theta} \\ &\approx \int_0^{2\pi} \frac{k_{00} d\phi'}{\cos \theta} \sum_{\mu, \nu \geq 0} 'k_{\mu\nu} \cos[\mu(\varphi + \phi') + \phi_\mu] \cos[\nu(k_{z0} - k_F \tan \theta \cos \phi') c^*], \end{aligned} \quad (3.30)$$

где сумма $\sum_{\mu, \nu \geq 0} '$ не содержит члена $\mu = \nu = 0$. Поскольку μ четно, в подынтегральном выражении можно сделать замену (здесь и ниже мы вводим новое обозначение $\kappa \equiv k_F c^* \tan \theta$):

$$\cos[\nu(k_{z0} - k_F \tan \theta \cos \phi') c^*] \rightarrow \cos[\nu k_{z0} c^*] \cos[\nu \kappa \cos \phi']. \quad (3.31)$$

Также в подынтегральном выражении можно заменить

$$\cos [\mu (\varphi + \phi') + \phi_\mu] \rightarrow \cos [\mu\varphi + \phi_\mu] \cos [\mu\phi'], \quad (3.32)$$

поскольку все нечетные по ϕ' члены исчезают после интегрирования по ϕ' . Теперь интеграл по ϕ' в Ур. (3.30) является табличным, и поправка $A^{(1)}$ первого порядка по $k_{\mu\nu}$ принимает вид

$$A^{(1)} = \frac{2\pi k_{00}}{\cos \theta} \sum_{\mu, \nu \geq 0} '(-1)^{\mu/2} k_{\mu\nu} \cos [\mu\varphi + \phi_{\mu\nu}] \cos (\nu k_{z0} c^*) J_\mu (\nu\kappa) \quad (3.33)$$

в согласии с Ур. (2) статьи [173]. Это уравнение дает простую связь между коэффициентами $A_{\mu\nu}(\theta)$ в Ур. (3.28) и $k_{\mu\nu}$ в Ур. (3.3):

$$A_{\mu\nu}(\theta) = \frac{2\pi k_{00}}{\cos \theta} (-1)^{\mu/2} k_{\mu\nu} J_\mu (\nu\kappa). \quad (3.34)$$

Однако, это простое соотношение получено в первом порядке по $k_{\mu\nu}$ и область его применимости не велика, а для большинства пар $\mu\nu$ оно вообще не верно.

Поскольку функция Бесселя $J_\mu(0) = 0$ для $\mu \neq 0$, все члены $\sim k_{\mu 0}$ исчезают в Ур. (3.33) и (3.34). Это естественно, поскольку в нулевом порядке по t_z площадь поперечного сечения

$$A^{(0)}(k_{z0}, \theta, \varphi) = \int_0^{2\pi} d\phi' \frac{k_0^2 (\varphi + \phi')}{2 \cos \theta} \quad (3.35)$$

не зависит от φ . Следовательно, чтобы извлечь какую-либо информацию о зависимости ПФ от азимутального угла ϕ , нужно рассматривать как минимум первый порядок по t_z/E_F , то есть найти $A_{\mu 1}(\theta)$. Таким образом, зависимость от φ площади поперечного сечения начинается с члена $k_{\mu 1}$, который обычно того же порядка величины, что и член второго порядка $k_{\mu 0} k_{01}/k_F$ [см. Ур. (B.10)]. Поскольку Ур. (3.33), а также Ур. (2) в работе [173], выведено только в первом порядке по $k_{\mu\nu}$ [см. Ур. (3.29) и (3.30)], результат в Ур. (3.33) не дает правильной зависимости площади поперечного сечения от азимутального угла φ даже в низшем порядке, зависящем от φ . Это утверждение иллюстрируется ниже на Рис. 3.2 и 3.3. Извлечение более высоких гармоник в разложении (3.3) по экспериментальным данным по угловой зависимости площади поперечного сечения, используя Ур. (3.33), дает еще большие ошибки.

Вычислим более точно неисчезающий член низшего порядка в зависимости площади поперечного сечения от азимутального угла φ , определяемый коэффициентом (функцией) $A_{\mu 1}(\theta)$ в разложении Фурье в Ур. (3.28). При $t_z \ll E_F$, достаточно взять форму ПФ в первом порядке по t_z , определяемую Ур. (B.4). С той же точностью, Ур. (3.26)

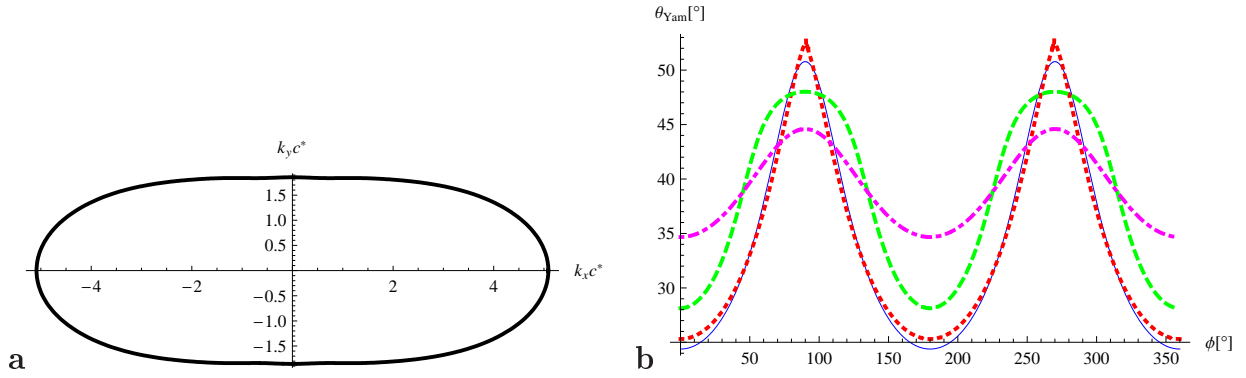


Рисунок 3.2: (а) Форма поверхности Ферми (ПФ) в проводящей плоскости и (б) первый угол Ямаджи как функция азимутального угла φ для вытянутой ПФ с моноклинной симметрией импульса Ферми описываемого уравнением $k_0(\phi) = \sum_{j=0}^4 k_{4j0} \cos(2j\phi)$ с $\beta = k_{20}/k_{00} = 0.5$. Более высокие гармоники добавлены, чтобы сгладить ПФ (см. Рис. а). На Рис. б сплошная синяя линия – результат численного (точного) расчета первого угла Ямаджи, полученный из Ур. (3.37); красная пунктирная линия изображает результат Ур. (3.25); зеленая штриховая линия – результат Ур. (3.44). Видно, что Ур. (3.25) дает наиболее точный результат для зависимости углов Ямаджи от азимутального угла в случае сильно вытянутой ПФ. Исправленное разложение по гармоникам в Ур. (3.44) (зеленая штриховая линия) дает хорошее качественное согласие с точным результатом, несмотря на то, что коэффициент $\beta = 0.5 \sim 1$ не мал. Ур. (3.33) (фиолетовая штрих-пунктирная линия), полученное [173, 180] разложением по гармоникам в первом порядке, дает слишком слабую зависимость угла Ямаджи от φ .

записывается в виде

$$A(k_{z0}, \theta, \varphi) \approx \int_0^{2\pi} d\phi' \frac{k_0^2(\varphi + \phi')}{2 \cos \theta} \left[1 + \frac{2k_1(\varphi + \phi')}{k_0(\varphi + \phi')} \cos(k_z c^*) \right]. \quad (3.36)$$

Подставляя Ур. (3.27) и (3.31), мы получаем следующее выражение для зависящей от k_z поправки к $A(k_{z0}, \theta, \varphi)$:

$$A_1 = \frac{\cos[c^* k_{z0}]}{\cos \theta} \int_0^{2\pi} d\phi' k_0(\phi') k_1(\phi') \cos[c^* k_0(\phi') \tan \theta \cos(\phi' - \varphi)]. \quad (3.37)$$

Здесь мы также заменили переменную интегрирования: $\phi' \rightarrow \phi' + \varphi$. Формула Ямаджи (3.5) легко получается из (3.37) если взять $k_0(\phi) = k_F = const$ и $k_1(\phi) = C_1 (2t_z/E_F) k_F = const$ после интегрирования по ϕ' :

$$A_{01}(\theta) = \frac{2t_z}{E_F} C_1 \frac{2\pi k_F^2}{\cos \theta} J_0(\kappa), \quad (3.38)$$

где зависящая от закона дисперсии постоянная

$$C_1 \equiv (E_F/k_F) / (\partial\epsilon_{00}/\partial k)|_{k=k_F} \sim 1. \quad (3.39)$$

Зависящий от φ член наименьшего порядка в площади поперечного сечения дается коэффициентом

$$A_{m1}(\theta) = \int_0^{2\pi} \frac{\cos(m\varphi + \phi_{m1}) d\varphi}{\pi \cos \theta} \frac{A_1(k_{z0}, \theta, \varphi)}{\cos[c^*k_{z0}]}. \quad (3.40)$$

Выполнив интегрирование по φ , получаем

$$A_{m1}(\theta) = \frac{2(-1)^{m/2}}{\cos \theta} \int_0^{2\pi} d\phi' k_0(\phi') k_1(\phi') \cos(m\phi' + \phi_{m1}) J_m[c^*k_0(\phi') \tan \theta]. \quad (3.41)$$

Чтобы продвинуться дальше, нужно конкретизировать симметрию функций $k_0(\phi)$ и $k_1(\phi)$. Мы будем различать два типа симметрии электронного закона дисперсии: (1) с "прямым", то есть в главном порядке не зависящим от ϕ интегралом межслоевого перескока t_z (раздел 3.2.4); и (2) с "косым" интегралом перескока, зависящим от ϕ (то есть от направления импульса вдоль плоскости) уже в главном (наинизшем) порядке по гармоникам (раздел 3.2.5).

3.2.4 "Прямой" интеграл межслоевого перескока

Когда $t_z \ll E_F$, то можно оставить только нулевую и первую гармоники гофрировки ПФ вдоль z , то есть только функции $k_0(\phi)$ и $k_1(\phi)$ в Ур. (3.2), описывающие анизотропию ПФ в проводящей плоскости. Обычно, также достаточно оставить только первые гармоники по ϕ в разложении Фурье функций $k_0(\phi)$ и $k_1(\phi)$.² Если кристаллическая симметрия допускает не зависящий от ϕ ("прямой") интеграл перескока t_z , то первые члены разложения этих функций

$$\begin{aligned} k_0(\phi) &\approx (1 + \beta \cos m\phi) k_F, \\ k_1(\phi) &\approx \frac{2t_z C_1}{E_F} (1 + \beta_1 \cos m\phi) k_F, \end{aligned} \quad (3.42)$$

где m – четное целое число, $|\beta|, |\beta_1| \ll 1$ и константа $C_1 \sim 1$ определена в Ур. (3.39): $2t_z C_1/E_F = k_{01}/k_{00}$. Этот случай соответствует ПФ, например, изображенной на Рис. 3.1. Это наиболее распространенный тип симметрии. Например, закон дисперсии электронов, принятый при описании высокотемпературных сверхпроводников семейства

²Если ПФ в проводящей плоскости не является сильно вытянутой, как это изучалось в разделе 3.2.2, то коэффициенты $k_{\mu \neq 0, \nu} \ll k_{0, \nu}$ и быстро спадают с ростом μ .

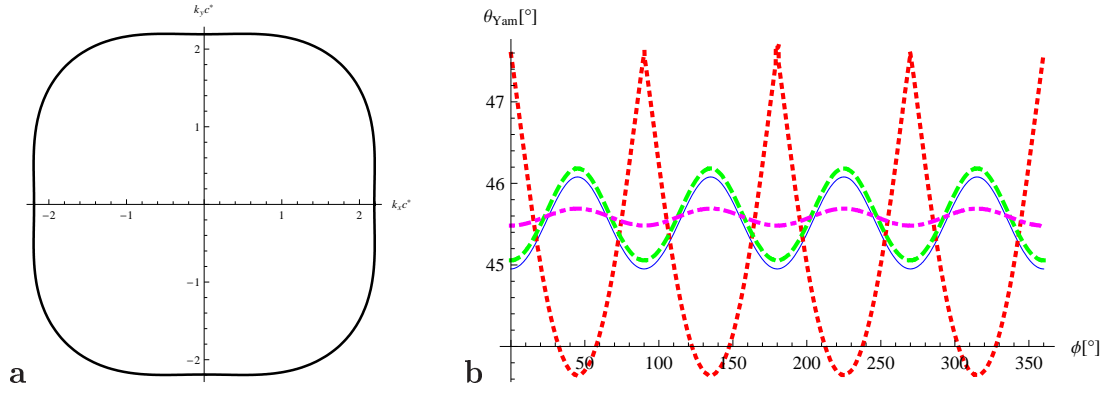


Рисунок 3.3: Форма поверхности Ферми (ПФ) в проводящей плоскости (а) и первый угол Ямаджи как функция азимутального угла φ (б) для ПФ с тетрагональной симметрией импульса Ферми описываемого уравнением (3.42) с $\beta = -0.07$. Рис. а показывает, что даже для очень малого параметра $|\beta| \ll 1$ ПФ в проводящей плоскости практически квадратная со сглаженными углами, то есть ее анизотропия очень сильно выражена. На Рис. б сплошная синяя линия – результат численного (точного) расчета первого угла Ямаджи, полученный из Ур. (3.37); красная пунктирная линия изображает результат Ур. (3.25); зеленая штриховая линия – результат Ур. (3.44), а фиолетовая штрих-пунктирная линия соответствует Ур. (3.33) или результату статей [173, 180]. Видно, что Ур. (3.25) (красная пунктирная линия) дает противоположный результат для зависимости углов Ямаджи от азимутального угла. То есть, для тетрагональной симметрии ПФ оно совсем не применимо. Исправленное разложение по гармоникам в Ур. (3.44) (зеленая штриховая линия) дает хорошее количественное согласие с точным результатом. Ур. (3.33) (разложение по гармоникам в первом порядке, фиолетовая штрих-пунктирная линия) дает слишком слабую зависимость от φ , приблизительно в 8 раз слабее, чем точный результат.

YBCO, Bi2212, Tl2212 и содержащий сильно зависящий от импульса межслоевой интеграл перескока вида [179] $t_{\perp}(\mathbf{k}) = (t_{\perp}/4) [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2$, дает гофрировку ПФ, описываемую Ур. (3.42) с $m = 4$ и $\beta_1 = 1$, где более высокими гармониками можно пренебречь и даже коэффициент $|\beta| \ll 1$.

Разложим функцию Бесселя $J_m [c^* k_0 (\phi') \tan \theta]$ в Ур. (3.41) по малому параметру $\beta \kappa$ до членов первого порядка (для первого угла Ямаджи $\kappa \equiv c^* k_F \tan \theta \approx 2.4 \sim 1$). Тогда

интеграл по ϕ' в Ур. (3.41) упрощается:

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\phi' (\beta + \beta_1) \cos(m\phi') \cos(m\phi') J_m(\kappa) \\ & + \int_0^{2\pi} d\phi' \cos(m\phi') J'_m(\kappa) \kappa \beta \cos(m\phi') \\ & = \pi\beta \{ J_m(\kappa) (1 + \beta_1/\beta) + J'_m(\kappa) \kappa \}, \end{aligned}$$

где производная

$$J'_m(\kappa) = \frac{dJ_m(\kappa)}{d\kappa} = \frac{m}{\kappa} J_m(\kappa) - J_{m+1}(\kappa).$$

Следовательно, в первом порядке по β и β_1 мы получаем

$$A_{m1}(\theta) = (-1)^{m/2} \frac{4\pi k_F^2 C_1 \beta t_z}{E_F \cos \theta} \left[J_m(\kappa) \left(1 + \frac{\beta_1}{\beta} + m \right) - \kappa J_{m+1}(\kappa) \right]. \quad (3.43)$$

Собирая Ур. (3.28), (3.38) и (3.43), для угловой зависимости площади поперечного сечения получаем следующее выражение

$$\begin{aligned} A(k_{z0}, \theta, \varphi) & \approx \frac{\pi k_F^2}{\cos \theta} + \frac{4\pi k_F^2 t_z C_1}{E_F \cos \theta} \cos[c^* k_{z0}] \times \\ & \times \left\{ J_0(\kappa) + \beta (-1)^{m/2} [(1 + \beta_1/\beta + m) J_m(\kappa) - \kappa J_{m+1}(\kappa)] \cos(m\varphi) \right\}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Отношение β_1/β , входящее в эту формулу, может быть выражено через коэффициенты параметризации ПФ в Ур. (3.3): $\beta \equiv k_{\mu 0}/k_{00}$, $\beta_1 = k_{\mu 1}/k_{01}$, $\beta_1/\beta = k_{\mu 1} k_{00}/k_{01} k_{\mu 0}$. Константа $C_1 = E_F k_{01}/2t_z k_{00}$ связывает значение t_z и геометрическую гофрировку ПФ. Она не влияет на углы Ямаджи. Однако, от нее зависит частота биений магнитных квантовых осцилляций и амплитуда зависимости от φ площади поперечного сечения ПФ. Для закона дисперсии вида (В.7), когда выполняется условие (В.8), отношение $\beta_1/\beta = 1$ и константа $C_1 = 1$. Для произвольного, но реалистичного закона дисперсии, $\beta_1/\beta \sim 1$ и $C_1 \sim 1$.

Различие между двумя аналитическими результатами, представленными Ур. (3.44) и (3.33), очень велико: множитель $J_m(\kappa)$ в Ур. (3.33) заменен на совсем другой множитель $[(1 + \beta_1/\beta + m) J_m(\kappa) - \kappa J_{m+1}(\kappa)]$ в Ур. (3.44). Во-первых, зависимость площади поперечного сечения от φ , предсказанная в Ур. (3.44), примерно в $2 + m$ раз сильнее предсказанной в Ур. (3.33) или в статье [173]. Во-вторых, она может по-разному зависеть от θ из-за члена $J_{m+1}(\kappa)$, что особенно важно для большого угла наклона и $\kappa \gtrsim 1$. Чтобы проиллюстрировать сделанные утверждения, результаты Ур. (3.26), (3.44), (3.33) и (3.25) изображены на Рис. 3.2 и 3.3 для законов дисперсии с моноклинной $m = 2$ и тетрагональной $m = 4$ симметриями.

3.2.5 Сильно зависящий от импульса ”косой” интеграл межслоевого перескока

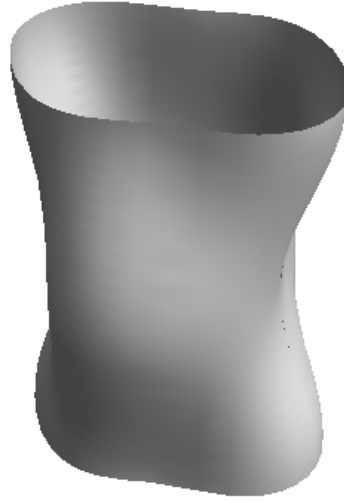


Рисунок 3.4: Иллюстрация формы ПФ, описываемой Ур. (3.45) с параметрами $m = 2$, $\beta = 0.05$ и $2C_1t_z/E_F = 0.2$.

В некоторых соединениях, например в высокотемпературных сверхпроводниках Sr_2RuO_4 и $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$, [173, 14, 17, 18] объемно-центрированная тетрагональная кристаллическая симметрия приводит к тому, что независимый от ϕ член в межслоевом интеграле перескока t_z обращается в нуль. В этом случае главный не исчезающий член начинается с ненулевой гармоники по ϕ : $t_z(\phi) = t_{c0} \sin(2\phi)$, во всех или в некоторых частях ПФ. Тогда вместо Ур. (3.42) мы получаем

$$\begin{aligned} k_0(\phi) &\approx (1 + \beta \cos 2m\phi) k_F, \\ k_1(\phi) &\approx \frac{2t_z}{E_F} k_F C_1 \sin(m\phi) (1 + \beta_1 \cos 2m\phi). \end{aligned} \quad (3.45)$$

Соответствующая форма ПФ изображена на Рис. 3.4, где очень большое значение $t_z = 0.1E_F$ взято для иллюстрации. Подставляя Ур. (3.45) в Ур. (3.41) и взяв $\beta = \beta_1 = 0$, получаем главный зависящий от φ член в угловой зависимости площади поперечного сечения, определяемый коэффициентом

$$A_{m1}(\theta) \approx \frac{2\pi k_F^2 (-1)^{m/2}}{\cos \theta} \frac{2t_z C_1}{E_F} J_m(\kappa) \quad (3.46)$$

в согласии с результатом первого порядка по $k_{\mu\nu}$ в Ур. (3.33). Этот коэффициент не зависит от анизотропии ПФ в проводящей плоскости, определяемой параметром β в Ур. (3.45). Чтобы извлечь эту анизотропию в наинизшем порядке по гармоникам от φ , в случае нашей симметрии, описываемой Ур. (3.45), надо рассмотреть $3m$ гармонику в угловой зависимости площади поперечного сечения. Для этого мы заменим в Ур. (3.41) $m \rightarrow 3m$, подставим Ур. (3.45) и сделаем вычисления, аналогичные проведенным при выводе Ур. (3.43). Тогда, в низшем порядке по β, β_1 , мы получаем

$$A_{3m-1}(\theta) = \frac{(-1)^{3m/2}}{\cos \theta} \frac{2\pi t_z C_1}{E_F} \beta k_F^2 \left[\left(1 + \frac{\beta_1}{\beta} + 3m \right) J_{3m}(\kappa) - \kappa J_{3m+1}(\kappa) \right]. \quad (3.47)$$

Этот результат отличается от Ур. (3.43) заменой $m \rightarrow 3m$ (заметим, что $m = 2$ для Sr_2RuO_4 и $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$), и множителем перед квадратной скобкой, который в Ур. (3.47) в два раза меньше, чем в Ур. (3.43). Разница между новой формулой (3.47) и результатом первого порядка по $k_{\mu\nu}$ в Ур. (3.33) даже сильнее, чем в случае Ур. (3.43). Полная зависимость от φ площади поперечного сечения в нашей симметрии, описываемой Ур. (3.45), дается выражением

$$A(k_{z0}, \theta, \varphi) \approx \frac{\pi k_F^2}{\cos \theta} + \frac{4\pi k_F^2 t_z C_1}{E_F \cos \theta} \cos [c^* k_{z0}] \times \quad (3.48)$$

$$\times \left\{ J_m(\kappa) \sin(m\varphi) + \frac{\beta}{2} (-1)^{3m/2} \left[\left(1 + \frac{\beta_1}{\beta} + 3m \right) J_{3m}(\kappa) - \kappa J_{3m+1}(\kappa) \right] \sin(3m\varphi) \right\}.$$

Эта формула может быть использована при анализе экспериментальных данных об угловой зависимости площади поперечного сечения (или связанного с ней уравнением (3.17) магнитосопротивления) в Sr_2RuO_4 , $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$, где $m = 2$ в Ур. (3.48), или в других слоистых соединениях с подходящей симметрией. Заметим, что Ур. (3.44) и (3.48) были выведены при условии $\beta\kappa \ll 1$, которое надежно выполнено в соединениях с тетрагональной или гексагональной симметрией при не слишком большом угле наклона магнитного поля θ . При большом угле наклона, $\tan \theta > E_F/2t_z$, приведенные вычисления не верны также из-за многократных пересечений ПФ плоскостью поперечного сечения.

3.2.6 Применение полученных формул для анализа экспериментальных данных и обсуждение

Магнитные квантовые осцилляции в квазидвумерных металлах имеют две близкие частоты F_{\max} и F_{\min} , соответствующие максимуму и минимуму площади поперечного сечения ПФ. Разница этих частот $\Delta F = F_{\max} - F_{\min}$ имеет порядок величины $\Delta F \sim$

$4\pi k_F^2 t_z / E_F$; она совпадает с частотой биений и равна половине частоты медленных осцилляций (см. главу 2). Согласно полученным формулам (3.44) и (3.48), чтобы извлечь анизотропию ПФ в проводящей плоскости, то есть зависимость ПФ от ϕ , нужно измерить зависимость этой частоты биений ΔF (или частоты медленных осцилляций, что проще) от азимутального угла φ наклона магнитного поля. Ур. (3.44) и (3.48) могут быть использованы для определения оптимальной ориентации магнитного поля, при которой легче всего наблюдать зависимость частоты биений или медленных осцилляций от φ , или хотя бы сами биения или медленные осцилляции. Заметим, что само наблюдение биений или медленных осцилляций уже информативно, поскольку означает существование хорошо определенной трехмерной ПФ и позволяет экспериментально определить величину интеграла межслоевого перескока t_z согласно Ур. (2.38).

Для "прямого" межслоевого переноса, описываемого Ур. (3.42) с t_z , не зависящим в главном порядке от ϕ , частота биений или медленных осцилляций максимальна, когда магнитное поле перпендикулярно слоям, то есть когда полярный угол наклона магнитного поля $\theta = 0$. Однако, для "косого" межслоевого переноса, описываемого Ур. (3.45), частота биений при $\theta = 0$ равна нулю, как следует из Ур. (3.48). Следовательно в этом случае следует наклонить поле, чтобы наблюдать биения или медленные осцилляции. При этой симметрии угловая зависимость частоты биений ΔF дается функцией в фигурных скобках в Ур. (3.48), где первый член $J_m(\kappa) \sin(m\varphi)$ обычно много больше второго. Его максимум определяет оптимальную ориентацию $(\theta_{opt}, \varphi_{opt})$ магнитного поля для наблюдения биений или медленных осцилляций. Для $m = 2$, как в Sr_2RuO_4 , $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ и в некоторых других высокотемпературных сверхпроводниках, множитель $J_m(\kappa) \sin(m\varphi)$ имеет максимум при $\varphi_{opt} = (2n + 1)\pi/4$ и $\theta_{opt} \approx \arctan(3.0/k_F c^*)$, где $c^* = d$ – постоянная решетки вдоль z . Заметим, что спиновый множитель амплитуды квантовых осцилляций тоже зависит от θ . [4]

Если магнитные квантовые осцилляции не заметны в эксперименте, например, из-за высокой температуры, то могут наблюдаться медленные осцилляции (см. раздел 2.2.3), частота которых равна $2\Delta F$ и также информативна, как и частота биений. Если даже медленные осцилляции не наблюдаются, то можно наблюдать угловые осцилляции магнитосопротивления, которые дают зависимость углов Ямаджи (максимумов магнитосопротивления) от азимутального угла φ . Чтобы определить зависимость углов Ямаджи от φ , можно снова использовать Ур. (3.44) и (3.48), а в случае вытянутой ПФ также и Ур. (3.25).

Если можно экспериментально различить зависимость углов Ямаджи, частоты биений

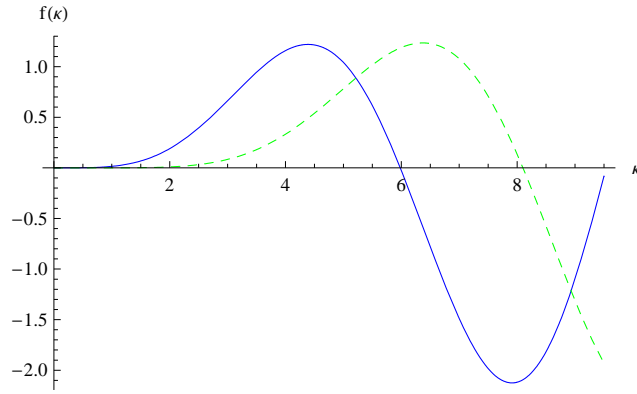


Рисунок 3.5: Амплитуда зависимости от φ площади поперечного сечения как функция полярного угла θ для тетрагональной (сплошная синяя линия) и гексагональной (зеленая пунктирная линия) симметрий ПФ в проводящей плоскости в случае "прямого" межслоевого перескока, описываемого Ур. (3.42).

или медленных осцилляций от φ , то кроме симметрии закона дисперсии можно извлечь также информацию о величине анизотропии ПФ в проводящей плоскости. Ур. (3.44) и (3.48) снова помогают определить оптимальную ориентацию магнитного поля для наблюдения этой зависимости от φ . Для "прямого" межслоевого перескока, описываемого Ур. (3.42), эта зависимость частоты ΔF от $\varphi \propto \cos m\varphi$ имеет максимум амплитуды, когда множитель $f(\kappa) = (1 + \beta_1/\beta + m) J_m(\kappa) - \kappa J_{m+1}(\kappa)$ в Ур. (3.44) максимален. Для типичного значения $\beta_1/\beta = 1$ этот множитель как функция $\kappa \equiv k_F c^* \tan \theta$ для $m = 4$ и $m = 6$ построен на Рис. 3.5. Функция $f(\kappa)$ имеет первый максимум при $\kappa \approx m$ для $m = 4$ и $m = 6$ (см. Рис. 3.5). Разумно использовать только первый максимум функции на Рис. 3.5, потому что при сильном наклоне магнитного поля циклотронная масса $\propto 1/\cos \theta$ больше, что уменьшает амплитуду квантовых и даже медленных осцилляций. В случае "прямого" межслоевого перескока, уже низшая гармоника в зависимости ΔF от φ позволяет определить относительную амплитуду β той же гармоники в зависимости импульса Ферми от ϕ [см. Ур. (3.44)].

В случае "косого" межслоевого перескока, описываемого Ур. (3.45), в главном порядке зависимость частот квантовых осцилляций от φ происходит из-за зависимости межслоевого интеграла перескока t_z от ϕ и не дает информацию об анизотропии ПФ в проводящей плоскости, то есть о коэффициентах $k_{\mu 0}$. Чтобы определить эти коэффициенты $k_{\mu 0}$, нужно изучать более высокие гармоники $\propto \cos(3m\varphi)$ в угловой зависимости частот магнитных осцилляций. Амплитуда этих гармоник дается функцией

$f_1(\kappa) = (1 + \beta_1/\beta + 3m) J_{3m}(\kappa) - \kappa J_{3m+1}(\kappa)$ в Ур. (3.48), которая имеет первый максимум при $\kappa \approx 3m$. Это определяет оптимальный полярный угол θ_{opt} , при котором зависимость частоты осцилляций от азимутального угла φ легче всего наблюдать. Согласно Ур. (3.48), эта зависимость дает амплитуду гармоника $2m$ в азимутальной зависимости ПФ.

Учитывая связь между межслоевой проводимостью и производной от площади поперечного сечения ПФ, определяемую Ур. (3.17), Ур. (3.48) также указывает на сильную зависимость межслоевого магнитосопротивления от азимутального угла φ в случае "косого" межслоевого перескока. При $\theta = 0$ согласно Ур. (3.48) и (3.17) $\sigma_{zz} \approx 0$. При $\theta \neq 0$ нулевая гармоника в зависимости межслоевого магнитосопротивления от φ отсутствует, что и определяет сильную зависимость межслоевого магнитосопротивления от азимутального угла φ , начинающуюся со второй гармоники. Такая зависимость $\sigma_{zz}(\theta, \varphi)$ наблюдается, например, в Sr_2RuO_4 и $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ и находится в противоречии с так называемым "третьим угловым эффектом", развитым в статье [181] для направления поля вдоль проводящей плоскости. Для ПФ на Рис. 3.3, "третий угловой эффект" [181] предсказывает максимум проводимости при $\varphi = 0$, соответствующим точкам перегиба на ПФ. Ур. (3.48), напротив, предсказывает эти максимумы при $\varphi = \pi/4$.

Таким образом, полученная в Ур. (3.25), (3.44) и (3.48) угловая зависимость площади поперечного сечения ПФ для квазидвумерных металлов является важным результатом, позволяющим определять геометрию ПФ по экспериментальным данным и рекомендовать оптимальные условия таких экспериментов. Сейчас мы еще раз кратко сформулируем область применимости полученных формул и их связь с более ранними теоретическими результатами.

Ур. (3.44) и (3.48) выведены используя разложение формы ПФ по гармоникам и предполагают, что амплитуды этих гармоник быстро спадают с увеличением их номера. Это оказывается очень хорошим приближением для тетрагональной и гексагональной симметрии, поскольку даже малое значение относительной амплитуды $\beta \ll 1$ сильно меняет форму ПФ в проводящей плоскости. Например, для почти квадратной ПФ на Рис. 3.3а, относительная амплитуда четвертой гармоники $|\beta| = 0.07 \ll 1$. Ур. (3.44) и (3.48) плохо применимы только в случае сильно вытянутой ПФ (см. Рис. 3.2а), когда $\beta > 0.5$. К счастью, именно в этом пределе хорошо работает Ур. (3.25), позволяющее надежно определить анизотропию ПФ в проводящей плоскости (см. Рис. 3.2б).

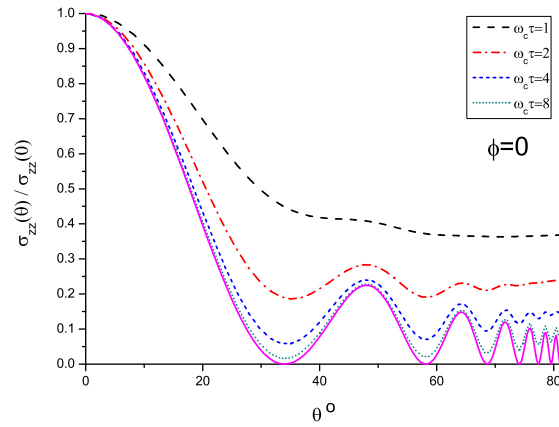
Ур. (3.44) и (3.48) сильно отличаются от известного ранее результата [173], описываемого Ур. (3.33) и выведенного в пренебрежении членов второго порядка по коэффициентам $k_{\mu\nu}/k_{00}$ гофрировки ПФ. Это оказывается важно, поскольку в

первом порядке по $k_{\mu\nu}/k_{00}$ зависимость ПФ от ϕ не входит в угловую зависимость от φ магнитосопротивления или частот квантовых осцилляций. Разница между "старыми" формулами (3.33) из работ [173, 180] и новыми формулами (3.44) и (3.48) проиллюстрирована на Рис. 3.2 и 3.3: "старая" формула (3.33) дает приблизительно в $\sim 2 + m$ раз более слабую зависимость площади сечения ПФ от φ , что приводит к неправильному извлечению геометрии ПФ из экспериментальных данных. В частности, это существенно меняет параметры геометрии ПФ в Sr_2RuO_4 , представленные в таблице 4 статьи [180] и определенные по угловой зависимости частоты квантовых осцилляций на основе Ур. (13) статьи [180], совпадающего с Ур. (3.33) в разделе 3.2.3. Это уравнение позволяет извлекать только те коэффициенты $k_{\mu\nu}$, которые не могут быть получены как произведения много больших коэффициентов, например, таких как $k_{\mu 0}k_{0\nu}/k_{00}$. Кроме этого, коэффициент $k_{\mu 0}$ также не может быть правильно извлечен на основе Ур. (3.33). В таблице 4 статьи [180], на основе формулы (3.33) первого порядка по $k_{\mu\nu}/k_{00}$ можно надежно извлекать только следующие параметры геометрии ПФ: k_{00} и k_{21} для α -орбиты, коэффициенты k_{00} и k_{01} для β -орбиты, и коэффициенты k_{00} и k_{02} для γ -орбиты. Остальные коэффициенты в таблице 4 статьи [180] не могут быть правильно определены на основе Ур. (13) и (24) статьи [180]. Использование полученных выше результатов в Ур. (3.44) и (3.48) позволяет надежно извлечь несколько следующих коэффициентов в таблице 4 статьи [180], например, коэффициенты k_{40} и k_{61} для α -орбиты, коэффициенты k_{40} и k_{41} для β -орбиты, и коэффициенты k_{40} и k_{42} для γ -орбиты.

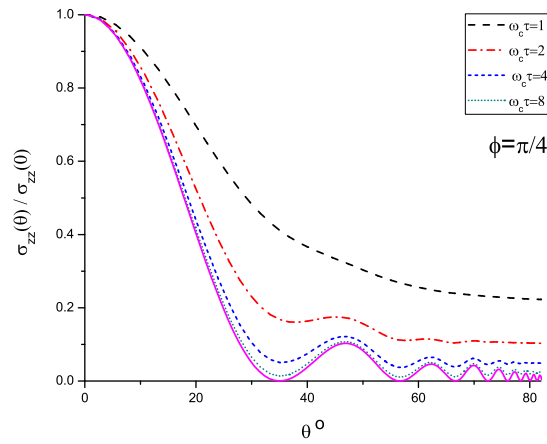
Угловая зависимость площади поперечного сечения ПФ, описываемая Ур. (3.44) и (3.48), позволяет определять не только азимутальную зависимость от ϕ геометрии ПФ, но и некоторую информацию о скорости Ферми по коэффициенту β_1 . Однако, на практике такое определение β_1 намного сложнее, чем извлечение коэффициента β , потому что согласно Ур. (3.44) и (3.48), зависимость площади поперечного сечения ПФ $A_1(\theta, \varphi)$ от β_1 намного слабее, чем от β . На Рис. 3.2,3.3, для определенности, мы взяли дисперсию вида (В.7) и $t_z(\phi)$ не зависящим от ϕ , что дает Ур. (В.10) и $\beta_1/\beta = 1$, $C_1 = 1$ в Ур. (3.44).

Зависимость углов Ямаджи от азимутального угла φ оказывается слабой в случае тетрагональной и гексагональной симметрий. Эта зависимость слабее, чем предсказанная в Ур. (3.25) и использованная в статьях [166, 175, 176, 177] для вытянутой ПФ, и значительно сильнее, чем предсказанная в Ур. (3.33) и использованная в статьях [173, 180]. В случае тетрагональной симметрии Ур. (3.25) дает неправильный знак зависимости первого угла Ямаджи от φ , как можно видеть из Рис. 3.3б. Для ПФ в Ур. (В.9) и обсуждаемой в статье [175], имеется сильная тетрагональная модуляция эллиптической

ПФ, и Ур. (3.25) может также давать не правильный результат.



а



б

Рисунок 3.6: Нормированная межслоевая проводимость σ_{zz} , вычисленная из Ур. (3.8) для дисперсии (3.49) как функция полярного угла θ для двух значений азимутального угла ϕ для нескольких значений $\omega_c \tau = 1$ (черная штриховая линия), $\omega_c \tau = 2$ (красная штрихпунктирная линия), $\omega_c \tau = 4$ (синяя пунктирная линия) и $\omega_c \tau = 8$ (зеленая линия из точек). Сплошная фиолетовая линия дает результат Ур. (3.17).

Ур. (3.44),(3.48),(3.25) определяют геометрические углы Ямаджи - условия, когда площадь поперечного сечения ПФ в главном порядке не зависит k_z , что согласно Ур. (3.17), дает минимумы межслоевой проводимости при $\omega_c \tau \rightarrow \infty$. Чтобы определить, насколько сильно реальные минимумы межслоевой проводимости при конечном $\omega_c \tau$, вычисленные из формулы Шокли в Ур. (3.8), отличаются от геометрического условия (3.17), проведем численный расчет угловой зависимости межслоевой проводимости $\sigma_{zz}(\theta, \varphi, \omega_c \tau)$ из Ур.

(3.8) при четырех различных значениях $\omega_c\tau = 1, 2, 4, 8$ и двух значениях азимутального угла $\varphi = 0$ и $\varphi = \pi/4$.³ Затем, мы проведем сравнение полученных результатов с зависимостью $\sigma_{zz}(\theta, \varphi)$ вычисленной из Ур. (3.17). Результаты расчетов и такого сравнения представлены на Рис. 3.6. В этом расчете мы использовали закон дисперсии, принятый для описания купратных высокотемпературных сверхпроводников и данный формулой

$$\epsilon(k_x, k_y) = 2t_1 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4t_2 \cos(k_x a) \cos(k_y a) - 2t_3 [\cos(2k_x a) + \cos(2k_y a)] - E_F, \quad (3.49)$$

где $a = 3.95\text{\AA}$ – постоянная решетки в проводящей плоскости, и $t_1 = 0.38eV$, $t_2 = 0.32t_1$, $t_3 = 0.5t_2$. Мы также взяли зависящую от допирования энергию Ферми $E_F = 0.02123eV$. ПФ для такого закона дисперсии (3.49) имеет тетрагональную симметрию и очень близка к изображенной на Рис. 3.3а с несколько отличными значениями $k_F a \approx 2.14$ при $\varphi = 0$ и $k_F a \approx 2.43$ при $\varphi = \pi/4$. Межслоевой перескок является прямым (не зависящим от ϕ в главном порядке) и описывается Ур. (3.42). Из Рис. 3.6 видно, что геометрическая формула (3.17) дает достаточно точный результат для максимумов магнитосопротивления при $\omega_c\tau \gtrsim 2$. Для больших значений $\omega_c\tau$, результаты Ур. (3.17) и (3.8) совпадают, как и ожидалось. При $\omega_c\tau \lesssim 1$ разница между Ур. (3.17) и (3.8) для первого угла Ямаджи достигает 5-10%. Зависимости от φ первого угла Ямаджи в Ур. (3.17) и (3.8) хорошо согласуются: с уменьшением $\omega_c\tau$ уменьшается только амплитуда угловой зависимости магнитосопротивления.

Ур. (3.44),(3.48),(3.25),(3.17) верны только в первом порядке по t_\perp/ϵ_F . Обычно, этого достаточно в слоистых высокотемпературных сверхпроводниках, органических металлах и многих других соединениях, где $t_\perp/\epsilon_F \ll 1$. В более ”трехмерных” соединениях, или для определения тонких деталей на угловой зависимости магнитосопротивления, может оказаться полезным рассмотреть следующие порядки по t_\perp/ϵ_F .

Фоновое магнитосопротивление, в частности, значение к которому насыщается σ_{zz} при $\theta \rightarrow 90^\circ$ (см. Рис. 3.6), в сильном поле $\propto 1/B$ и зависит от произведения $k_F c^*$ согласно Ур.

³В случае изотропной ПФ в проводящей плоскости такое сравнение уже проводилось в работе [57] и качественных различий обнаружено не было. Кроме изотропии ПФ в проводящей плоскости, в статье [57] недостаточно подробно исследовался случай $\omega_c\tau \sim 1$. В связи с многочисленными экспериментами по угловой зависимости магнитосопротивления в допированных высокотемпературных купратных сверхпроводниках, где $\omega_c\tau \lesssim 1$ (см., например, [14]), вопрос о количественном различии между Ур. (3.8) и (3.17) вновь оказался актуальным.

(10) статьи [182]:

$$\sigma_{zz}(\theta \rightarrow \pm 90^\circ) / \sigma_{zz}^0 = 1 / \sqrt{1 + (k_F c^* \omega_{c0} \tau)^2}, \quad (3.50)$$

где $\omega_{c0} = eB_0/m^*c$. Кроме этого, σ_{zz} при $\theta \rightarrow 90^\circ$ также сильно зависит от азимутального угла φ (см. Рис. 3.6 и статью [181]). Эту зависимость от азимутального угла φ при $\theta = \pi/2$ можно использовать для определения геометрии ПФ в проводящей плоскости. Как было уже отмечено ранее, теория "третьего углового эффекта" [181] не всегда предсказывает правильную зависимость $\sigma_{zz}(\varphi)$ даже качественно. Поэтому, для извлечения геометрии ПФ из "третьего углового эффекта" можно использовать численный расчет на основе Ур. (3.8), как это сделано на Рис. 3.6.

3.3 Отклонения от стандартной теории угловой зависимости магнитосопротивления

Ур. (2) и (3.17) выведены из формулы Шокли (3.8), которая получена в рамках кинетического уравнения Больцмана в τ -приближении, предполагая время рассеяния τ не зависящим от магнитного поля или энергии. Это означает пренебрежение не только квантовыми осцилляциями, изученными в главе 2, но и более грубыми эффектами, например, монотонным ростом межслоевого магнитосопротивления, возникающим в сильно-анизотропных слоистых проводниках и рассмотренным в главе 1. Последний эффект дает дополнительную угловую зависимость межслоевого магнитосопротивления R_{zz} , поскольку продольное межслоевое магнитосопротивление $R_{zz}(B_z)$ зависит только от компоненты поля B_z , перпендикулярной проводящим слоям. Этот эффект рассмотрен в подразделе 3.3.1 и соответствует работе [60] (№ 1 в списке публикаций диссертанта). Возможны еще другие "некогерентные" механизмы межслоевого переноса электронов, которые также изменяют угловую зависимость магнитосопротивления. Эти эффекты будут рассмотрены в подразделе 3.3.2, который частично соответствует работе [46] (№ 13 в списке публикаций диссертанта).

3.3.1 Влияние продольного межслоевого магнитосопротивления на его угловую зависимость

Рассмотрим сильно анизотропный квазидвумерный металл, к которому применима модель из раздела 1.2.1. Тогда межслоевая проводимость во втором порядке по межслоевому

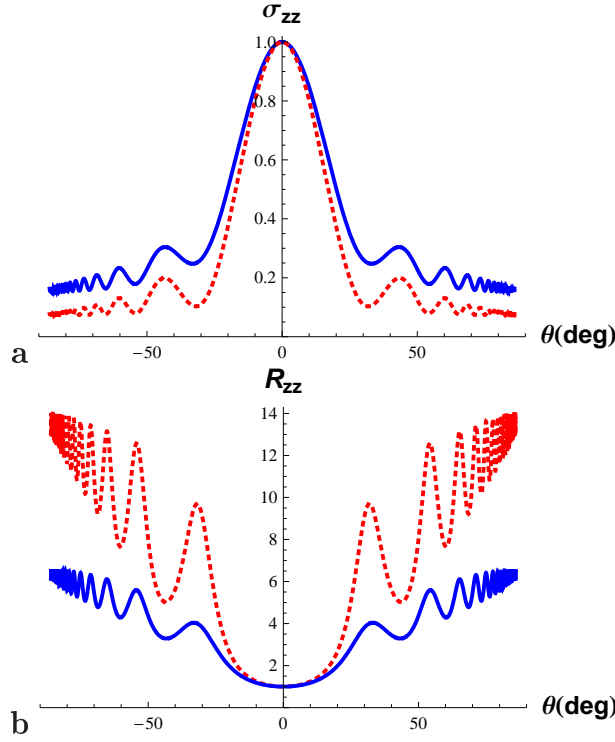


Рисунок 3.7: Угловая зависимость межслоевой проводимости $\sigma_{zz}(\theta)/\sigma_{zz}(0)$ (Рис. а) и магнитосопротивления $R_{zz}(\theta)/R_{zz}(0) = \sigma_{zz}(0)/\sigma_{zz}(\theta)$ (Fig. b), вычисленные из Ур. (3.58) с τ_B в Ур. (3.60) [сплошная синяя линия] и с $\tau_B = \tau_0$ [пунктирная красная линия]. Для графика были выбраны параметры $k_F d = 4$, $m^* = m_e$, $B = 3T$, $\Gamma_0 = 1K$, соответствующие $\omega_c \tau \approx 1.74$.

интегралу перескока t_z дается Ур. (1.12) и (1.15):

$$\sigma_{zz}(\varepsilon) = \frac{4\sigma_0\Gamma_0}{\pi\nu_{2D}} \int d^2\mathbf{r} \langle \text{Im}G_R(\mathbf{r}, j, \varepsilon) \rangle \langle \text{Im}G_R(\mathbf{r}, j+1, \varepsilon) \rangle, \quad (3.51)$$

Если магнитное поле наклонено под углом θ к нормали к проводящим слоям, $B = (B_x, 0, B_z) = (B \sin \theta, 0, B \cos \theta)$, функции Грина электронов $G_R(\mathbf{r}, j, \varepsilon)$ на двух соседних слоях приобретают фазовый сдвиг (см. Ур. (49) статьи [57]):

$$G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', j+1, \varepsilon) = G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', j, \varepsilon) \exp \{ie [\Lambda(\mathbf{r}) - \Lambda(\mathbf{r}')] / \hbar\}, \quad (3.52)$$

где

$$\Lambda(\mathbf{r}) = -yB_x d = -yBd \sin \theta. \quad (3.53)$$

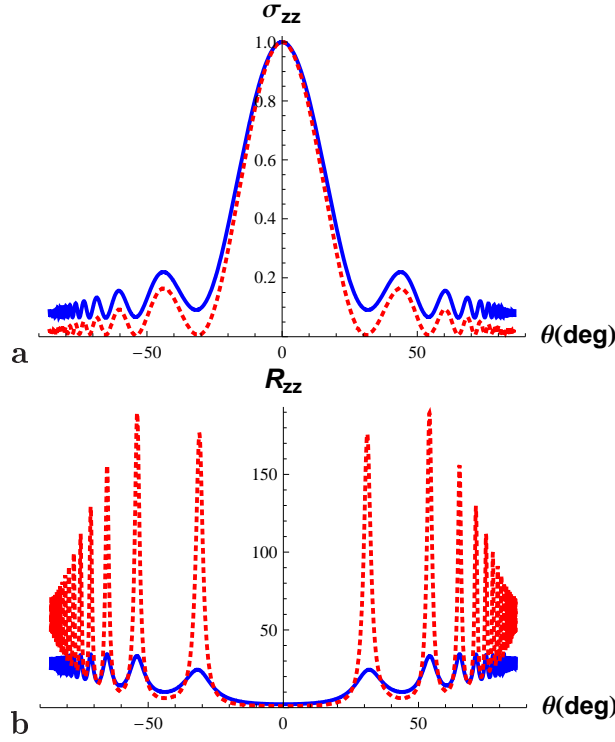


Рисунок 3.8: То же, что и на Рис. 3.7, но при более сильном магнитном поле $B = 15T$, соответствующем $\omega_c\tau \approx 8.7$.

Подставляя Ур. (3.52) и $\text{Im}G_R = (G_R - G_A)/2$ в Ур. (3.51) мы получаем

$$\Pi \equiv 4\text{Im}G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', j, \varepsilon)\text{Im}G_R(\mathbf{r}', \mathbf{r}, j+1, \varepsilon) \quad (3.54)$$

$$= 2G_A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', j, \varepsilon)G_R(\mathbf{r}', \mathbf{r}, j, \varepsilon) \cos \left\{ e \left[\Lambda(\mathbf{r}) - \Lambda(\mathbf{r}') \right] / \hbar \right\} - \quad (3.55)$$

$$- 2\text{Re} \left[G_R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', j, \varepsilon)G_R(\mathbf{r}', \mathbf{r}, j, \varepsilon) \exp \left\{ -ie \left[\Lambda(\mathbf{r}) - \Lambda(\mathbf{r}') \right] / \hbar \right\} \right],$$

и

$$\sigma_{zz} = \frac{4e^2 t_z^2 d}{\hbar} \int d^2\mathbf{r} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} [-n'_F(\varepsilon)] \times \quad (3.56)$$

$$\times \left\{ |\langle G_R(\mathbf{r}, \varepsilon) \rangle|^2 \cos \left(\frac{eByd}{\hbar} \sin \theta \right) - \text{Re} \left[\langle G_R(\mathbf{r}, \varepsilon) \rangle^2 \exp \left(\frac{ieByd}{\hbar} \sin \theta \right) \right] \right\}.$$

Выражение в третьей строчке Ур. (3.56) отсутствует в Ур. (50) статьи [57]. Однако, как показано в работе [183], этот член изменяет лишь квантовые осцилляции, но не монотонную часть магнитосопротивления.

Чтобы было применимо одноэлектронное приближение, мы по-прежнему предполагаем квазиклассический предел, когда заполнено много уровней Ландау (УЛ). Функция Грина электронов в приближении без пересечения примесных линий точечных примесей (см. Приложение А.1) имеет вид Ур. (1.10) и (1.11) с собственно-энергетической частью $\Sigma(\varepsilon)$, не зависящей от k_y . Предположим, что даже в сильном поле сохраняется лоренцевская форма уровней Ландау. Это вообще говоря не верно [72, 73, 75, 80, 77, 78, 79, 81, 82, 84, 83, 48, 183], но приводит лишь к количественным, а не качественным различиям в угловой зависимости магнитосопротивления [183]. Тогда собственно-энергетическая часть $\Sigma(\varepsilon)$ в функции Грина (1.11) также не зависит от энергии ε . В сильно-анизотропных квазидвумерных металлах на УЛ величина $\Sigma(\varepsilon)$ растет с ростом магнитного поля согласно Ур. (1.26), (1.41) или (1.60). В сильном поле на УЛ

$$|\text{Im} \Sigma(B_z)| \equiv \Gamma_B \approx \sqrt{4\hbar\omega_c\Gamma_0/\pi} \propto \sqrt{B_z}. \quad (3.57)$$

Выражение (3.57) верно только на УЛ и может быть совсем не верным между УЛ. Однако, поскольку основной вклад в когерентный электронный перенос просиходит от электронов на УЛ (ввиду максимума плотности состояний на УЛ), для качественного описания угловой зависимости когерентного межслоевого магнитосопротивления можно применять Ур. (3.57) при всех энергиях ε , то есть принять лоренцевскую форму УЛ с мнимой частью $\text{Im} \Sigma$ в Ур. (3.57).

Тогда, после вычислений, аналогичных проведенным в работах [57] или [183], получаем

$$\sigma_{zz} = \sigma_0(B_z) \left\{ [J_0(\kappa)]^2 + 2 \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{[J_\nu(\kappa)]^2}{1 + (\nu\omega_c\tau_B)} \right\}, \quad (3.58)$$

где $\kappa \equiv k_F d \tan \theta \equiv k_{Fc}^* \tan \theta$ то же, что и в более ранних работах [57], но $\sigma_0(B_z)$ и τ_B приобретают зависимость от межслоевой компоненты магнитного поля B_z . Так, вместо Ур. (1.16) получаем

$$\sigma_0(B_z) = \sigma_0\Gamma_0/|\text{Im} \Sigma(B_z)| = \sigma_0\tau_B/\tau_0, \quad (3.59)$$

где σ_0 дано в Ур. (1.16) и

$$\tau_B = \tau_B(B_z) = \hbar/2|\text{Im} \Sigma(B_z)| = \tau_0(\Gamma_0/\Gamma_B). \quad (3.60)$$

В сильном магнитном поле $\omega_c\tau \gg 1$ и при $t_z < \Gamma_B$, согласно Ур. (3.59) и (3.60)

$$\sigma_0(B_z) \propto \tau_B \propto 1/\sqrt{B \cos \theta}. \quad (3.61)$$

Сравнение новых формул (3.58)-(3.61) со старым результатом (2) изображено на Рис. 3.7 и 3.8.

Еще раз напомним, что Ур. (3.58)-(3.61) и Рис. 3.7-3.8 получены в предположении лоренцевской формы уровней Ландау (УЛ) даже в сильном магнитном поле, что вообще говоря не верно. Более точный расчет микроскопический, проведенный в работе [183] при разных формах УЛ показывает, что от формы УЛ зависит только амплитуда угловых осцилляций магнитосопротивления, а перенормировка $\sigma_0(B_z)$ в Ур. (3.59) остается в силе. Эта перенормировка существенно меняет вид угловой зависимости магнитосопротивления. В частности, она меняет отношение $\sigma_{zz}(\theta = 90^\circ)/\sigma_{zz}(\theta = 0)$, как видно из Рис. 3.7 и 3.8. Таким образом, рассмотренный в главе 1 монотонный рост межслоевого продольного магитосопротивления существенно влияет также на угловую зависимость магнитосопротивления.

3.3.2 Другие, "некогерентные" механизмы межслоевого электронного переноса, и их влияние на угловую и полевую зависимость магнитосопротивления

Угловая зависимость магнитосопротивления, описываемая Ур. (2), (3.17), (3.8), (3.58) и другими, рассмотренная выше, предполагала так называемый "когерентный" межслоевой перескок электронов, описываемый Ур. (1.4) и сохраняющий их волновую функцию и импульс вдоль проводящей плоскости. Иногда такой межслоевой перенос называют "зонным", поскольку он приводит к образованию зоны конечной ширины $4t_z$ в законе дисперсии электронов в Ур. (1). Однако, возможны и другие механизмы межслоевого переноса, не сохраняющие импульс электронов вдоль проводящих слоев и не описываемые Гамильтонианом в Ур. (1.4). Например, межслоевое туннелирование с поглощением или излучением фононов (или других возбуждений), особенно если электроны успевают "одеться" поляронами [54, 55]. Также была предложена прыжковая межслоевая проводимость между локализованными электронными состояниями на разных слоях [50]. Рассматривался также электронный перенос по резонансным примесям [49, 52]. Обычно эти некогерентные механизмы межслоевого переноса слабее зонного. Однако, в сильно анизотропных проводниках с малым t_z , когда зонный механизм также слаб, такие некогерентные механизмы могут оказаться существенными и заметно изменить угловую зависимость магнитосопротивления. В этом разделе мы кратко рассмотрим некоторые из этих механизмов межслоевого электронного переноса и их влияние на угловую и полевую зависимость магнитосопротивления.

Обычно, для описания нескольких механизмов проводимости используют так

называемую "двухканальную" модель, в которой полная межслоевая проводимость есть сумма когерентной (зонной) и некогерентной составляющих:

$$\sigma(\mathbf{B}, \tau) = \sigma_c(\mathbf{B}, \tau) + \sigma_i(B_z, \tau). \quad (3.62)$$

Первый член – это когерентная составляющая, угловая зависимость которой может быть описана изложенной выше теорией. В сильном магнитном поле, параллельном проводящим слоям, эта составляющая проводимости может уменьшаться степенным образом: $\sigma_c(\mathbf{B}, \tau) \propto (\omega_c \tau)^\alpha$ с $1 \leq \alpha \leq 2$. Некогерентная составляющая межслоевой проводимости $\sigma_i(B_\perp, \tau)$ обычно слабее зависит (или вообще не зависит) от компоненты магнитного поля, параллельной слоям. Поэтому, в сильном магнитном поле, параллельном слоям, второй член в Ур. (3.62) может стать главным. Заметим, что некогерентные механизмы межслоевой проводимости могут сильно зависеть от компоненты B_z магнитного поля, перпендикулярной слоям.

Межслоевой перенос электронов через резонансные примеси и другие локальные кристаллические дефекты

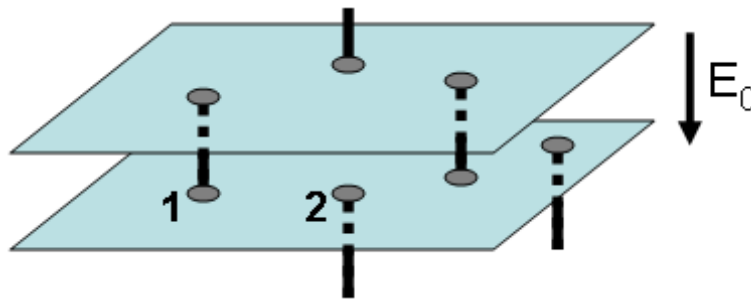


Рисунок 3.9: Схематическое изображение слоистого металла с резонансными примесями (или другими кристаллическими дефектами, локально помогающими межслоевому перескоку), изображенными соединительными черными линиями между слоями. После межслоевого прыжка по резонансной примеси 1 электрон диффундирует вдоль слоя до ближайшей резонансной примеси 2 между следующими проводящими слоями.

Одним из достаточно распространенных некогерентных механизмов переноса электронов является перенос через резонансные примеси и другие кристаллические дефекты [49]. Резонансные примеси – это такие примеси, которые создают электронный примесный дискретный локализованный уровень, расположенный вблизи энергии

Ферми. Если такие примеси расположены между проводящими слоями, то межслоевое туннелирование электронов через промежуточное состояние на этом примесном уровне имеет намного большую вероятность, чем прямое межслоевое туннелирование в случае малого интеграла перескока t_z . Модель переноса через одиночную резонансную примесь была рассмотрена в работе [49], а туннелирование через зону, образованную резонансными примесными уровнями было рассмотрено в работе [52].

Следуя изложению в статье [46] (№ 13 в списке публикаций диссертанта), рассмотрим случай редких изолированных резонансных примесей или других дефектов, локально помогающих межслоевому туннелированию электронов. Также предположим, что радиус локализации волновой функции электрона на примесном резонансном уровне мал по сравнению с магнитной длиной или с длиной свободного пробега электронов в проводящих слоях. Это соответствует физической картине резонансных примесей. Тогда вместо Ур. (1.4), соответствующего когерентному переносу, туннелирование электронов между соседними проводящими слоями описывает другой член в гамильтониане:

$$\hat{H}_{tImp} = t_{zImp} \sum_{j,i} [\Psi_j^\dagger(\mathbf{r}_i) \Psi_{j-1}(\mathbf{r}_i) + \Psi_{j-1}^\dagger(\mathbf{r}_i) \Psi_j(\mathbf{r}_i)], \quad (3.63)$$

где $\Psi_j(\mathbf{r})$ и $\Psi_j^\dagger(\mathbf{r})$ – операторы рождения (уничтожения) электронов на слое j в точке \mathbf{r} двумерного координатного пространства, а суммирование идет как по слоям j , так и по резонансным примесям i на этом слое.

Концентрация n_R резонансных примесей (или других кристаллических дефектов, локально помогающих межслоевому переносу) предполагается много меньшей концентрации обычных примесей n_i , а среднее расстояние между резонансными примесями на одном слое $l_i = (n_i d)^{-1/2}$ больше длины свободного пробега $l_\tau = \tau v_F$ в слое. Поэтому, если межслоевой перенос электронов по резонансным примесям является определяющим, то после каждого межслоевого прыжка через резонансную примесь электроны должны двигаться вдоль слоя ”в поисках” другой резонансной примеси для следующего межслоевого прыжка. Такое зацепление межслоевого и внутрислоевого электронного переноса приводит к необычной угловой зависимости магнитосопротивления. В рамках такой модели, электрическое сопротивление через каждую резонансную примесь состоит из двух последовательных элементов:

$$R_\perp = R_{hc} + R_\parallel. \quad (3.64)$$

Первый член, R_{hc} , есть сопротивление самого туннелирования через резонансную примесь, которое практически не зависит от магнитного поля и имеет слабую неметаллическую

температурную зависимость $R_{\text{hc}}(T)$. Второй член, R_{\parallel} , есть сопротивление вдоль проводящего слоя, которое возникает из-за того, что электрону нужно диффундировать вдоль слоя на расстояние порядка $l_i = (n_i d)^{-1/2}$ чтобы рассеять заряд и найти новую резонансную примесь. Мы рассматриваем предел хорошей металлической проводимости вдоль слоев, когда эффектами кулоновской блокады при межслоевом туннелировании [88] можно пренебречь. В пределе $l_i \gg l_{\tau}$, двумерная плотность тока $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ в каждой точке пропорциональна электрическому полю $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ в этой точке: $\mathbf{j} = \sigma_{\parallel} d \mathbf{E}$, где для простоты мы предполагаем изотропную проводимость σ_{\parallel} вдоль слоев.

Стационарный ток вдоль слоев удовлетворяет уравнению: $\text{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$ везде кроме точек межслоевого перескока, соответствующих положениям резонансных примесей. Вблизи каждой такой точки межслоевого переноса, электрический ток почти аксиально симметричен и дается выражением

$$\mathbf{E}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)}{\sigma_{\parallel} d} = \frac{I_0}{2\pi\sigma_{\parallel} d} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^2}, \quad (3.65)$$

где I_0 – полный ток через точку межслоевого переноса \mathbf{r}_i . R_{\parallel} приближенно определяется средним падением напряжения между двумя последовательными резонансными примесями (точками межслоевого перескока):

$$I_0 R_{\parallel}(T) \simeq 2 \int_{l_{\tau}}^{l_i} \mathbf{E}(r) dr = \frac{I_0 \ln(l_i/l_{\tau})}{\pi\sigma_{\parallel} d}. \quad (3.66)$$

В качестве нижней обрезки в интеграле (3.66) мы взяли длину свободного пробега l_{τ} , тем самым пренебрегли сопротивлением в баллистической области $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| < l_{\tau}$. Поскольку баллистическая проводимость намного меньше диффузионной, такое приближение надежно работает, по крайней мере при $\ln(l_i/l_{\tau}) \gtrsim \ln(l_{\tau}/d)$.

Среднее падение напряжения между двумя проводящими слоями $E_0 d = I_0 (R_{\text{hc}} + R_{\parallel})$, где E_0 – внешнее электрическое поле, перпендикулярное слоям. Полная плотность электрического тока перпендикулярно слоям $j_t = I_0 n_i d = \sigma_i E_0$, что с учетом Ур. (3.66) дает межслоевую проводимость в виде:

$$\sigma_i = \frac{\pi\sigma_{\parallel} n_i d^3}{\pi d \sigma_{\parallel} R_{\text{hc}} + \ln(l_i/l_{\tau})}. \quad (3.67)$$

Эту простую модель можно легко обобщить, включив распределение точек межслоевого перескока $n[R_{\text{hc}}(T)]$ и выполнив интегрирование по $R_{\text{hc}}(T)$. Результат, конечно, будет зависеть от конкретной модели прыжковых центров (точек межслоевого перескока). В тривиальном случае локальных межслоевых электрических закороток,

то есть при $R_{hc} \ll R_{\parallel}$, получим $\sigma_i \propto \sigma_{\parallel}$. В любом случае, Ур. (3.67) зацепляет межслоевую и внутрислоевую проводимости. Последняя сильно зависит от магнитного поля, перпендикулярного слоям: $\sigma_{\parallel}(B_z) \approx \sigma_{\parallel}(B_z = 0)/[1 + (\omega_c\tau)^2]$. Поэтому в рамках нашей модели, мы получаем сильное продольное межслоевое магнитосопротивление, достигающее квадратичной зависимости $R_{zz}(B_z) \propto B_z^2$ в пределе $R_{hc} \ll R_{\parallel}$. При этом компонента магнитного поля вдоль слоев не влияет на межслоевую проводимость, в отличие от предсказаний стандартной модели когерентного межслоевого переноса.

Предложенная простая модель хорошо описывает экспериментальные данные в некоторых слоистых органических металлах, обладающих сильной анизотропией (малым t_z) и некоторым кристаллическим беспорядком.

На Рис. 3.10 изображена экспериментальная угловая зависимость двух образцов органического металла α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄, измеренная при температуре $T = 1.4$ К при различных магнитных полях: $B = 0.12, 0.5, 3$, и 15 Т. Электрический ток прикладывался в направлении, перпендикулярном проводящим ac слоям. Азимутальный угол $\varphi \approx 20^\circ$ между проекцией поля на плоскость ac и осью a , перпендикулярной открытым листам поверхности Ферми. Осцилляционное поведение, особенно выраженное в сильных полях, происходит из-за угловых и шубниковских осцилляций магнитосопротивления [6]. Такое осцилляционное поведение указывает на высокое качество исследуемых монокристаллов α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄ и дает оценку времени рассеяния $\tau_1 \approx \tau_2/3 \sim 5$ ps для образцов # 1 и # 2, соответственно. Для сравнения с вышеизложенной теорией нас будет интересовать неосциллирующая (фоновая) часть магнитосопротивления.

Кривые в слабом магнитном поле на Рис. 3.10 похожи для обоих образцов: магнитосопротивление максимально для поля вдоль слоев, и минимально для поля, перпендикулярного проводящим слоям. При поле ~ 1 Т, широкий минимум при $\theta = \pm 90^\circ$ начинает появляться в образце #1. Уже при $B = 3$ Т магнитосопротивление этого образца имеет абсолютный минимум при поле вдоль проводящих слоев (и перпендикулярного току!), что противоречит стандартной теории когерентного (зонного) электронного переноса. Этот кроссовер в межслоевом магнитосопротивлении очень напоминает уже наблюдаемый ранее кроссовер в другом органическом металле (TMTSF)₂PF₆ [184].

Заметим, что геометрия эксперимента не согласуется со сценарием локализации, индуцированной магнитным полем и предложенной в статье [185]. Сравнение угловой зависимости двух образцов, показанное на Рис. 3.10, обнаруживает еще одно расхождение с моделью локализации, индуцированной магнитным полем [185]. В то время, как поле

локализации B_c в этой модели не зависит от времени свободного пробега τ , эта модель предполагает достаточно большое τ , при котором выполнен критерий $\omega_c\tau > 1$. Поэтому, этот эффект ожидается сильнее в чистых образцах. В нашем эксперименте, напротив, кроссовер наблюдается в относительно грязном образце # 1, в то время как более чистый образец # 2 сохраняет обычную металлическую анизотропию вплоть до самых сильных полей.

В то же время, предложенная выше модель электронного переноса по резонансным примесям с последующим растеканием заряда вдоль проводящих слоев очень хорошо объясняет все наблюдаемые качественные черты угловой зависимости магнитосопротивления в образце # 1: сильную (почти квадратичную) зависимость межслоевого магнитосопротивления R_{zz} от компоненты поля B_z вдоль электрического тока (перпендикулярной слоям) и очень слабую (и только в слабых полях) зависимость R_{zz} от компоненты поля B_{\parallel} вдоль слоев. Все эти особенности наблюдаются в более грязном образце. Это также согласуется с предсказанием вышеизложенной модели, что некогерентный механизм межслоевого переноса оказывается наиболее сильным в более грязном образце, где слабее зонная проводимость и ожидается выше концентрация дефектов, помогающих локальным межслоевым электронным перескокам. Также важно, что при всех необычных чертах в угловой зависимости магнитосопротивления, сохраняется металлическая температурная зависимость межслоевого сопротивления (см. вставку на Рис. 3.11).

В качестве дополнительного экспериментального подтверждения двух каналов межслоевого электронного переноса, выраженных Ур. (3.62), можно взять зависимость межслоевой проводимости образца # 1 от компоненты магнитного поля вдоль проводящих слоев и ее изменение с температурой. Соответствующие экспериментальные данные изображены на Рис. 3.11 в виде колеровского графика. На этом графике $R_0(T)$ – сопротивление в отсутствие магнитного поля (см. вставку), а нормированная межслоевая проводимость $\sigma(B, T)/\sigma(0, T)$ получена из измерений $R_{zz}(B)$ на основе соотношения $\sigma_{zz}(B) \propto 1/R_{zz}(B)$ в квазидвумерных металлах. Согласно колеровскому правилу[1] (полуфеноменологическому и микроскопически выведенному только для нормальных металлов), магнитосопротивление должно быть функцией только $B/R_0(T)$, то есть функцией только $\omega_c\tau$ с учетом Ур. (1.16). Это правило нарушается на Рис. 3.11: кривые, соответствующие разным температурам совсем не совпадают. С другой стороны, все кривые (по крайней мере, в металлическом состоянии при температурах от 1.4 до 10 К) стремятся к насыщению при одном и том же значении аргумента

B/R_0 . Величина проводимости насыщения соответствует неметаллическому (незонному) каналу межслоевой проводимости $\sigma_i(\mathbf{B}, \tau)$. Если из полной проводимости вычесть этот "некогерентный" вклад $\sigma_i(\mathbf{B}, \tau)$, то оставшаяся часть $\sigma_c(\mathbf{B}, \tau)$ очень хорошо удовлетворяет колеровскому правилу для зонной "когерентной" проводимости (см. Рис. 3.12), что еще раз экспериментально подтверждает двухканальную модель.

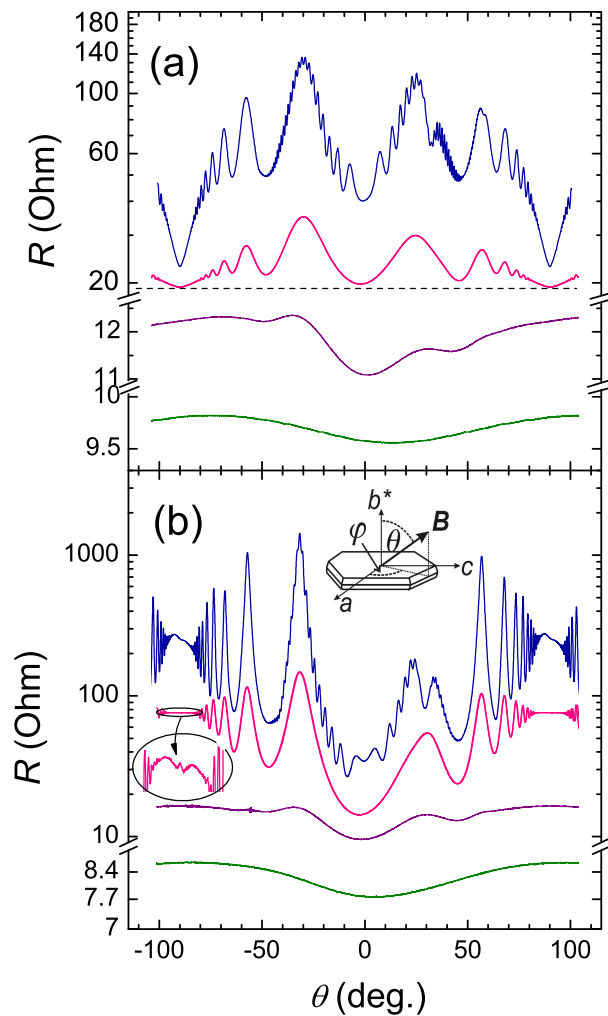


Рисунок 3.10: Угловая зависимость межслоевого магнитосопротивления в органическом металле α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄ под давлением ≈ 6 кбар (чтобы подавить волну зарядовой плотности) при температуре $T = 1.4$ К в магнитных полях (снизу вверх): 0.12, 0.5, 3, и 15 Т; азимутальный угол $\varphi \approx 20^\circ$. Рис. (а) соответствует более грязному образцу # 1, а Рис. (b) соответствует чистому образцу # 2. Верхняя вставка на Рис. (b) иллюстрирует определения углов θ и φ ; нижняя вставка дает увеличенный фрагмент кривой при 3 Т и $\theta \approx 90^\circ$, показывающий маленький ”пик когерентности”.

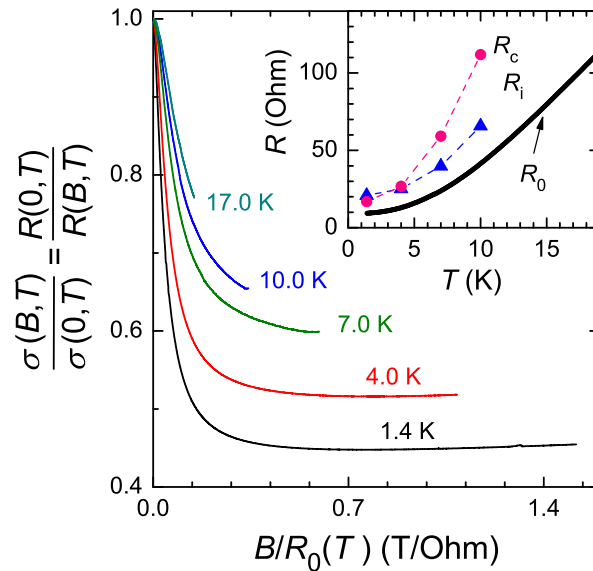


Рисунок 3.11: Колеровский график: нормированная межслоевая проводимость $\sigma(B, T)/\sigma(0, T)$ в органическом металле $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$ в металлическом состоянии (под давлением ≈ 6 кбар, чтобы подавить волну зарядовой плотности) при различных температурах как функция $B/R_0(T)$. На вставке отложена температурная зависимость электрического сопротивления R_0 (сплошная линия), сопротивления "когерентного" $R_c \propto 1/\sigma_c$, (кружки) и "некогерентного" $R_i \propto 1/\sigma_i$, (треугольники) каналов в отсутствие магнитного поля.

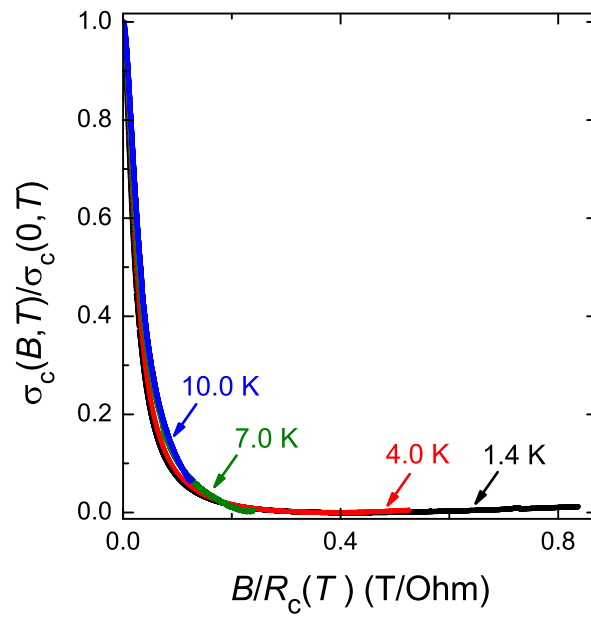


Рисунок 3.12: Колеровский график: нормированная межслоевая проводимость "когерентного" канала $\sigma_c(B, T)/\sigma_c(0, T)$ в органическом металле α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄ при различных температурах как функция $B/R_0(T)$.

Глава 4

Магнитосопротивление в присутствии волны зарядовой/спиновой плотности

4.1 Введение

Квазидвумерные системы с сильными электронными корреляциями проявляют большое разнообразие свойств из-за сильного взаимодействия и конкуренции между зарядовыми, спиновыми, орбитальными и решеточными степенями свободы. Частым проявлением таких состояний является формирование однонаправленной модуляции заряда или спина, называемой волной зарядовой или спиновой плотности (ВЗП или ВСП) соответственно [34, 35, 36]. Такие состояния активно изучаются в манганитах [246], органических проводниках [247], купратных высокотемпературных сверхпроводниках [248, 249] и других соединениях. В литературе сейчас активно изучается вопрос о влиянии волны плотности на высокотемпературную сверхпроводимость.

Согласно сложившейся терминологии [34], ниже под волной зарядовой или спиновой плотности мы будем подразумевать только модуляцию электронов проводимости, а не локализованных на атомах электронных состояний (или их спиновых степеней свободы). Теме волн плотности (зарядовой или спиновой) посвящено большое число обзоров и монографий (см., например, [34, 36]). Волна плотности (зарядовой или спиновой) возникает из-за Пайерлсовской неустойчивости Ферми-газа электронов к спонтанному образованию конденсата электрон-дырочных пар при определенном волновом векторе Q при сколь угодно слабом модулированном возмущении. В качестве такого возмущения, обычно, служит электрон-электронное (e-e) или электрон-фононное взаимодействие. Волновой вектор Пайерлсовской неустойчивости обычно (но не всегда [186]) связан

со свойством нестинга (вложения) поверхности Ферми (ПФ), при котором одна существенная часть ПФ приблизительно совпадает с другой частью после смещения на постоянный волновой вектор Q . Если нестинг покрывает всю ПФ (например, как в неорганических почти одномерных проводниках $\text{TaS}_3, \text{K}_{0.3}\text{MoO}_3, (\text{TaSe}_4)_2\text{I}$), то при переходе в волну плотности металл становится диэлектриком. Такой переход в волну плотности будем называть полным. Если не вся ПФ удовлетворяет условию нестинга (наиболее распространенная ситуация, например, возникающая в NbSe_3 , в трителлуридах редкоземельных металлов, в органических металлах и во многих других соединениях), то при переходе в волну плотности металлическая проводимость сохраняется, но уменьшается, поскольку уменьшается плотность состояний на уровне Ферми. Такой переход в волну плотности будем называть неполным, или частичным. При понижении температуры очень многие анизотропные проводники претерпевают такой переход второго рода с образованием волны плотности [34, 36], причем температура такого перехода в волну плотности меняется в очень широких пределах: от сверхнизких температур до температур, существенно выше комнатной.

Волна плотности сопровождается нарушением симметрии относительно сдвигов в пространстве и образованием параметра порядка, пропорционального среднему числу электрон-дырочных пар с общим импульсом Q . Обычно, для описания перехода в волну плотности используют приближение среднего поля.

Рассмотрим металл с электрон-электронным взаимодействием. Исходный Гамильтониан состоит из двух членов:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}, \quad (4.1)$$

где первый член

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\alpha}(\mathbf{k}) \quad (4.2)$$

описывает невзаимодействующие электроны с законом дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$, $a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k})$ и $a_{\alpha}(\mathbf{k})$ описывают операторы рождения и уничтожения частиц с импульсом \mathbf{k} , а электрон-электронное взаимодействие задано вторым членом

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{Q}} V_{\alpha\beta\gamma\delta}(\mathbf{Q}) a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) a_{\beta}(\mathbf{k}) a_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{k}' - \mathbf{Q}) a_{\delta}(\mathbf{k}'). \quad (4.3)$$

Здесь и ниже предполагается суммирование по повторяющимся спиновым индексам. Потенциал взаимодействия двух электронов описывается зависящей от спиновых индексов и от передачи импульса Q функцией $V_{\alpha\beta\gamma\delta}(\mathbf{Q})$, которую можно разделить на два члена:

$$V_{\alpha\beta\gamma\delta}(\mathbf{Q}) = U_c(\mathbf{Q}) I_{\alpha\beta} I_{\gamma\delta} - U_s(\mathbf{Q}) \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \vec{\sigma}_{\gamma\delta}, \quad (4.4)$$

где $\vec{\sigma}_{\alpha\beta}$ – матрицы Паули, $I_{\alpha\beta}$ единичная матрица 2×2 по спиновым индексам. Гамильтониан (4.3), (4.4) может быть получен из расширенной модели Хаббарда. Для образования волны плотности с волновым вектором \mathbf{Q}_0 , важно только значение этой функции при $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0$. Значения $U_c(\mathbf{Q}_0)$ и $U_s(\mathbf{Q}_0)$ в литературе называются константами зарядового и спинового взаимодействия. В зависимости от их отношения $U_c(\mathbf{Q}_0)/U_s(\mathbf{Q}_0)$, в электронной системе образуется волна зарядовой или спиновой плотности. Чаще всего $U_c(\mathbf{Q}_0) > U_s(\mathbf{Q}_0)$, и выигрывает (то есть раньше образуется и энергетически более выгодна) волна зарядовой плотности. Заметим, что взаимодействие при $\mathbf{Q} = 0$ в (4.3) лишь перенормирует химический потенциал (при заданной плотности частиц) и может быть исключено из последующих вычислений, где все суммы по \mathbf{Q} не включают $\mathbf{Q} = 0$).

Исходный Гамильтониан взаимодействия (4.3) можно переписать в виде

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{Q}\mathbf{k}} a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) a_{\beta}(\mathbf{k}) \hat{\Delta}_{\mathbf{Q}\alpha\beta}, \quad (4.5)$$

где введен параметр порядка (пока еще оператор)

$$\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}\alpha\beta} \equiv \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{Q}} V_{\alpha\beta\gamma\delta}(\mathbf{Q}) a_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{k}' - \mathbf{Q}) a_{\delta}(\mathbf{k}'). \quad (4.6)$$

В приближении среднего поля делаются три приближения: (1) оператор в Ур. (4.6) считается ненулевым только при определенном векторах $\mathbf{Q} = \pm\mathbf{Q}_0$, соответствующих вектору волны плотности, причем в силу эрмитовости Гамильтониана $\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}_0\alpha\beta} = \hat{\Delta}_{-\mathbf{Q}_0\alpha\beta}^{\dagger}$; (2) из двух констант взаимодействия, зарядовой $U_c(\mathbf{Q}_0)$ и спиновой $U_s(\mathbf{Q}_0)$, выбирается наибольшая (та, которая раньше приводит к образованию волны плотности), а второй константой взаимодействия пренебрегают; (3) при $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0$ оператор в Ур. (4.6) заменяется на его среднее значение, остающееся оператором (матрицей) только по спиновым индексам:

$$\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}_0\alpha\beta} \equiv \hat{\Delta}_{\alpha\beta} \approx \sum_{\mathbf{k}'} V_{\alpha\beta\gamma\delta}(\mathbf{Q}_0) \langle a_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{k}' - \mathbf{Q}_0) a_{\delta}(\mathbf{k}') \rangle. \quad (4.7)$$

В Ур. (4.7) параметр порядка $\hat{\Delta}_{\alpha\beta}$ является просто функцией, зависящей от спиновых индексов α и β . В общем случае, функция $\hat{\Delta}_{\alpha\beta}$ может также зависеть от импульса электрона \mathbf{k} : $\hat{\Delta}_{\alpha\beta} = \hat{\Delta}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$. В приближении среднего поля Ур. (4.5) принимает вид

$$\hat{H}_{\text{int MF}} \approx \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}_0) a_{\beta}(\mathbf{k}) \hat{\Delta}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) + a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0) a_{\beta}(\mathbf{k}) \hat{\Delta}_{\alpha\beta}^{\dagger}(\mathbf{k}) \right], \quad (4.8)$$

Тогда Гамильтониан, описываемый Ур. (4.1), (4.2) и (4.8) является квадратичным по операторам рождения и уничтожения частиц, а значит, легко диагонализуемым. В

результате получается Гамильтониан (4.2) с новым законом дисперсии. Для простоты в этом разделе мы будем рассматривать волну зарядовой плотности, у которой параметр порядка не зависит от спиновых индексов: $\hat{\Delta}_{\alpha\beta} = \hat{\Delta}$. Тогда в приближении среднего поля Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}_{MF} = \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\alpha}(\mathbf{k}) \quad (4.9)$$

где новый закон дисперсии дается формулой

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = [\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0)] / 2 \pm \sqrt{[\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0)]^2 / 4 + \Delta^2(T, \mathbf{k})}. \quad (4.10)$$

Если первый так называемый "антинестинговый" член $[\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0)] / 2 < |\Delta(T, \mathbf{k})|$ при всех \mathbf{k} на поверхности Ферми, то бесщелевых состояний нет, и плотность состояний на уровне Ферми равна нулю, а металл становится диэлектриком (или полупроводником, поскольку обычно величина энергетической щели $|\Delta(T, \mathbf{k})|$ меньше, чем у зонных диэлектриков). Если $[\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0)] / 2 > |\Delta(T, \mathbf{k})|$ при некоторых \mathbf{k} на поверхности Ферми, то плотность состояний на уровне Ферми остается конечной и металлическая проводимость сохраняется. Однако, новый закон дисперсии в Ур. (4.10) может очень сильно отличаться от исходного $\varepsilon(\mathbf{k})$, в том числе и топологией поверхности Ферми. Приближение среднего поля, несмотря на очень сильное упрощение исходного Гамильтониана, хорошо работает вдали от точки перехода в волну плотности, когда среднее значения параметра порядка много больше его флуктуаций.

Ур. (4.7)-(4.10) предполагают параметр порядка пространственно однородным. Это не всегда выполняется, и иногда параметр порядка имеет дополнительную медленную зависимость от координаты вдоль вектора \mathbf{Q}_0 на масштабах порядка длины когерентности $\xi = \pi \hbar v_F / \Delta \gg 1 / Q_0$. Например, такая модуляция параметра порядка возникает в волне зарядовой плотности в сильном магнитном поле \mathbf{B} из-за Зеемановского расщепления $\pm \mu_B B$, которое разделяет вектор нестинга \mathbf{Q}_0 для электронов с разными компонентами спина вдоль магнитного поля на величину $\approx 2 \mu_B B / v_F$, аналогично известной фазе Ларкина-Овчинникова-Фульде-Феррелла (ЛОФФ) в сверхпроводимости [192, 193] (см. также краткое изложение в учебниках [1] или недавний обзор [194]). Причем в отличие от ЛОФФ фазы, неоднородная волна зарядовой плотности подробно исследована экспериментально в органических металлах и других соединениях. Подробнее такое состояние ВЗП будет исследовано в разделе 4.2.

Однако, неоднородная волна плотности может возникнуть даже без магнитного поля в случае неидеального нестинга при некоторых свойствах исходного закона дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$ (см. обзоры [37, 38, 200] и Приложение Д.1). Изначально такое состояние было

предложено для чисто одномерных соединений и называлось солитонной фазой [37, 38], поскольку параметр порядка в этой фазе меняет знак в некоторой области масштаба длины когерентности ξ , проходя через ноль подобно солитонным решениям нелинейных уравнений, и постоянен и равен по модулю Δ_0 вне таких областей (вне солитонов). Такая солитонная фаза соответствует экспериментальным наблюдениям не только в чисто одномерных соединениях, но и в целом ряде органических металлов. В каждом солитоне имеется одно электронное состояние на цепочку на уровне Ферми, поэтому в солитонной фазе сохраняется металлическая проводимость. Однако, закон дисперсии в солитонной фазе очень сильно отличается от исходного или от описываемого Ур. (4.10) для однородной волны плотности в приближении среднего поля. Подробнее такое состояние будет исследовано в разделе 4.3.

В этой главе мы будем исследовать свойства различных микроскопических состояний с частичной волной плотности. Особенное внимание будет уделено особенностям фазовой диаграммы и электронной проводимости и магнитосопротивления в таких состояниях. В частности, мы исследуем, какую информацию о микроскопической структуре волны плотности можно извлечь из экспериментальных данных по электронной проводимости и магнитосопротивлению. Результаты этой главы соответствуют статьям № 14-19 в списке публикаций диссертанта.

4.2 Фазовая диаграмма и микроскопическая структура волны зарядовой плотности (ВЗП) в магнитном поле

4.2.1 Введение

Теоретическое описание волн плотности в рамках приближения среднего поля чаще всего использует следующие два подхода. Первый основан на разложении Гинзбурга-Ландау по степеням параметра порядка Δ . Причем для многих задач достаточно вычислить электронную восприимчивость, определяющую неустойчивость электронной системы к образованию волн плотности.¹ Это самое простое теоретическое описание волн плотности, позволяющее включить различные дополнительные факторы в рассмотрение, такие как тонкие особенности закона дисперсии электронов, эффекты внешнего давления, спиновый

¹Это соответствует разложению до квадратичных членов в функционале Гинзбурга-Ландау.

и орбитальный эффекты магнитного поля, и др. Этот подход помог открыть и объяснить многие интересные явления, такие как индуцированную магнитным полем волну спиновой плотности (FISDW) [202, 203, 204, 205], увеличение температуры перехода в волну плотности из-за одномеризации электронного спектра в сильном магнитном поле [202, 207], ВЗП со смещенным вектором нестинга в сильном магнитном поле [203, 208], уменьшение температуры перехода в волну плотности при увеличении внешнего давления [208] и др. Однако, все эти результаты не могут быть продолжены ниже температуры перехода в волну плотности, поскольку они основаны на вычислении электронной восприимчивости в металлическом состоянии. В частности, расчеты в статье [208] предсказывают появление ВЗП со смещенным вектором (так называемой CDW_x (или по-русски ВЗП_x) фазы), когда магнитное поле превышает некоторое критическое значение. Это вычисление может дать полевую зависимость температуры перехода $T_c(H)$ из металлического состояния в эту CDW_x фазу и даже соответствующий вектор ВЗП $Q_0 = q_x(H)$. Однако, это вычисление не может описать микроскопическую структуру CDW_x фазы ниже $T_c(H)$ или определить линию перехода $H_{c1}(T)$ из однородной ВЗП (часто обозначаемой CDW_0) в неоднородную фазу CDW_x , или определить род этого перехода.

Второй подход основан на решении самосогласованного уравнения на параметр порядка Δ в приближении среднего поля и включает область низких температур и ненулевого параметра порядка. Ввиду сложности и нелинейности самосогласованного уравнения на параметр порядка Δ , этот подход использует частные решения этого уравнения, применимые в некоторых упрощающих приближениях. Причем, не всегда ясно, соответствует ли предложенное решение локальному или абсолютному минимуму свободной энергии системы. Например, в статье [206] в приближении среднего поля изучалась ВЗП для идеального нестинга и только в слабом магнитном поле, когда вектор ВЗП Q_0 не смещается от своего положения в отсутствие магнитного поля. В статье [209] также изучалось частное решение уравнений самосогласования на параметр порядка в случае идеального нестинга, причем было найдено только решение с одним (смещенным) вектором ВЗП, что как мы увидим ниже не всегда соответствует абсолютному минимуму свободной энергии системы. Существенным продвижением в рамках этого подхода явились солитонные решения нелинейного самосогласованного уравнения на параметр порядка Δ (см., например, обзоры [37, 38, 200]), которые дают неоднородную волну плотности и могут описывать также упрощенный случай неидеального нестинга [198] или сильного магнитного поля [201]. Эти солитонные решения для параметра порядка ВЗП впервые были применены для описания одномерных цепочек полиэтилена [245, 244], но

впоследствии развились в целое направление описания неоднородной волны плотности [37, 38, 200], активно используемое для описания физических явлений в слоистых сильно-анизотропных органических металлах и других соединениях с квазиодномерной анизотропией. Однако, в рамках этого подхода до сих пор удалось получить некоторое описание микроскопической структуры ВЗП (и соответствующего спектра квазичастиц) в магнитном поле только при нулевой температуре и в случае идеального нестинга [201, 38]. Переход в солитонную фазу при конечной температуре изучался в работе [199]. Однако, в этой работе [199] фазовая диаграмма относится к нулевому магнитному полю и конечному сдвигу химического потенциала от его значения μ_0 , соответствующего соизмеримой ВЗП, что не эквивалентно конечному магнитному полю.

Дальнейшее теоретическое изучение ВЗП в магнитном поле необходимо для описания многочисленных экспериментов в слоистых сильно-анизотропных органических металлах [210, 211, 212, 213, 214, 215, 216, 217, 218, 219, 220, 222, 223] и в других соединениях.

В этом разделе в рамках приближения среднего поля мы теоретически исследуем микроскопическую структуру волны зарядовой плотности (ВЗП) в сильном магнитном поле, когда зеемановское расщепление больше или порядка щели ВЗП. Будет использовано разложение Гинзбурга-Ландау до членов четвертого порядка по Δ , что позволит изучать микроскопическую структуру ВЗП ниже точки перехода. В частности, в этом разделе в рамках разложения Гинзбурга-Ландау мы покажем, что модуляция параметра порядка $\propto \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})$ с одним волновым вектором \mathbf{q} (аналог фазы Фульде-Феррелла в сверхпроводимости) практически всегда менее выгодна энергетически, чем "косинудальная" модуляция $\sim \cos(\mathbf{q}\mathbf{r})$ с двумя противоположными векторами $\pm\mathbf{q}$ (аналог фазы Ларкина-Овчинникова в сверхпроводимости). Причем при понижении температуры косинусоидальная модуляция ВЗП непрерывно (без фазовых переходов) переходит в солитонную фазу через увеличение старших гармоник по $2\mathbf{q}$, полученную при нулевой температуре и идеальном нестинге в работе [201]. Эта ситуация аналогична неоднородной сверхпроводимости [194], где модуляция параметра порядка с одним волновым вектором (фаза Фульде-Феррелла) энергетически не выгодна [195, 196] по сравнению с косинусоидальной модуляцией (фазой Ларкина-Овчинникова), которая также непрерывно переходит в солитонную фазу [224]. Изложение этого раздела соответствует статье № 14 в списке публикаций диссертанта.

4.2.2 Модель

Обычно, волны зарядовой/спиновой плотности возникают в сильно-анизотропных металлах (например, органических проводниках [191]) с квази-одномерным законом дисперсии носителей заряда:

$$\varepsilon_\sigma(\mathbf{k}) = \hbar v_F(|k_x| - k_F) - t_\perp(\mathbf{k}_\perp) - \sigma H, \quad (4.11)$$

где v_F и k_F скорость и импульс Ферми в направлении легкой оси (цепочек, или x -направлении), $H \equiv \mu_B B$ – Зеемановское расщепление энергии, μ_B – магнетон Бора и B – внешнее магнитное поле. Перпендикулярный к цепочкам член в законе дисперсии в приближении сильной связи может быть разложен в ряд, ограниченный первыми членами:

$$t_\perp(\mathbf{k}_\perp) = -2t_b \cos(k_y b) - 2t'_b \cos(2k_y b) - 2t_c \cos(k_z c_z), \quad (4.12)$$

где b и c_z – постоянные решетки в y и z направлениях соответственно. Дисперсии вдоль оси z (в межслоевом направлении) предполагается слабее чем вдоль оси y . Поэтому мы опускаем вторую гармонику $\propto \cos(2k_z c_z)$ в законе дисперсии (4.12). Члены $2t_c \cos(k_z c_z)$ и $2t_b \cos(k_y b)$ в законе дисперсии (4.12) не нарушают условие идеального нестинга:

$$\varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{Q}_0) = -\varepsilon(\mathbf{p}) \quad (4.13)$$

при векторе нестинга

$$\mathbf{Q}_0 = (\pm 2k_F, \pi/b, \pi/c). \quad (4.14)$$

Поэтому на фазовую диаграмму ВЗП влияет только "антинестинговый" член $2t'_b \cos(2k_y b)$, который обычно возрастает при увеличении внешнего давления и может полностью подавить образование ВЗП. Орбитальные эффекты магнитного поля при этом иногда помогают образованию волны плотности [202, 203, 204, 205], хотя они обычно слабее влияния Зеемановского расщепления на волну зарядовой плотности. В этом разделе, для упрощения формул, мы будем пренебрегать этими орбитальными эффектами, что соответствует магнитному полю, направленному вдоль проводящих слоев.

Известно, что приближение среднего поля не применимо к описанию строго одномерных электронных систем, для которых часто используются точно-решаемые модели [187]. Однако, большинство материалов с волной плотности являются трехмерными металлами. Даже если у них сильная квазиодномерная анизотропия, конечный интеграл перескока между проводящими молекулярными цепочками t_\perp и трехмерный характер электрон-электронного взаимодействия и упругости решетки

уменьшают отклонения от теории среднего поля и делают не применимыми практически все одномерные точно-решаемые модели [188]. Эффекты флуктуаций в квази-одномерных проводниках и их влияние на применимость приближения среднего поля в этих материалах изучались во многих работах (см., например, [189, 190] и ссылки в них), где было показано, что межцепочечный интеграл перескока t_{\perp} сильно подавляет флуктуации и делает применимым приближение среднего поля.

Согласно приближению среднего поля (4.8), ниже нас будет интересовать электрон-электронное взаимодействие (4.3) только при волновом векторе \mathbf{Q} , близком к вектору нестинга \mathbf{Q}_0 . Отклонения $\mathbf{Q} - \mathbf{Q}_0$ будут порядка $\max\{H, t_b'\}/\hbar v_F \ll k_F$, и для таких малых отклонений \mathbf{Q} функцию взаимодействия (4.4) можно считать константой:

$$V_{\sigma\sigma'}(\mathbf{Q}) \approx V_{\sigma\sigma'}(\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0) = U_c - U_s\sigma\sigma' \quad (4.15)$$

Зарядовая и спиновая константы связи U_c и U_s те же, что и в статье [208].

Формулировка приближения среднего поля для ВЗП на языке функций Грина

Введем термодинамические функции Грина

$$g_{\sigma}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \tau - \tau') = \langle T_{\tau} \{ a_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}', \tau') a_{\sigma}(\mathbf{k}, \tau) \} \rangle, \quad (4.16)$$

где операторы рождения и уничтожения берутся в Гейзенберговском представлении, а среднее

$$D_{\mathbf{Q}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} g_{\sigma}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, -0) - \delta(\mathbf{Q}, 0) n_{\sigma}. \quad (4.17)$$

Введя определение

$$\Delta_{\mathbf{Q}\sigma} = \sum_{\sigma'} (U_c - U_s\sigma\sigma') D_{\mathbf{Q}\sigma'} \quad (4.18)$$

мы получаем в приближении среднего поля

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{Q}\mathbf{k}\sigma} a_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) a_{\sigma}(\mathbf{k}) \Delta_{\mathbf{Q}\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{Q}\sigma} D_{-\mathbf{Q}\sigma} \Delta_{\mathbf{Q}\sigma}. \quad (4.19)$$

Эрмитовость Гамильтониана требует $\Delta_{-\mathbf{Q}\sigma} = \Delta_{\mathbf{Q}\sigma}^*$. Из Гамильтониана (4.19) следуют уравнения движения в импульсном представлении:

$$\begin{aligned} [i\omega - \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k})] g_{\sigma}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \omega) - \sum_{\mathbf{Q}} \Delta_{\mathbf{Q}\sigma} g_{\sigma}(\mathbf{k}', \mathbf{k} - \mathbf{Q}, \omega) \\ = \delta(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (4.20)$$

4.2.3 Модуляция ВЗП с одним волновым вектором (косинусоидальная фаза)

Рассмотрим решение уравнений движения с $\Delta_{k\sigma} \neq 0$ только для $\mathbf{k} = \pm\mathbf{Q}$, где $\mathbf{Q} = 2k_F\mathbf{e}_x + (\pi/b)\mathbf{e}_y + \mathbf{q}$ с $|\mathbf{q}| \ll k_F$ и $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$ единичные векторы в направлении x, y . Если пренебречь рассеянием в состоянии с $|k_x| \gtrsim 2k_F$, уравнения (4.20) расцепляются: для $k_x > 0$ получаем

$$\begin{pmatrix} i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k}) & -\Delta_{\mathbf{Q}\sigma} \\ -\Delta_{-\mathbf{Q}\sigma} & i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k} - \mathbf{Q}) \end{pmatrix} \hat{G} = \hat{I}, \quad (4.21)$$

где

$$\hat{G} \equiv \begin{pmatrix} g_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega) & g_\sigma(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, \omega) \\ g_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}, \omega) & g_\sigma(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}, \omega) \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

и \hat{I} – единичная матрица 2×2 . Уравнения для $k_x < 0$ могут быть получены заменой $\mathbf{Q} \rightarrow -\mathbf{Q}$. Введя обозначения

$$\varepsilon_\sigma^\pm(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_\sigma(\mathbf{k}') \pm \varepsilon_\sigma(\mathbf{k})}{2} \quad (4.23)$$

и используя $\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}\Delta_{-\mathbf{Q}\sigma} = |\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}|^2$ из Ур. (4.21) получаем

$$\begin{aligned} g_\sigma(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, \omega) &= -\frac{\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}}{[\omega + i\varepsilon_\sigma(\mathbf{k})][\omega + i\varepsilon_\sigma(\mathbf{k} - \mathbf{Q})] + |\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}|^2} \\ &= -\frac{\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}}{[\omega + i\varepsilon_\sigma^+(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})]^2 + [\varepsilon_\sigma^-(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})]^2 + |\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}|^2}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Подставляя это в Ур. (4.18), получаем уравнение самосогласования

$$\Delta_{\mathbf{Q}\sigma'} = -T \sum_{\mathbf{k}\omega\sigma} \frac{(U_c - U_s\sigma\sigma')\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}}{[\omega + i\varepsilon_\sigma^+(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})]^2 + [\varepsilon_\sigma^-(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})]^2 + |\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}|^2}. \quad (4.25)$$

где ω принимает значения $\pi T(2n + 1)$, $n \in Z$. Используя тождество

$$T \sum_{\omega} \frac{1}{(\omega - i\alpha)^2 + a^2} = \frac{1}{4a} \left\{ \text{th} \frac{a - \alpha}{2T} + \text{th} \frac{a + \alpha}{2T} \right\}$$

перепишем уравнение самосогласования в виде

$$\Delta_{\mathbf{Q}\sigma'} = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{(U_c - U_s\sigma\sigma')\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}}{\sqrt{|\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}|^2 + [\varepsilon_\sigma^-(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})]^2}} \left\{ \text{th} \frac{E_{\sigma,+}(\mathbf{k})}{2T} - \text{th} \frac{E_{\sigma,-}(\mathbf{k})}{2T} \right\}, \quad (4.26)$$

где

$$E_{\sigma,\pm}(\mathbf{k}) = \varepsilon_\sigma^+(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}) \pm \sqrt{|\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}|^2 + [\varepsilon_\sigma^-(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})]^2} \quad (4.27)$$

есть спектр квазичастиц в косинусоидальной фазе. Из Ур. (4.12) следует, что для электронов с $k_x > 0$

$$\varepsilon_{\sigma}^{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}) = \frac{\hbar v_F q_x}{2} + 2t_b \sin \frac{q_y b}{2} \sin \left(k_y b - \frac{q_y b}{2} \right) - 2t'_b \cos q_y b \cos (2k_y b - q_y b) - \sigma H, \quad (4.28)$$

$$\varepsilon_{\sigma}^{-}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}) = \hbar v_F (k_x - k_F - q_x/2) - 2t_b \cos \frac{q_y b}{2} \cos \left(k_y b - \frac{q_y b}{2} \right) + 2t'_b \sin q_y b \sin (2k_y b - q_y b), \quad (4.29)$$

где $q_x \equiv Q_x - 2k_F$. Однако, удобнее сначала выполнить суммирование по импульсу в Ур. (4.25). Распространяя область интегрирования по k_x до бесконечности, получаем

$$\Delta_{\mathbf{Q}\sigma'} = \frac{\pi \nu_F |U_c| T}{2} \sum_{\omega \sigma} \left\langle \frac{(1 + \nu \sigma \sigma') \Delta_{\mathbf{Q}\sigma}}{\sqrt{[\omega + i\varepsilon_{\sigma}^{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})]^2 + |\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}|^2}} \right\rangle_{k_y}, \quad (4.30)$$

где подразумевается аналитическая ветвь корня с положительной действительной частью, угловые скобки означают усреднение по k_y , и еще мы ввели обозначения

$$\nu = -U_s/U_c \quad (4.31)$$

для отношения констант связи и

$$\nu_F = \frac{L_x}{\pi \hbar v_F} \quad (4.32)$$

для плотности состояний квазиодномерного электронного газа на уровне Ферми на одну компоненту спина.

Разложение Ур. (4.30) до третьего порядка по $\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}$ дает

$$\Delta_{\mathbf{Q}\sigma'} = \sum_{\sigma} \frac{1 + \nu \sigma \sigma'}{2} (K_{\sigma}^{(1)} - |\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}|^2 K_{\sigma}^{(3)c}) \Delta_{\mathbf{Q}\sigma}, \quad (4.33)$$

где нижний индекс “с” означает “cosine” (“косинусоидальная”), а

$$K_{\sigma}^{(1)} = \pi \nu_F |U_c| T \sum_{\omega} \left\langle \frac{\text{sign } \omega}{\omega + i\varepsilon_{\sigma}^{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})} \right\rangle_{k_y}, \quad (4.34)$$

$$K_{\sigma}^{(3)c} = \frac{\pi \nu_F |U_c| T}{2} \sum_{\omega} \left\langle \frac{\text{sign } \omega}{(\omega + i\varepsilon_{\sigma}^{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}))^3} \right\rangle_{k_y}. \quad (4.35)$$

Линия перехода второго рода в косинусоидальную фазу ВЗП соответствует

$$\det \begin{pmatrix} \frac{1+\nu}{2} K_{+}^{(1)} - 1 & \frac{1-\nu}{2} K_{-}^{(1)} \\ \frac{1-\nu}{2} K_{+}^{(1)} & \frac{1+\nu}{2} K_{-}^{(1)} - 1 \end{pmatrix} = 0, \quad (4.36)$$

где нижние индексы \pm означают $\sigma = \pm 1$. Левая часть этого уравнения является функцией ν, T, H и \mathbf{q} . Переход из нормального (металлического) состояния в ВЗП происходит при оптимальном значении \mathbf{q} , соответствующем минимуму свободной энергии ВЗП, что на линии перехода эквивалентно максимуму T_c или минимуму левой части Ур. (4.36).

Неограниченное интегрирование по k_x производит расходимость при суммировании по ω в $K_\sigma^{(1)}$, которая может быть перенормирована введением температуры перехода T_{c0} в отсутствие магнитного поля и при нулевом t'_b . Чтобы получить конечные выражения для T_c , заметим что при $H = 0$ имеем $K_+^{(1)} = K_-^{(1)}$, и матрица в Ур. (4.36) имеет собственные значения $K_\sigma^{(1)} - 1$ и $\nu K_\sigma^{(1)} - 1$. Поэтому при $H = 0$ получаем $K_\sigma^{(1)}(T = T_c(t'_b), H = 0) = 1$. Из Ур. (4.34) при $t'_b = 0$, после обрезания суммирования по ω на $\omega \sim E_F$, получаем $K^{(1)} = \nu_F |U_c| \ln(2\gamma E_F / \pi T)$, $\gamma = 1.781 \dots$ и

$$T_{c0} = \frac{2\gamma E_F}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{\nu_F |U_c|}\right), \quad (4.37)$$

в согласии с [226] и с обычным выражением теории Бардина-Купера-Шриффера (БКШ). Теперь Ур. (4.34) можно переписать в виде

$$K_\sigma^{(1)} = 1 + \nu_F |U_c| \left[\ln \frac{T_{c0}}{T} + \pi T \sum_\omega \left(\left\langle \frac{\text{sgn } \omega}{\omega + i\varepsilon_\sigma^+(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})} \right\rangle_{k_y} - \frac{\text{sgn } \omega}{\omega} \right) \right]. \quad (4.38)$$

Ядра $K_\sigma^{(1)}$ и $K_\sigma^{(3)c}$ можно дальше упростить в терминах дигамма-функции $\psi(x) = \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x)$:

$$K_\sigma^{(1)} = 1 + \nu_F |U_c| \left[\ln \frac{T_{c0}}{T} + \psi\left(\frac{1}{2}\right) - \left\langle \text{Re } \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon_\sigma^+(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})}{2\pi T}\right) \right\rangle_{k_y} \right], \quad (4.39)$$

$$K_\sigma^{(3)c} = -\frac{\nu_F |U_c|}{16\pi^2 T^2} \left\langle \text{Re } \psi''\left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon_\sigma^+(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})}{2\pi T}\right) \right\rangle_{k_y}. \quad (4.40)$$

Чтобы найти величину $\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}$ ниже точки перехода в главном порядке, нужно сделать подстановку $K_\sigma^{(1)} \rightarrow K_\sigma^{(1)} - |\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}|^2 K_\sigma^{(3)c}$ в Ур. (4.36). Отношение $\Delta_{\mathbf{Q}-} : \Delta_{\mathbf{Q}+}$ действительно и в точке перехода равно отношению столбцов в Ур. (4.36):

$$\Delta_{\mathbf{Q}-} : \Delta_{\mathbf{Q}+} = \left(\frac{1 + \nu}{2} K_+^{(1)} - 1 \right) : \left(\frac{\nu - 1}{2} K_-^{(1)} \right) = \left(\frac{\nu - 1}{2} K_+^{(1)} \right) : \left(\frac{1 + \nu}{2} K_-^{(1)} - 1 \right). \quad (4.41)$$

Введя действительный параметр $\alpha \equiv |\Delta_{\mathbf{Q}-}|^2 : |\Delta_{\mathbf{Q}+}|^2$, получаем

$$|\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}^c|^2 = \frac{\alpha^{(1-\sigma)/2} \left(\nu K_+^{(1)} K_-^{(1)} - \frac{\nu+1}{2} (K_+^{(1)} + K_-^{(1)}) + 1 \right)}{K_+^{(3)c} \left(\nu K_-^{(1)} - \frac{\nu+1}{2} \right) + \alpha K_-^{(3)c} \left(\nu K_+^{(1)} - \frac{\nu+1}{2} \right)}. \quad (4.42)$$

Косинусоидальная фаза ВЗП с $q_x = 0$ является обычной однородной ВЗП и подробно исследовалась ранее [34, 35, 36]. Косинусоидальная фаза ВЗП с $q_x \neq 0$ ранее анализировалась на линии перехода с помощью вычислений электронной восприимчивости в нормальной фазе [202, 203, 208, 204, 205] и была названа CDW_x фазой, в то время как фаза с $q_x = 0$ была названа CDW_0 [208].

4.2.4 Волна зарядовой плотности с двумя волновыми векторами

В этом подразделе мы рассмотрим решение уравнений движения (4.20) с $\Delta_{\mathbf{k}\sigma} \neq 0$ для $\mathbf{k} = \pm \mathbf{Q}_0 \pm \mathbf{q}$, где $\mathbf{Q}_0 = 2k_F \mathbf{e}_x + (\pi/b) \mathbf{e}_y$ и $q \ll k_F$. Строго говоря, не существует самосогласованного решения уравнений движения только с четырьмя гармониками, когда все остальные гармоники подавлены множителем порядка $\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}/E_F$. Однако, такая модуляция $\Delta_{\mathbf{k}\sigma}$ имеет ту же температуру перехода второго рода, что и косинусоидальная фаза, рассмотренная выше. Чуть ниже температуры перехода, все остальные, кроме указанных четырех гармоник с $\pm \mathbf{Q}_0 \pm \mathbf{q}$ подавлены в отношении $\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}/T$ или $\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}/H$.

Чтобы получить выражения для $\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}$ в главном порядке вблизи линии перехода, перепишем уравнения движения (4.20) в “матричном” виде

$$GG_0^{-1} - GF = I, \quad (4.43)$$

где

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= g_\sigma(\mathbf{k}', \mathbf{k}), \quad G_0(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{\delta(\mathbf{k}', \mathbf{k})}{i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k})}, \\ F(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{Q}} \Delta_{\mathbf{Q}\sigma} \delta(\mathbf{k}', \mathbf{k} - \mathbf{Q}). \end{aligned} \quad (4.44)$$

Решение этого уравнения дается рядом

$$G = G_0 + G_0FG_0 + G_0FG_0FG_0 + \dots \quad (4.45)$$

Пренебрегая вкладом виртуальных состояний при импульсе $|k_x| \gtrsim 2k_F$, получаем

уравнения самосогласования в третьем порядке по $\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}$:

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},\sigma'} = & T \sum_{\mathbf{k}\omega\sigma} (U_c - U_s \sigma \sigma') \times \left[\frac{\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},\sigma}}{(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k}))(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0 - \mathbf{q}))} + \right. \\ & + \frac{\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},\sigma} |\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},\sigma}|^2}{(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k}))(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0 - \mathbf{q}))(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k}))(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0 - \mathbf{q}))} + \\ & + \frac{\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},\sigma} |\Delta_{\mathbf{Q}_0-\mathbf{q},\sigma}|^2}{(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k}))(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0 - \mathbf{q}))(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k} - 2\mathbf{q}))(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0 - \mathbf{q}))} + \\ & \left. + \frac{\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},\sigma} |\Delta_{\mathbf{Q}_0-\mathbf{q},\sigma}|^2}{(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k}))(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}))(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k}))(i\omega - \varepsilon_\sigma(\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0 - \mathbf{q}))} \right]. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Уравнения для двух других гармоник получаются заменой $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$. Интегрируя по k_x , получаем

$$\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},\sigma'} = \sum_{\sigma} \frac{1 + \nu\sigma\sigma'}{2} \left(K_{\sigma}^{(1)} - |\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},\sigma}|^2 K_{\sigma}^{(3)c} - |\Delta_{\mathbf{Q}_0-\mathbf{q},\sigma}|^2 K_{\sigma}^{(3)d} \right) \Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},\sigma}, \quad (4.47)$$

где нижний индекс “d” означает “double cosine” (то есть член с модуляцией ВЗП с двумя волновыми векторами), $K^{(1)}$ и $K^{(3)c}$ даются Ур. (4.39) и (4.40), а

$$\begin{aligned} K_{\sigma}^{(3)d} = & \pi\nu_F |U_c| T \sum_{\omega} \left\langle \frac{(\omega - i\sigma H) \operatorname{sgn} \omega}{[(\omega + i\varepsilon_{\sigma}^{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}))(\omega - i\varepsilon_{-\sigma}^{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}))]^2} \right\rangle_{k_y} = \\ = & -\frac{\nu_F |U_c|}{4\pi\hbar\nu_F q_x T} \left\langle \left[\operatorname{Im} \psi' \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon_{\sigma}^{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})}{2\pi T} \right) + \operatorname{Im} \psi' \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon_{-\sigma}^{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})}{2\pi T} \right) \right] \right\rangle_{k_y}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Функция $K_{\sigma}^{(3)d}$ не зависит от σ и в дальнейшем мы будем опускать этот индекс.

Если волновой вектор ВЗП имеет только продольный сдвиг ($q_y = 0$), то зависимость $\varepsilon_{-\sigma}^{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})$ от k_y симметрична, и функции $K_{\sigma}^{(1)}$, $K_{\sigma}^{(3)c}$ и $K^{(3)d}$, зависящие только от вектора q_x , обладают симметрией:

$$\begin{aligned} K_{\sigma}^{(1)}(q_x) &= K_{-\sigma}^{(1)}(-q_x), \\ K_{\sigma}^{(3)c}(q_x) &= K_{-\sigma}^{(3)c}(-q_x), \\ K^{(3)d}(q_x) &= K^{(3)d}(-q_x). \end{aligned} \quad (4.49)$$

Эта симметрия следует из Ур. (4.39), (4.40) и (4.48) и из свойств дигамма-функции: $\operatorname{Re} \psi^{(n)}(a + ib) = \operatorname{Re} \psi^{(n)}(a - ib)$, $\operatorname{Im} \psi^{(n)}(a + ib) = -\operatorname{Im} \psi^{(n)}(a - ib)$. Эта симметрия точная и не является следствием разложения по степеням Δ_{σ} : уравнения самосогласования (4.30) также не меняются при замене

$$q_x \rightarrow -q_x, \quad \sigma \rightarrow -\sigma. \quad (4.50)$$

Отношение $|\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},\sigma}|^2 : |\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},-\sigma}|^2$ вблизи точки перехода по-прежнему дается Ур. (4.41) с учетом симметрии (4.49). Следовательно, $|\Delta_{\mathbf{Q}_0-\mathbf{q},\sigma}|^2 : |\Delta_{\mathbf{Q}_0-\mathbf{q},-\sigma}|^2 = |\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},-\sigma}|^2 : |\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},\sigma}|^2 \equiv \alpha$. Как и при выводе Ур. (4.42), систему уравнений (4.47) на Δ можно переписать как два уравнения (4.36) с заменой $K_\sigma^{(1)}(\mathbf{Q}_0 \pm \mathbf{q}_x) \rightarrow K_{\pm\sigma}^{(1)} - |\Delta_{\mathbf{Q}_0 \pm \mathbf{q},\sigma}|^2 K_{\pm\sigma}^{(3)c} - |\Delta_{\mathbf{Q}_0 \mp \mathbf{q},\sigma}|^2 K^{(3)d}$.

введя обозначение $\beta \equiv |\Delta_{\mathbf{Q}_0-\mathbf{q},-}|^2 : |\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},+}|^2$, можно обобщить вывод Ур. (4.42) и получить

$$|\Delta_{\mathbf{Q}_0+\mathbf{q},+}|^2 = \frac{\left(\nu K_+^{(1)} K_-^{(1)} - \frac{\nu+1}{2}(K_+^{(1)} + K_-^{(1)}) + 1\right)}{\left(K_+^{(3)c} + \alpha\beta K^{(3)d}\right) \left(\nu K_-^{(1)} - \frac{\nu+1}{2}\right) + \left(\alpha K_-^{(3)c} + \beta K^{(3)d}\right) \left(\nu K_+^{(1)} - \frac{\nu+1}{2}\right)}, \quad (4.51)$$

а из $\mathbf{Q}_0 - \mathbf{q}$ части Ур. (4.47) получить

$$|\Delta_{\mathbf{Q}_0-\mathbf{q},-}|^2 = \frac{\beta \left(\nu K_+^{(1)} K_-^{(1)} - \frac{\nu+1}{2}(K_+^{(1)} + K_-^{(1)}) + 1\right)}{\left(\beta K_+^{(3)c} + \alpha K^{(3)d}\right) \left(\nu K_-^{(1)} - \frac{\nu+1}{2}\right) + \left(\alpha\beta K_-^{(3)c} + K^{(3)d}\right) \left(\nu K_+^{(1)} - \frac{\nu+1}{2}\right)}. \quad (4.52)$$

При делении Ур. (4.51) на Ур. (4.52) мы получаем линейное уравнение на β , которое дает $\beta = 1$. Значения $\beta = 0$ и $\beta = \infty$ в Ур. (4.51) и (4.52) соответствуют косинусоидальной фазе, рассмотренной в предыдущем подразделе. Следовательно, в фазе ВЗП с двойной модуляцией, симметрия (4.50) не нарушена, в то время как переход в косинусоидальную фазу (с одним вектором модуляции и $\mathbf{q}_x \neq 0$) нарушает эту симметрию.

4.2.5 Свободная энергия фаз ВЗП с одним и двумя волновыми векторами

Выражения для свободной энергии фаз ВЗП с одним и двумя волновыми векторами легко получить во втором порядке по величине щели $|\Delta_\sigma|$.

Из Ур. (4.19) для свободной энергии получаем

$$F_{\text{CDW}} - F_n = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{Q}\sigma} D_{-\mathbf{Q}\sigma} \Delta_{\mathbf{Q}\sigma}. \quad (4.53)$$

Во втором порядке по $\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}$ это выражение принимает простой вид:

$$\begin{aligned} F_{\text{CDW}} - F_n &= -\frac{\pi\nu_F T}{4} \sum_{\mathbf{Q}\omega\sigma} \left\langle \frac{\Delta_{\mathbf{Q}\sigma} \Delta_{-\mathbf{Q}\sigma} \text{sign } \omega}{\omega + i\varepsilon_\sigma^\pm(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q})} \right\rangle_{k_y} \\ &= -\frac{1}{4|U_c|} \sum_{\mathbf{Q}\sigma} K_\sigma^{(1)} |\Delta_{\mathbf{Q}\sigma}|^2. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Фаза ВЗП с наименьшей правой частью Ур. (4.53) выигрывает. Из Ур. (4.54), используя Ур. (4.49), мы получаем свободную энергию для ВЗП с одним волновым вектором

$$F_c - F_n = -\frac{K_+^{(1)} + \alpha K_-^{(1)}}{2|U_c|} |\Delta_{\mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}_{x,+}}^c|^2, \quad (4.55)$$

и для ВЗП с двумя волновыми векторами (индекс "2с" указывает на двойную косинусоидальную модуляцию)

$$F_{2c} - F_n = -\frac{K_+^{(1)} + \alpha K_-^{(1)}}{|U_c|} |\Delta_{\mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}'_{x,+}}^{2c}|^2. \quad (4.56)$$

Величина $K_+^{(1)} + \alpha K_-^{(1)}$ зависит от \mathbf{q} и всегда положительна вблизи линии перехода $T_c(H)$ металл-ВЗП, где этот переход всегда второго рода.

Поскольку фазы ВЗП с одним и двумя волновыми векторами имеют одинаковую температуру перехода, единственный способ определить какая из этих фаз возникает – это сравнить их свободные энергии, которые вблизи линии перехода $T_c(H)$ даются формулами (4.55) и (4.56). Фаза ВЗП с двумя волновыми векторами выигрывает, если отношение

$$r_F \equiv \frac{F_{2c} - F_n}{(F_c - F_n)} > 1, \quad (4.57)$$

где значения функций $F_{2c}(T, H, \mathbf{q})$ и $F_c(T, H, \mathbf{q})$ берутся при оптимальном волновом векторе \mathbf{q} , который должен быть определен минимизацией свободной энергии в каждой точке T, H фазовой диаграммы и для каждой из двух фаз по отдельности.

Ниже температуры перехода, оптимальные вектора сдвига \mathbf{q} отличаются для этих двух фаз, поскольку они минимизируют разные функции свободной энергии F_c и F_{2c} . Однако, на линии перехода $T_c(H)$ металл-ВЗП, эти две фазы ВЗП имеют один и тот же вектор \mathbf{q} , определяемый минимумом левой части Ур. (4.36). Следовательно, на линии перехода $T_c(H)$ Ур. (4.57) упрощается до

$$r_F = \frac{2|\Delta_{\mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}_{x,+}}^{2c}|^2}{|\Delta_{\mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}_{x,+}}^c|^2} > 1, \quad (4.58)$$

где $|\Delta_{\mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}_{x,+}}^c|^2$ и $|\Delta_{\mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}_{x,+}}^{2c}|^2$ даются Ур. (4.42) и (4.51) соответственно.

4.2.6 Фазовая диаграмма

В этом разделе мы рассмотрим только продольную модуляцию волнового вектора ВЗП ($q_y = 0$). ВЗП с $q_y \neq 0$ (ВЗП_y фаза) может возникнуть при определенных видах функции

$t_{\perp}(\mathbf{k}_{\perp})$. Однако, в приближении сильной связи для модели (4.12) ВЗП_y фаза не должна возникнуть вблизи температуры перехода металл-ВЗП. Мы провели численный расчет вектора сдвига ВЗП \mathbf{q} на линии перехода $T_c(H)$ в широком интервале параметров: $-0.3 \leq \nu \leq 0.9, 0 \leq t'_b/t_b^* < 1$ и $0 \leq \mu_B H \leq 2T_{c0}$, и нигде не обнаружили, чтобы сдвиг $Q_y \neq 0$ приводил бы к повышению T_c в этих интервалах параметров. Это не противоречит предсказанию ВЗП_y в статье [208], поскольку согласно этой работе ВЗП_y фаза появлялась только при $\nu < 0$ и только из-за орбитального эффекта магнитного поля (см. Рис. 7d статьи [208]). Если магнитное поле направлено вдоль проводящих слоев, то орбитальным эффектом магнитного поля можно пренебречь.

Вблизи критического давления, когда $t'_b \approx t_b^*$ и происходит переход между металлическим состоянием и волной плотности, в нулевом магнитном поле была предсказана волна плотности с $q_y \neq 0$ [227]. Однако, эта фаза была предсказана только вблизи $T = 0$, где происходит переход первого рода и расчет восприимчивости в металлическом состоянии (линии неустойчивости металлического состояния) не дает реальную линию перехода.

Ниже мы рассмотрим только интервал $0 \leq \nu < 1$, который соответствует экспериментальной ситуации в большинстве органических металлов, и пренебрежем возможностью появления ВЗП_y фазы.

Линия перехода металл-ВЗП и тройная точка

Линия перехода металл-ВЗП $T_c(H)$ дается Ур. (4.36) не зависимо от того, в какую фазу ВЗП происходит этот переход. Сдвиг волнового вектора q_x , который входит в Ур. (4.36), соответствует максимальному значению T_c при заданном магнитном поле H . Поведение $T_c(H)$ и $q_x(H)$ на этой линии перехода изучалось в статье [208]. Диагонализация части M_3, M_4 матрицы восприимчивости (6) в статье [208] соответствует диагонализации матрицы в Ур. (4.36). В случае идеального нестинга Ур. (4.36) дает тот же результат для $T_c(H)$, как и Ур. (17) статьи [208] (см Рис. 7(a) в статье [208]).

Для $q_x = 0$ (CDW₀ фаза) $K_+^{(1)} = K_-^{(1)}$ и Ур. (4.36) упрощается до $K_+^{(1)} = 1$, что дает для линии перехода $T_c = T_c(H)$ хорошо известное выражение

$$\ln \left(\frac{T_c(H, t'_b)}{T_{c0}} \right) = \psi \left(\frac{1}{2} \right) - \left\langle \operatorname{Re} \psi \left(\frac{1}{2} - \frac{i\varepsilon_{\sigma}^+(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}_0)}{2\pi T_c} \right) \right\rangle_{k_y}, \quad (4.59)$$

где

$$\varepsilon_{\sigma}^{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}_0) = -2t'_b \cos(2k_y b) - \sigma H. \quad (4.60)$$

В Ур. (4.59) можно взять любой знак $\sigma = \pm 1$, поскольку это уравнение не зависит от знака σ . Линия перехода $T_c(H)$ из металлического состояния в ВЗП с $q_x = 0$ (CDW₀ фазу) также не зависит от отношения констант связи ν .

Тройная точка, где фазы CDW₀ и CDW_x имеют одинаковую температуру перехода $T_c(H)$, определяется из уравнения $\partial^2 D(\nu, T, H, q_x)/\partial q_x^2 = 0$, где $D(\nu, T, H, q_x)$ – левая часть Ур. (4.36). В этой точке $q_x = 0$ означает $\Rightarrow K_{+}^{(1)} = K_{-}^{(1)} = 1$ и $\partial^n K_{+}^{(1)}/\partial q_x^n = (-1)^n \partial^n K_{-}^{(1)}/\partial q_x^n$, и уравнение для тройной точки записывается в виде

$$\frac{\partial^2 K^{(1)}}{(\partial q_x)^2} = -\frac{2\nu}{1-\nu} \left(\frac{\partial K^{(1)}}{\partial q_x} \right)^2. \quad (4.61)$$

После подстановки (4.39) и (4.40), это уравнение принимает вид

$$\begin{aligned} & - \left\langle \operatorname{Re} \psi'' \left(\frac{1}{2} - \frac{i\varepsilon_{\uparrow}^{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}_0)}{2\pi T_c} \right) \right\rangle_{k_y} = \\ & \eta \left[\left\langle \operatorname{Im} \psi' \left(\frac{1}{2} - \frac{i\varepsilon_{\uparrow}^{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}_0)}{2\pi T_c} \right) \right\rangle_{k_y} \right]^2, \end{aligned} \quad (4.62)$$

где

$$\eta = 2\nu\nu_F |U_c| / (1 - \nu). \quad (4.63)$$

Вместе с Ур. (4.59), уравнение (4.62) позволяет найти тройную точку.

Линия перехода металл-ВЗП при идеальном нестинге

Случай идеального нестинга ($t'_b = 0$) эквивалентен чисто одномерному случаю во многих математических аспектах. Однако, с физической точки зрения эти случаи сильно различаются: трехмерная природа соединения (его спектр квазичастиц, электрон-электронное взаимодействие и упругость решетки) делают применимым приближение среднего поля. Ниже мы приведем простые аналитические формулы для случая $t'_b = 0$, помогающие понять некоторые качественные черты ВЗП в магнитном поле.

Для идеального нестинга и продольной модуляции волнового вектора ВЗП ($q_y = 0$), выражения для $K_{\sigma}^{(1)}$, $K_{\sigma}^{(3)d}$ и $K_{\sigma}^{(3)c}$ упрощаются до

$$\begin{aligned} K_{\sigma 0}^{(1)} = 1 + \nu_F |U_c| \left[\ln \frac{T_{c0}}{T} + \psi \left(\frac{1}{2} \right) - \right. \\ \left. - \operatorname{Re} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i h_{\sigma}}{2\pi T} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.64)$$

и

$$K_{\sigma 0}^{(3)c} = -\frac{\nu_F |U_c|}{16\pi^2 T^2} \operatorname{Re} \psi'' \left(\frac{1}{2} + \frac{ih_\sigma}{2\pi T} \right), \quad (4.65)$$

$$K_0^{(3)d} = -\frac{\nu_F |U_c|}{4\pi \hbar \nu_F q_x T} \sum_{\sigma=\pm 1} \operatorname{Im} \psi' \left(\frac{1}{2} + \frac{ih_\sigma}{2\pi T} \right), \quad (4.66)$$

где

$$h_\sigma = \frac{\hbar \nu_F q_x}{2} - \sigma H. \quad (4.67)$$

При $q_x = 0$, Ур. (4.65) упрощается еще сильнее:

$$K_{00}^{(3)d} = -\frac{\nu_F |U_c|}{8\pi^2 T^2} \operatorname{Re} \psi'' \left(\frac{1}{2} - \frac{iH}{2\pi T} \right) = 2K_{\sigma 00}^{(3)c}. \quad (4.68)$$

Выведем аналитическую формулу для линии перехода $T_c(H)$ в пределе сильного поля $H \gg T_c(H)$. При $H \rightarrow \infty$, h_σ в Ур. (4.67) стремится к нулю для одного направления спина и к $-2\sigma H$ для другого. используя предельное разложения для дигамма-функции, $\operatorname{Re} \psi(1/2 + ix) = \ln x + O(1/x)$, $x \rightarrow \infty$, из Ур. (4.64) получаем при $H/\pi T_c(H) \gg 1$

$$\begin{aligned} K_+^{(1)} &\approx 1 + \nu_F |U_c| \ln(T_{c0}/T) \\ K_-^{(1)} &\approx 1 + \nu_F |U_c| \ln(\pi T_{c0}/4\gamma H). \end{aligned} \quad (4.69)$$

Ур. (4.36) принимает вид

$$K_+^1 = \frac{(1 + \nu)K_-^{(1)}/2 - 1}{\nu K_-^{(1)} - (1 + \nu)/2},$$

который в пределе $H/\pi T_c(H) \gg 1$ становится

$$\ln(T_{c0}/T) = \frac{\ln(4\gamma H/\pi T_{c0})}{\eta \ln(4\gamma H/\pi T_{c0}) + 1}, \quad (4.70)$$

где η дается Ур. (4.63). При $\eta \ln(4\gamma H/\pi T_{c0}) \gg 1$ это уравнение упрощается до

$$T_c(H \rightarrow \infty) = T_{c0} \exp(-1/\eta). \quad (4.71)$$

В промежуточном интервале $\pi T_c(H) \ll 4\gamma H \ll \pi T_{c0} \exp(1/\eta)$ получаем

$$T_c(H) \approx \pi T_{c0}^2 / (4\gamma H). \quad (4.72)$$

таким образом, при идеальном нестинге в пределе $H \rightarrow \infty$ температура перехода стремиться к конечному значению, соответствующему температуре перехода в ВЗП если бы имелась только одна компонента спина.

Однако, поведение $T_c(H)$, описываемое формулами (4.70), (4.71) и (4.72), сильно меняется в случае неидеального нестинга, когда $t'_b \neq 0$ (см. ниже).

Линия перехода металл-ВЗП и тройная точка фазовой диаграммы при неидеальном нестинге (конечном t'_b)

Используя Ур. (4.36) и Ур. (4.62), мы нашли линию перехода $T_c(H)$ и тройную точку для разных значений t'_b и ν . Результаты показаны на Рис. 4.1. Из этих графиков мы видим, что линия перехода металл-ВЗП $T_c(H)$ сильно зависит как от t'_b , так и от ν . Следовательно, вопреки распространенному мнению, не возможно определить значение t'_b из экспериментальных данных о линии перехода $T_c(H)$, если не известно отношение ν констант взаимодействия. Чтобы определить значения t'_b и ν в конкретном соединении, нужны два независимых измеряемых параметра, связанных с t'_b и ν . В принципе, при разных значениях ν кривые на Рис. 4.1 имеют разное отношение $T_c(H = 0)/T_c(H \rightarrow \infty)$, что может дать некоторую независимую оценку для ν . Также можно наклонять магнитное поле, что позволяет включать и выключать орбитальный эффект магнитного поля. Величину t'_b можно также попытаться независимо определить из измерений магнитосопротивления и затем сравнить с $t_b^* = \Delta_0/2 \approx 0.88T_{c0}$, при котором волна плотности подавляется и без магнитного поля.

Все три диаграммы на Рис. 4.1 обладают общим интересным свойством. При каждом значении ν существует критическое значение $t_b^{**} < t_b^*$, выше которого ВЗП_x фаза не появляется, то есть при увеличении магнитного поля даже при нулевой температуре происходит переход из ВЗП₀ в металлическое (а не в ВЗП_x) состояние. Причем чем меньше ν , тем меньше отношение t_b^{**}/t_b^* , что может быть также использовано для независимого определения ν .

Мы также проверили, что на линии перехода $T_c(H)$, ширина области ВЗП_x с одним волновым вектором почти не меняется с увеличением t'_b , но зависит от ν (см. Рис. 4.2 ниже).

Фазы ВЗП_x с одним и двумя волновыми векторами

Чтобы определить, какое из двух состояний ВЗП_x (с одним CDW_c или с двумя волновыми векторами CDW_{2c}) выигрывает, нужно сравнить свободные энергии этих состояний, данные в Ур. (4.55)-(4.58).

На линии перехода это сводится к расчету отношения (4.58). В тройной точке (при $q_x = 0$) это отношение легко вычисляется используя Ур. (4.68) и формулы (4.42) и (4.51) с $\beta = 1$:

$$r_{Ftriple} = 2/3 < 1. \quad (4.73)$$

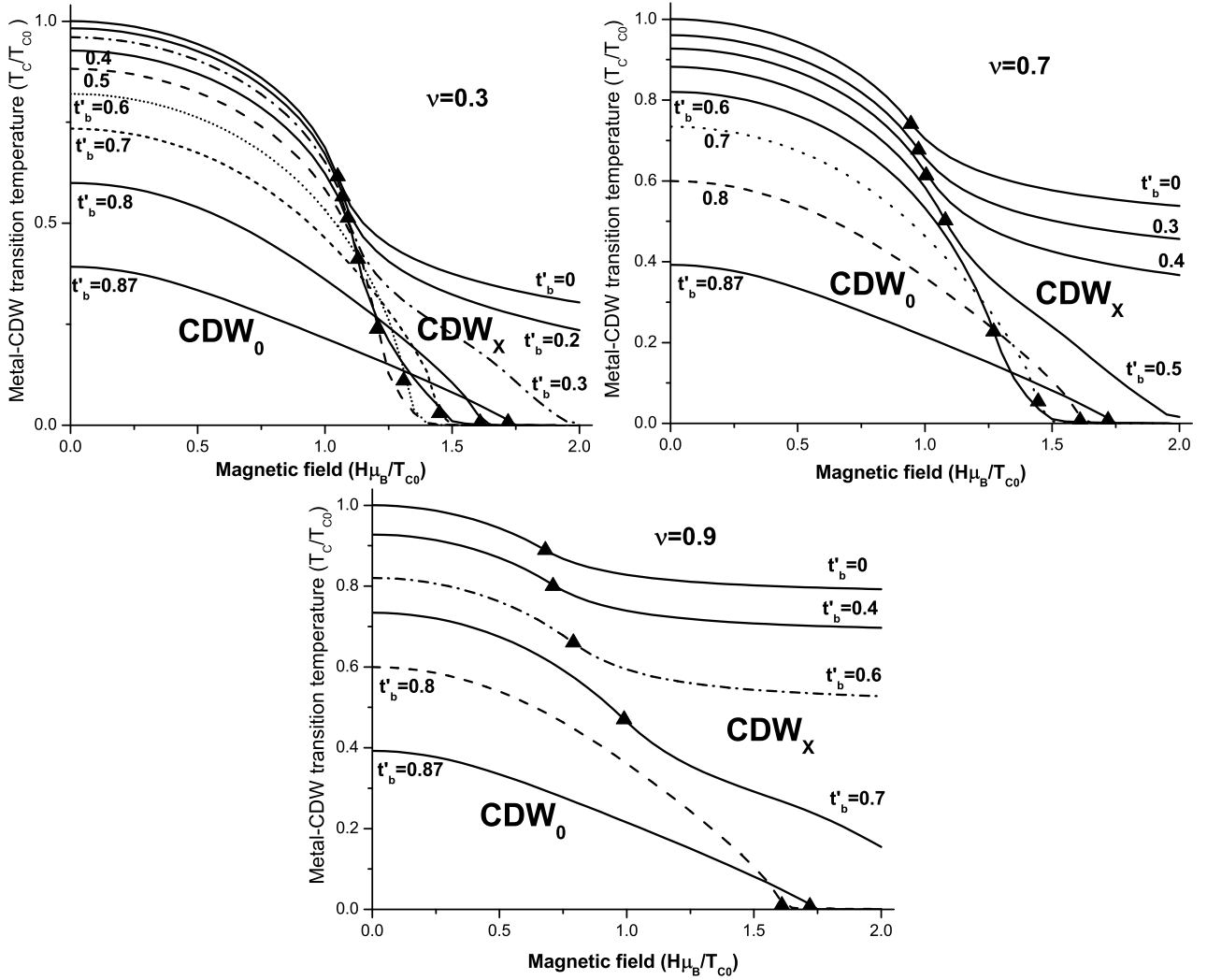


Рисунок 4.1: Линии перехода металл-ВЗП $T_c(H)$ при разных значениях "антинестингового" члена t'_b и при трех разных значениях отношения констант электрон-электронного взаимодействия $\nu = -U_s/U_c$. Значения t'_b даны на рисунке в единицах T_{c0} ; для дисперсии в Ур. (4.12) (в приближении сильной связи) критическое значение t'_b при котором ВЗП исчезает даже в отсутствие магнитного поля есть $t'_b^* = \Delta_0/2 \approx 0.88T_{c0}$. Треугольники показывают тройную точку (металл-ВЗП₀-ВЗП_x).

Следовательно, в тройной точке фазовой диаграммы выигрывает косинусоидальная фаза ВЗП_x с одним волновым вектором. В пределе сильного поля ($H \gg T_c$) имеем $\hbar v_F q_x \rightarrow 2H$ и $h_\sigma \rightarrow (1 - \sigma)H$ в Ур. (4.64)-(4.67). В этом пределе $K_+^{(3)c} \approx -(\nu_F |U_c| / 16\pi^2 T^2) \text{Re } \psi''(1/2) \gg K_-^{(3)c}, K^{(3)d}$, и из Ур. (4.58) мы получаем

$$r_F \rightarrow 2 \text{ at } H/T_c \rightarrow \infty. \quad (4.74)$$

Следовательно, в сильном магнитном поле на линии перехода выигрывает состояние ВЗП с двумя волновыми векторами. Эти две простые оценки указывают, что обе фазы ВЗП_x (с одним CDW_c и с двумя CDW_{2c} волновыми векторами) обычно присутствуют на $H - T$ фазовой диаграмме ВЗП.

Граница между CDW_c и CDW_{2c} фазами на линии перехода $T_c(H)$ определяется уравнением $r_F(T, H, \nu) = 1$, которое можно переписать в виде

$$\begin{aligned} & \left(K_+^{(3)c} - \alpha K^{(3)d} \right) \left(\nu K_-^{(1)} - \frac{\nu + 1}{2} \right) = \\ & = \left(K^{(3)d} - \alpha K_-^{(3)c} \right) \left(\nu K_+^{(1)} - \frac{\nu + 1}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.75)$$

Это уравнение верно и для ненулевого t'_b , и вместе с Ур. (4.36) позволяет определить вторую тройную точку $(H_{c2}(\nu), T_c(H_{c2}))$, где встречаются металлическое, CDW_c и CDW_{2c} состояния.

На Рис. 4.2 мы построили два значения $H_{c1}(\nu)$ и $H_{c2}(\nu)$ в тройных точках металл-CDW₀-CDW_c и металл-CDW_c-CDW_{2c}, которые определяются из Ур. (4.62) и (4.75) соответственно (вместе с Ур. (4.36)) при двух разных значениях $t'_b = 0$ и $t'_b = 0.5T_{c0}$. И этих графиков видно, что область ВЗП_x фазы с одним волновым вектором (CDW_c) довольно узкая (разница $H_{c2} - H_{c1}$ не превышает 5% от H_{c1}) и сильно зависит от ν .

При $\nu = 0$ тройные критические точки H_{c1} и H_{c2} совпадают. В этой “дважды-тройной” точке знаменатели в Ур. (4.42) и (4.51) равны нулю. Это означает, что нужно использовать разложение по степеням $|\Delta|^2$, включающее следующие (шестую и выше) степени $|\Delta|$, и что в этой точке сильны флуктуации, а приближение среднего поля скорее всего не применимо.

Из Рис. 4.2 видно, что (i) на фазовой диаграмме ВЗП в магнитном поле имеются по крайней мере три различных состояния: CDW₀, CDW_c и CDW_{2c}, (ii) на линии перехода $T_c(H)$ область фазы CDW_c довольно узкая для всех t'_b и расположена между фазами CDW₀ и CDW_{2c} при увеличении магнитного поля.

Чтобы проанализировать, как эта фазовая диаграмма изменяется при понижении температуры ниже линии перехода $T_c(H)$, мы выполним численный расчет свободной

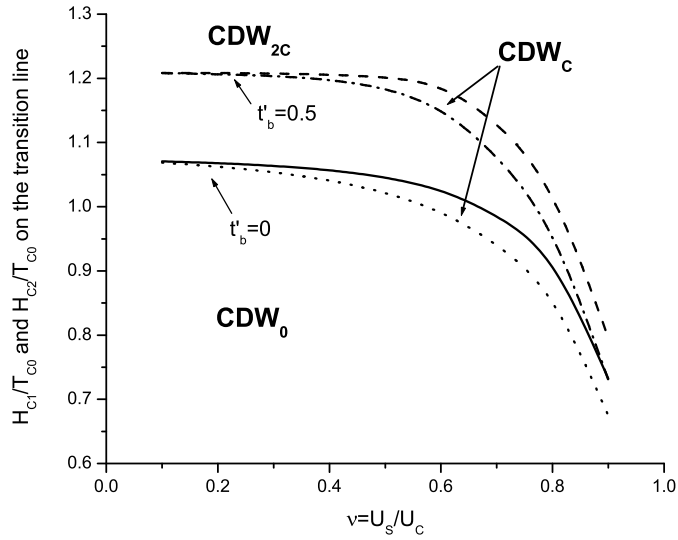


Рисунок 4.2: Значения $H_{c1}(\nu)$ и $H_{c2}(\nu)$ магнитного поля в двух тройных точках металл- CDW_0 - CDW_c и металл- CDW_c - CDW_{2c} как функция отношения констант e - e взаимодействия $\nu = U_s/U_c$ для двух разных значений амплитуды "антинеighboring" члена t'_b . Сплошная и точечная линии обозначают $H_{c2}(\nu)$ и $H_{c1}(\nu)$ для идеального нестинга ($t'_b = 0$), а штриховая и штрих-пунктирные линии обозначают $H_{c2}(\nu)$ и $H_{c1}(\nu)$ при конечном значении $t'_b = 0.5T_{c0}$. Фаза ВЗП_x с одним волновым вектором ВЗП существует между $H_{c1}(\nu)$ и $H_{c2}(\nu)$ линиями.

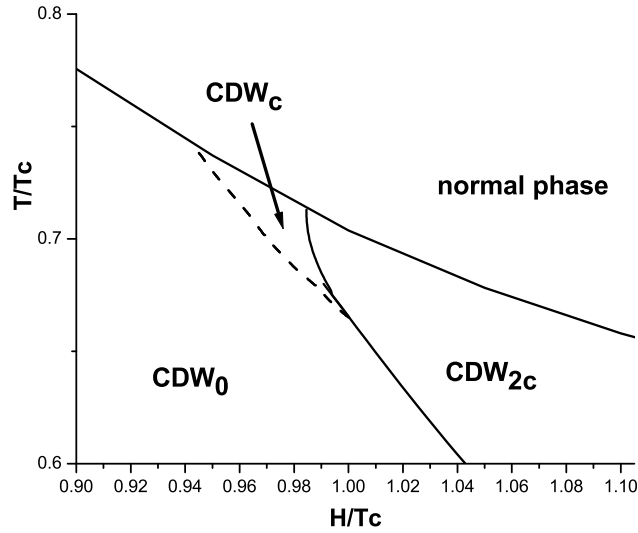


Рисунок 4.3: Фазовая диаграмма в координатах $H - T$ при $\nu = 0.7$ и идеальном нестинге вблизи тройной точки. Область фазы CDW_c быстро уменьшается при понижении температуры ниже T_c и исчезает совсем при $T^*(H) \approx 0.95T_c(H)$.

энергии состояний CDW_c и CDW_{2c} используя формулы (4.55),(4.56),(4.51),(4.42). Эти формулы верны при $\Delta \ll \pi T, H$, что покрывает некоторую узкую область ниже $T_c(H)$.

Вычисления, выполненные нами при идеальном нестинге показывают, что область CDW_c фазы (ВЗП_x с одним волновым вектором) при понижении температуры становится еще уже, чем на линии перехода $T_c(H)$. Более того, при понижении температуры до $T^*(H) \approx 0.95T_c(H)$ фаза CDW_c исчезает совсем (см. Рис. 4.3). Следовательно, ВЗП_x состояние с одним волновым вектором при идеальном нестинге существует только в очень малой области вблизи тройной точки металл-ВЗП₀-ВЗП_x, где сильны флуктуации параметра порядка и приближение среднего поля плохо работает. Вдали от тройной точки, где приближение среднего поля работает намного надежнее, мы получаем, что из двух фаз ВЗП со смещенным волновым вектором выигрывает фаза CDW_{2c} с двумя волновыми векторами.

Похожая фазовая диаграмма возникает в поверхностной сверхпроводимости в параллельном магнитном поле [228], где ВЗП_x соответствует неоднородной ЛОФФ фазе [192, 193]. ВЗП_x с одним и двумя волновыми векторами, то есть CDW_c и CDW_{2c} фазы, соответствуют геликоидальной и косинусоидальной (солитонной или полосной) модуляции параметра порядка сверхпроводимости. Это еще раз указывает на общие черты математического описания ВЗП и сверхпроводимости. Однако, наша ситуация

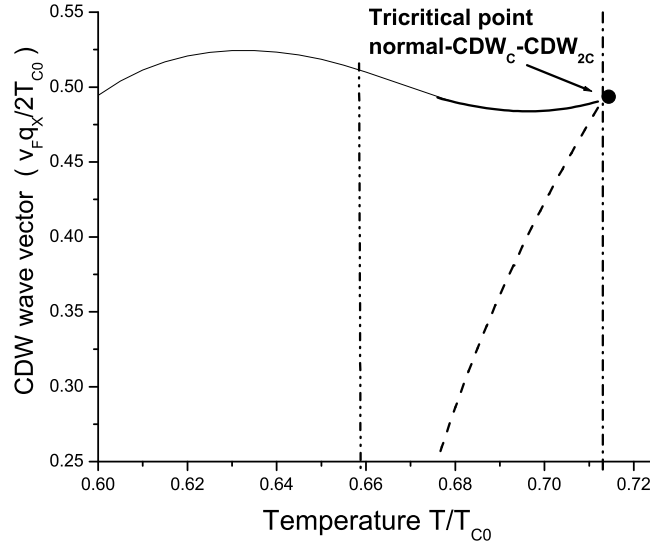


Рисунок 4.4: Сдвиг q_x волновых векторов фазы CDW_{2c} (сплошная линия) и CDW_c (штриховая линия) вдоль линии перехода CDW_c - CDW_{2c} (при $0.713 > T/T_{c0} > 0.66$) и линии перехода CDW_0 - CDW_{2c} (при $T/T_{c0} < 0.66$) как функция температуры. Эти сдвиги совпадают только в тройной точке металл- CDW_c - CDW_{2c} при $T/T_{c0} = 0.713$. Разница между сплошной и штриховой линиями дает скачок волнового вектора ВЗП на линии перехода CDW_c - CDW_{2c} . Это делает такой переход первым родом и даже приводит к гистерезису. Штрих-пунктирная линия при $T/T_{c0} \approx 0.71$ обозначает температуру перехода металл-ВЗП, а линия из штрихов и двойных точек при $T/T_{c0} \approx 0.66$ обозначает тройную критическую точку CDW_0 - CDW_c - CDW_{2c} .

отличается от рассмотренной в работе [228], где член Рашбы в электронной дисперсии (Гамильтониане) играет важную роль для получения фазовой диаграммы, похожей на Рис. 4.3. Число гармоник и констант связи в нашей модели в два раза больше, чем в модели в статье [228]. Тем не менее, аналогия между ВЗП и поверхностной сверхпроводимостью в магнитном поле довольно глубокая [229, 230].

На линии перехода CDW_c - CDW_{2c} энергетическая щель в спектре возбуждений и оптимальный сдвиг q_x волнового вектора ВЗП этих двух фаз все более и более отличаются по мере понижения температуры ниже $T_c(H)$ (см. Рис. 4.4). Это означает переход первого рода между этими двумя фазами. Переход между CDW_0 и CDW_{2c} также первого рода, а вектор ВЗП в CDW_{2c} фазе отличается от $Q_0 = 2k_F$ уже на линии перехода $T_c(H)$ (см. Рис. 4.4). Это объясняет сильный гистерезис намагниченности и магнитосопротивления, наблюдаемые в органическом металле α -(BEDT-TTF) $_2$ KHg(SCN) $_4$

при таком переходе из ВЗП₀ в ВЗП_x. [213, 214, 216] Переход первого рода, вызванный изменением магнитного поля, обычно сопровождается гистерезисом. В данном случае имеется простая физическая причина для этого гистерезиса, возникающая из-за скачка волнового вектора ВЗП при переходе между разными фазами ВЗП. ВЗП и ее волновой вектор в реальном кристалле оказываются зацепленными (запинингованными) примесями и другими кристаллическими дефектами, то есть проскальзывание фазы ВЗП требует дополнительной энергии и преодоления локального потенциального минимума. [34] Именно поэтому не возникает так называемой Фрелиховской сверхпроводимости, вызванной бездиссипативным скольжением фазы ВЗП. Скачок волнового вектора ВЗП также требует движения конденсата и проскальзываний фазы ВЗП. Из-за такого зацепления (пиннинга), это движение сопровождается гистерезисом, поскольку ВЗП постоянно находит локальные минимумы в примесном потенциале. Чем больше скачок волнового вектора ВЗП, тем больше гистерезис. Этот скачок уменьшается с повышением температуры и исчезает на линии перехода $T_c(H)$ в металлическое состояние. Гистерезис показывает похожую температурную зависимость. Кроме этого, при повышении температуры гистерезис также уменьшается из-за термически-активационных процессов, уменьшающих зацепление ВЗП за примеси.

4.2.7 Обсуждение

Модуляции электронного заряда и спина, а также сопутствующая им модуляция кристаллической решетки, существенно отличаются в двух разных фазах ВЗП_x с одним и двумя волновыми векторами (то есть в фазах CDW_c и CDW_{2c} соответственно). В CDW_{2c} фазе модуляция плотности заряда $\rho_C^{2c}(x)$ является суммой двух косинусоидальных модуляций (отсюда индекс "2c") с волновыми векторами $Q_0 \pm q_x$ и одинаковой амплитудой. Поскольку $Q_0 \gg q_x$, то это приводит к биениям амплитуды быстрых модуляций ВЗП:

$$\begin{aligned}
 \rho_C^{2c}(x) &= \nu_F(\Delta_+ + \Delta_-) \{ \cos[(Q_0 + q_x)x + \phi_1] \\
 &\quad + \cos[(Q_0 - q_x)x + \phi_2] \} \\
 &= 2\nu_F(\Delta_+ + \Delta_-) \cos[Q_0x + (\phi_1 + \phi_2)/2] \\
 &\quad \times \cos[q_x x + (\phi_1 - \phi_2)/2].
 \end{aligned} \tag{4.76}$$

Фазовые сдвиги ϕ_1 и ϕ_2 могут слабо зависеть от координаты из-за пиннинга ВЗП примесями. Обычно, $\Delta_+(Q)$ и $\Delta_-(Q)$ в CDW_{2c} сильно различаются, и волна зарядовой плотности (ВЗП) в магнитном поле сопровождается волной спиновой плотности (ВСП).

Модуляция спиновой плотности в CDW_{2c} фазе дается выражением

$$\begin{aligned}\rho_S^{2c}(x) &= \nu_F(\Delta_+ - \Delta_-) \{ \cos[(Q_0 + q_x)x + \phi_1] \\ &\quad - \cos[(Q_0 - q_x)x + \phi_2] \} \\ &= -2\nu_F(\Delta_+ - \Delta_-) \sin[Q_0x + (\phi_1 + \phi_2)/2] \\ &\quad \times \sin[q_x x + (\phi_1 - \phi_2)/2].\end{aligned}\tag{4.77}$$

таким образом, присутствие второй близкой (по волновому вектору) и одинаковой по амплитуде гармоники в CDW_{2c} фазе приводит к биениям осцилляций как зарядовой, так и спиновой плотности (см. Ур. (4.76) и (4.77)).

В $VЗП_x$ фазе с одним волновым вектором (CDW_c) зарядовая и спиновая плотность имеют простую косинусоидальную модуляцию (отсюда индекс "с"):

$$\begin{aligned}\rho_C^c(x) &= \nu_F(\Delta_+ + \Delta_-) \cos[(Q_0 + q_x)x + \phi_1] \\ \rho_S^c(x) &= \nu_F(\Delta_+ - \Delta_-) \cos[(Q_0 + q_x)x + \phi_1].\end{aligned}\tag{4.78}$$

Обе $VЗП_x$ фазы с одним и двумя волновыми векторами имеют два параметра порядка Δ_+ и Δ_- , связанных между собой уравнениями самосогласования и определяющих величину энергетической щели для разных компонент спина. Вблизи линии перехода эти два параметра порядка связаны между собой Ур. (4.41). Зарядовая модуляция $VЗП$ может быть экспериментально обнаружена по рентгеновскому или рамановскому рассеянию. Спиновую модуляцию можно обнаружить по рассеянию нейтронов или мюонов.

Энергетический спектр возбуждений в фазах CDW_c и CDW_{2c} также сильно различается. В $VЗП_x$ фазе с одним волновым вектором (CDW_c) энергетический спектр возбуждений (4.27) асимметричен по отношению к спиновым компонентам σ , поскольку для них различна величина энергетической щели Δ_σ (см. Рис. 4.5b). Это означает, что во внешнем электрическом поле спиновый ток возникает в дополнение к зарядовому току, поскольку заряд переносится электронами с преимущественно одной спиновой компонентой. Степень поляризации тока зависит от сдвига волнового вектора $VЗП$, и, следовательно, поляризацией тока можно управляться с помощью внешнего магнитного поля. Это свойство CDW_c фазы может найти применение в спинтронике. CDW_{2c} фаза симметрична по спиновым компонентам, и ее энергетический спектр имеет по крайней мере две щели для каждой компоненты спина (см. Рис. 4.5c). Симметрия (4.50) сохраняется в CDW_{2c} фазе, в то время как в CDW_c фазе эта симметрия спонтанно нарушена. Из-за различий в энергетическом спектре, CDW_c и CDW_{2c} фазы существенно различаются по термодинамическим, транспортным и оптическим свойствам.

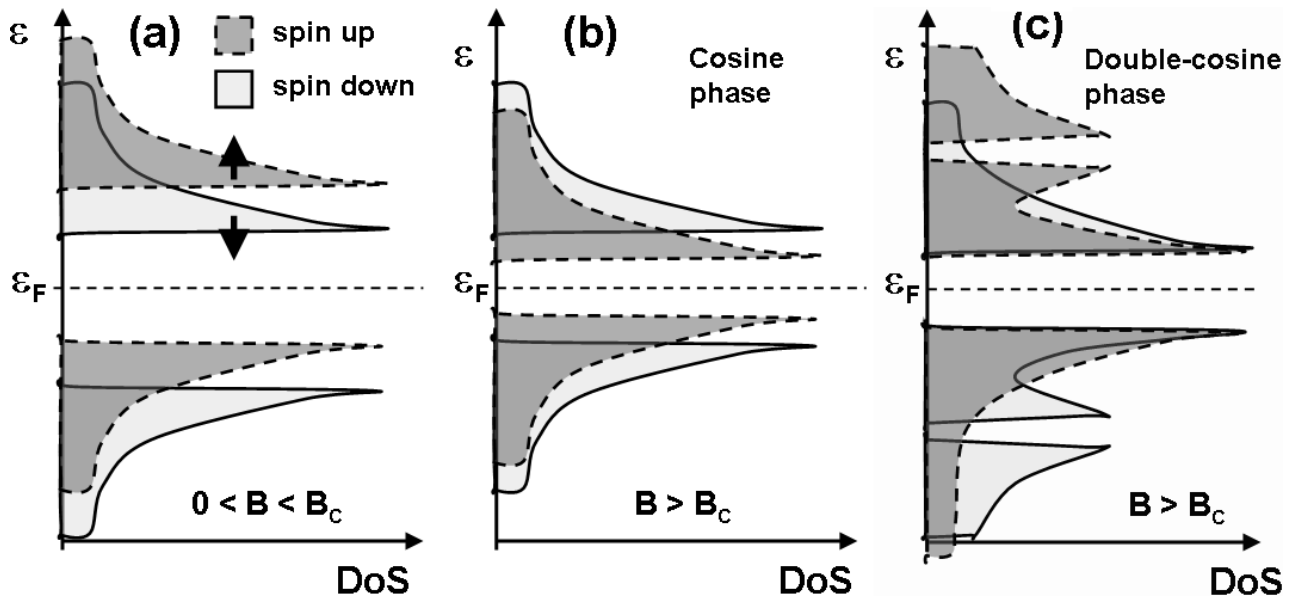


Рисунок 4.5: Схематическое изображение плотности электронных состояний в CDW_0 (Рис. а), CDW_c (Рис. б) и CDW_{2c} фазах (Рис. в). Плотность состояний в CDW_c фазе (Рис. б) имеет одну энергетическую щель на уровне Ферми для каждой спиновой ориентации, но значения этой щели различно для электронов со спином вверх и вниз. Плотность состояний в CDW_{2c} фазе (Рис. в) имеет по крайней мере две энергетических щели для каждой ориентации спина, причем наибольшая из этих двух щелей находится на уровне Ферми. Это выполняется для спин-вверх и спин-вниз электронов, но для разных компонент спина соответствует ВЗП конденсатам при различных волновых векторах.

Плотность состояний в ВЗП₀ (CDW₀) фазе (Рис. 4.5а) совпадает с изображенной на рис. 3а,б статьи [222]. Однако, когда магнитное поле превышает критическое поле ($B > B_c$), т.е. в ВЗП_x фазе, плотность состояний (изображенная на Рис. 4.5б,с) существенно отличается от той, что предложена в статье [222]. Согласно Рис. 3д статьи [222] плотность состояний для каждой компоненты спина имеет одну энергетическую щель на уровне Ферми, причем величина этой щели является одинаковой для обеих ориентаций спина, а плотности состояний электронов для спина вверх и вниз отличаются только по величине. Ситуация, изображенная на Рис. 3с статьи [222] и соответствующая ВЗП₀ состоянию без щели на уровне Ферми в магнитном поле $B > \Delta_0/\mu_B$, не появляется вообще, так как в таком сильном магнитном поле рассмотренные выше фазы CDW_c и CDW_{2c} энергетически более выгодны.

При низкой температуре $T \ll T_c$ разложение в Ур. (4.45) нельзя ограничить первыми членами (строго говоря, оно может быть вообще не применимо), и дополнительные гармоники $\mathbf{Q} + (2n + 1)\mathbf{q}_x$ с целым числом n будут появляться в решении уравнений согласования для CDW_{2c} состояния. Эти гармоники делают модуляцию ВЗП в CDW_{2c} фазе при низкой температуре существенно несинусоидальной в пространстве и, возможно, содержащей солитонные стенки, как предсказано в статье [201]. Кроме обычных (типичных для теории БКШ) парных возбуждений с энергией активации 2Δ , низкоэнергетические возбуждения в ВЗП могут включать много электронов и сопровождаться "солитонными" стенками в координатной зависимости параметра порядка $\Delta_\sigma(x)$. Эти возбуждения в ВЗП, несоизмеримой с кристаллической решеткой, имеют спин $1/2$, нулевой заряд и энергию $2\Delta/\pi$ на одну одномерную проводящую цепочку молекул [244]. Согласно статье [201], во внешнем магнитном поле возникновение таких возбуждений может стать энергетически выгодной при $H > 2\Delta_0/\pi$, что соответствует фазовому переходу от ВЗП₀ к ВЗП_x. В настоящее время нет полного решения этой проблемы при ненулевой температуре или неидеальном нестинге. Проведенный в статье [209] расчет при плотности электронов, близкой к половине заполнения зоны проводимости, не описывает должным образом случай несоизмеримой ВЗП вдали от половины заполнения зоны проводимости (в частности, она учитывает только ВЗП_x с одним волновым вектором, то есть только CDW_c фазу).

Проблема количественного описания перехода (или вероятнее кроссовера) при понижении температуры от CDW_{2c} фазы, описанной выше, к солитонной фазе, описанной в статье [201], требует дополнительного исследования. Тем не менее следует отметить, что параметр порядка в CDW_{2c} фазе имеет структуру, близкую к солитонной фазе,

рассмотренной в статье [201]. Кроме этого, у этих двух фаз для каждой компоненты спина имеется по две энергетических щели в спектре возбуждений.

При квазиодномерном законе дисперсии в Ур. (4.11) и (4.12), можно ожидать следующую качественную картину перехода от ВЗП₀ к ВЗП_x фазе, близкую к описанному выше переходу немного ниже $T_c(H)$ и к переходу из ВЗП₀ к солитонной фазе при низкой температуре [38, 201]. Переход к солитонной фазе возникает когда становится выгодным образование солитонной стенки, на которой параметр порядка меняет знак и которая размазана на масштабе длины когерентности ВЗП $\xi \sim \hbar v_F / \Delta(T)$. При увеличении магнитного поля, плотность солитонных стенок также увеличивается, а параметр порядка постепенно переходит к сглаженному (на масштабе ξ) ступенчатому профилю $\Delta(x) \sim sn(x/\xi)$ [38], близкому к описанному в CDW_{2c} фазе косинусоидальному профилю. При идеальном нестинге, граница между CDW₀ и CDW_{2c} фазами может быть получена качественно (феноменологически) при произвольных температуре как плавная кривая, соединяющая вычисленную линию перехода вблизи $T_c(H)$ на Рис. 4.3 и точку $H_c = 2\Delta_0/\pi \approx 1.1T_{c0}$, полученную на основе солитонной модели [201] при идеальном нестинге. Такая фазовая диаграмма изображена на Рис. 4.6. При неидеальном нестинге и в магнитном поле, точка перехода от ВЗП₀ к солитонной фазе пока не вычислена.

При квазиодномерном законе дисперсии в Ур. (4.11) и (4.12), ВЗП_x фаза с одной гармоникой появляется только в небольшой области вблизи тройной критической точки, как показано на Рис. 4.3. В случае идеального нестинга при $T \rightarrow 0$ эта фаза всегда неустойчива относительно формирования двойной модуляции, соответствующей CDW_{2c} фазе. Однако, наблюдение CDW_c фазы было бы очень интересным из-за ее спиновой асимметрии, проявляющейся в термодинамических и транспортных свойствах. Возможно, существует такой закон дисперсии электронов, отличный от Ур. (4.11) и (4.12), при котором косинусоидальная CDW_c фаза имела бы более широкую область на фазовой диаграмме.

Наши результаты направлены на то, чтобы помочь анализировать довольно сложную фазовую диаграмму ВЗП в сильном магнитном поле, которая наблюдается во многих органических металлах, таких как α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄ [210, 211, 212, 213, 214, 215, 216, 217, 218, 225], в (Per)₂M(mnt)₂ (где M обозначает Au, Pt, Cu) [219, 220, 221, 222, 223] и в других соединениях, где переход от ВЗП₀ к высокополевой фазе ВЗП_x может наблюдаться в экспериментально доступном магнитном поле.

Вышеуказанные исследования также могут быть применены для ВЗП в неорганических соединениях (достижимые магнитные поля в импульсных магнитах

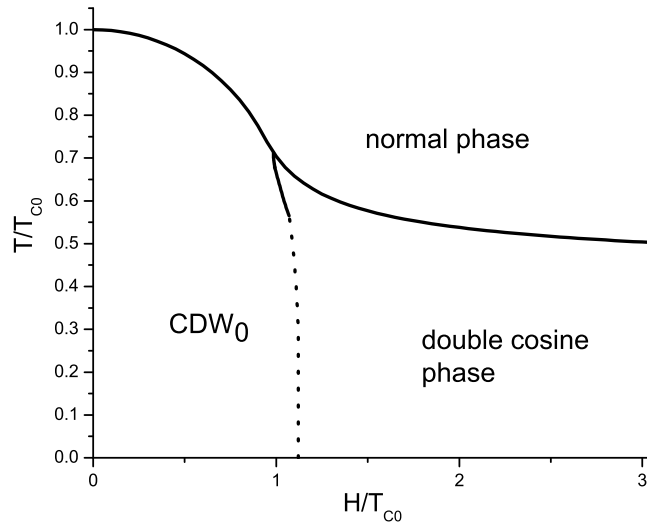


Рисунок 4.6: Фазовая диаграмма в координатах $H - T$ при идеальном нестинге во всей области ВЗП при $\nu = 0.7$. Сплошная линия была вычислена из Ур. (4.36), (4.55),(4.56),(4.42) and (4.51). Область фазы CDW_c , изображенная на Рис. 4.3, является настолько узкой, что она не заметна в масштабе всей фазовой диаграммы. Пунктирная линия - это плавная кривая, соединяющая вычисленную границу CDW_0 - CDW_{2c} вблизи T_c и точку $H_c = 2\Delta_0/\pi \approx 1.12T_{c0}$ при $T = 0$, разделяющую ВЗП₀ и солитонную фазы согласно [201, 38].

уже сравнимы с температурой перехода в некоторых из этих соединений). Хотя наше исследование CDW_{2c} фазы с двумя векторами ВЗП действует только вблизи линии перехода $T_c(H)$, где отношение Δ_σ/T_c мало, результаты, полученные в этой области позволяют сделать некоторые важные выводы о структуре и фазовой диаграмме ВЗП в сильном магнитном поле. Точное количественное описание и сравнение с экспериментальными наблюдениями в работах [210, 211, 212, 213, 214, 215, 216, 217, 218, 219, 220] может потребовать подстановки более реалистичного электронного закона дисперсии для каждого соединения в формулы, выведенные выше. Даже с упрощенным законом дисперсии в Ур. (4.11) и (4.12), наше исследование объясняет несколько качественных черт состояния с ВЗП в сильном магнитном поле.

Подводя итог этого раздела, в рамках теории среднего поля мы развили теоретическое описание для волны зарядовой плотности (ВЗП) в магнитном поле. Наша теория учитывает неидеальный нестинг поверхности Ферми и сдвиг волнового вектора ВЗП, что дает возможность детального изучения микроскопической структуры, свойств и фазовой диаграммы ВЗП в сильном магнитном поле ниже температуры перехода. Мы описали микроскопическую структуру и базовые свойства двух возможных состояний ВЗП в сильном магнитном поле: с одним смещенным волновым вектором и с двумя волновыми векторами. В частности, мы предлагаем интересную особенность ВЗП_x фазы с одним волновым вектором – спиновой асимметрии, которая позволяет создать управляемый спиновый ток. Однако, согласно полученной нами фазовой диаграмме, область существования такой ВЗП_x фазы с одним волновым вектором достаточно узкая, потому что в сильном поле ВЗП_x фаза с двумя волновыми векторами энергетически более выгодна, а в слабом поле энергетически более выгодна обычная ВЗП без спиновой асимметрии. Наш анализ дает связь между предыдущими теоретическими результатами на основе расчета восприимчивости [208] и солитонными решениями при нулевой температуре [201, 38]. Мы показали, что переход от обычной ВЗП₀ к высокополевой ВЗП_x имеет первый род и сопровождается значительным скачком энергетической щели в электронном спектре и вектора ВЗП, что приводит к сильному гистерезису. Этот факт наблюдается во многих экспериментах на α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄ и раньше не был обоснован теоретически. Мы показали, что ВЗП_x состояние при высоком магнитном поле имеет преимущественно модуляцию с двумя волновыми векторами $Q_\pm = Q_0 \pm q_x$, где обычно $q_x \ll Q_0$. При идеальном нестинге ВЗП_x фаза с одним смещенным волновым вектором (CDW_c фаза) в рамках теории среднего поля существует только в очень узкой

области вблизи тройной критической точки (см. Рис. 4.3 и Рис. 4.6). Конечная вторая гармоника в квазиодномерном законе дисперсии электронов в Ур. (4.12), нарушающая условие нестинга, практически не меняет эту картину. Однако, более специфичные законы дисперсии или другие возмущения могут изменить фазовую диаграмму.

4.3 Солитонная фаза волны плотности, обусловленная неидеальным нестингом

Изложение этого раздела соответствует статье [274] (№ 15 в списке публикаций) и содержит некоторые выдержки из статей № 17 и 22 в списке публикаций). Основным результатом этого раздела является изучение возможности появления и области на фазовой диаграмме неоднородного (солитонного) состояния волны плотности для различных видов закона дисперсии электронов.

Разложение Гинзбурга-Ландау, и даже связанный с ним ренорм-групповой анализ волн плотности, не применимы при низкой (почти нулевой) температуре [233]. Поэтому в предыдущем разделе мы не смогли описать этим методом переходы между различными фазами ВЗП при нулевой температуре $T = 0$ при изменении магнитного поля, ограничившись лишь ссылкой на частное точное решение уравнений самосогласования для ВЗП в виде солитонной структуры [38, 201], которое дало нам точку перехода ВЗП₀-ВЗП_x при идеальном нестинге.

В этом разделе мы рассмотрим переход при нулевой температуре (квантовый переход) между разными фазами волны плотности, вызванный неидеальным нестингом и происходящий при изменении давления, которое слабо изменяет закон дисперсии. Такой переход наблюдается в различных органических металлах, например, в Бечгардовских солях с квазиодномерной кристаллической анизотропией (TMTSF)₂X (где X=PF₆ [234], AsF₆ [235], ClO₄ [243]), в α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄ [105] и др.

Этот переход был подробно исследован в (TMTSF)₂PF₆ в статье [232]. Согласно этой статье [232], фазовая диаграмма (TMTSF)₂PF₆ вблизи критического давления, $p_c \sim 9.4 \text{ kbar}$, имеет довольно сложный характер. Самым неожиданным результатом в [232] является открытие интервала давления ниже p_c , где волна спиновой плотности (ВСП) и металлическая фаза (или ВСП и сверхпроводимость (SC) при совсем низких температурах T) сосуществуют как параллельные домены, направленные перпендикулярно квазиодномерным цепочкам молекул в кристалле. Такое сосуществование является трудным для понимания, особенно с учетом перехода 1-го рода,

который происходит при постоянном давлении [232]. Ниже мы предлагаем, что такие домены могут быть интерпретированы как формирование новой фазы солитонных стенок, впервые предложенной теоретически для квазиодномерного (Q1D) спектра электронов в работах [197, 198, 236]. Сверхпроводящие домены внутри ВСП интервала наблюдались также в статье [237]. В следующей главе 5 мы увидим, что довольно естественно ожидать появление сверхпроводимости в этих доменах при более низкой температуре. В этом разделе мы ограничимся в основном эффектами, связанными с микроскопической структурой и фазовой диаграммой ВСП.

Ниже мы используем квазиодномерный закон дисперсии электронов в Ур. (4.11), не ограничиваясь только двумя гармониками в разложении сильной связи, как это было сделано в Ур. (4.12). Такой энергетический спектр электронов соответствует двум открытым гофрированным листам поверхности Ферми (ПФ). Этот закон дисперсии электронов мы для удобства перепишем в виде:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \pm v_F(p_x \mp p_F) + t_{\perp}(\mathbf{p}_{\perp}), \quad (4.79)$$

где v_F как и раньше скорость Ферми вдоль цепочек, а закон дисперсии в направлении, перпендикулярном цепочкам, мы разделим на две части:

$$t_{\perp}(\mathbf{p}_{\perp}) = t_b(\mathbf{p}_{\perp}) + t'_b(\mathbf{p}_{\perp}). \quad (4.80)$$

Первая большая часть $t_b(\mathbf{p}_{\perp})$ не нарушает условие идеального нестинга $\varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) = -\varepsilon(\mathbf{p})$, как и первый член в Ур. (4.12). Второй "антинестинговый" член $t'_b(\mathbf{p}_{\perp})$ в Ур. (4.80) нарушает условие идеального нестинга, как и второй член в Ур. (4.12). Увеличение t'_b имитирует увеличение прикладываемого давления. При достаточно больших t'_b ВСП исчезает. Условие

$$\langle t_b(\mathbf{p}_{\perp}) \rangle_{\mathbf{p}_{\perp}} = \langle t'_b(\mathbf{p}_{\perp}) \rangle_{\mathbf{p}_{\perp}} = 0 \quad (4.81)$$

предполагается, для сохранения числа электронов. Угловые скобки означают усреднение по p_{\perp} , $\langle \dots \rangle_{\mathbf{p}_{\perp}} \equiv \int (\dots) (b/2\pi) dp_{\perp}$.

Модель предполагает голое е-е взаимодействие в виде $u(\mathbf{Q})$ для ВЗП и в виде $u(\mathbf{Q})\sigma_1\sigma_2$ для ВСП. Это взаимодействие перенормируется после суммирования лестничных диаграмм:

$$U(\mathbf{Q}) = \frac{u(\mathbf{Q})}{1 + u(\mathbf{Q})\Pi(\mathbf{Q}, \omega_0)}. \quad (4.82)$$

Поляризационный оператор

$$\Pi(\mathbf{Q}, \omega) = T \sum_{\omega_n} \int \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^2} G(\mathbf{p}, \omega_n) G(\mathbf{p} - \mathbf{Q}, \omega_n - \omega) \quad (4.83)$$

пропорционален восприимчивости. Его значение велико вблизи вектора нестинга \mathbf{Q}_0 . Обычно этот вектор выбирается в виде

$$\mathbf{Q}_0 = (\pm 2p_F, \pi/b, \pi/c^*), \quad (4.84)$$

хотя большинство результатов ниже не изменяются, по крайней мере качественно, для других оптимальных волновых векторов \mathbf{Q}_0 . Для краткости, в (4.80) мы опустим зависимость от третьего направления вдоль оси z [238]. Это оправдано, поскольку электронная дисперсия вдоль оси z обычно слабее, чем вдоль оси y .

Когда знаменатель в (4.82) становится равным нулю, металлическая фаза является абсолютно неустойчивой по отношению к образованию волны плотности. Линия этой неустойчивости $T_c(t'_b, \mathbf{Q})$ дается известным уравнением (4.59), которое записывается в виде:

$$\ln \left(\frac{T_{c0}}{T_c} \right) = \text{Re} \left\langle \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{iW(\mathbf{Q}, p_\perp)}{4\pi T_c} \right) \right\rangle_{p_\perp} - \Psi \left(\frac{1}{2} \right), \quad (4.85)$$

где T_{c0} – это температура возникновения волны плотности при $t'_b = 0$, функция $W(\mathbf{Q}, p_\perp) = \hbar v_F(Q_x - 2k_F) + t_\perp(p_y) + t_\perp(p_y - Q_y)$, а $\Psi(x)$ – дигамма-функция. Ур. (4.85) анализировалось во многих статьях (см., например, [198, 227, 239, 240]). При нулевой температуре Ур. (4.85) переписывается в виде [198]

$$\langle \ln(\pi T_{c0}/\gamma W(\mathbf{Q}, p_\perp)) \rangle_{p_\perp} = 0, \quad (4.86)$$

где $\gamma \approx 1.781$ – постоянная Эйлера.

При увеличении давления значение t'_b также увеличивается, и при некотором критическом давлении, p_c , волна плотности может исчезнуть даже при нулевой температуре. Эту точку можно считать квантовой критической точкой (QCP). Однако, применение ренормализационной группы (РГ) [233] к анализу QCP в квазиодномерном случае встречает трудности, поскольку аналитического разложения Ур. (4.86) при малых $\mathbf{q} \equiv \mathbf{Q} - \mathbf{Q}_0$ не существует в силу условия (4.81).

Интеграл (4.86) является сходящимся при любом конечном \mathbf{Q} , и можно найти критические t'_b для общего вида $t_\perp(p_\perp)$. Это не обязательно происходит при $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0$, но при каком-то $\mathbf{Q}^* \equiv \mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}^*$ [227, 239]. Переход в такую новую фазу волны плотности (ВП) со "сдвинутым" волновым вектором (ВП₂ фазы) должен быть второго рода, что противоречит наблюдаемому переходу 1-го рода между ВП₂ и металлической фазой в [232].

Известно, что для строго одномерной модели ВП характер возбуждений отличается от обычного. Вместо электрон-дырочных пар с энергией возбуждения $\approx 2\Delta$,

распространяющиеся возбуждения являются солитонами (на которых параметр порядка $\Delta(x)$ локально отклоняется от однородного значения, например, меняет знак) [245, 244]. Такие солитонные возбуждения стоят меньшей энергии, чем возбуждения электрон-дырочных пар, и сопровождаются перестройкой целевого состояния ВП [245, 244]. В случае соизмеримой и несоизмеримой волны плотности, солитонные возбуждения могут различаться. В соизмеримой ВП существует больше различных типов солитонных возбуждений, в то время как в несоизмеримой ВП существуют только нейтральные (по электрическому заряду) солитоны со спином $1/2$ [244]. Примерами соединений с несоизмеримой ВП являются многие органические металлы. Например, $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ имеет на четверть заполненную зону проводимости и в этом соединении $2k_F = \pi/2a$. В отличие от ВЗП состояния в полиацетилене $(\text{CH})_x$, эффекты соизмеримости, не играют существенной роли здесь [241], так что единственными возбуждениями являются нейтральные солитоны со спином $1/2$ [244]. Ниже мы просто будем заимствовать результаты обширной литературы по солитонам в 1D цепочках (см. обзор [38]). Хотя эта литература посвящена физике волн зарядовой плотности (ВЗП), все результаты могут быть использованы практически без изменений и в случае волны спиновой плотности.

Затраты энергии на один солитон на *одиночной* 1D цепочке молекул $E_s = (2/\pi)\Delta_0$. Для цепочек, упакованных в кристалле, туннелирование $t_\perp(p_\perp)$ возникает между цепочками. Солитоны образуют протяженные состояния путем создания групп в поперечном направлении. Вместо независимых солитонов на разных цепочках, возникают солитонные стенки [197], причем солитоны заполняют два спиновых состояниях с $t_\perp(p_\perp) < 0$ в зоне. Затрата энергии $A(t_\perp)$ стенки на одну цепочку при этом уменьшается:

$$A(t_\perp) = (2/\pi)\Delta_0 - 2 \int_{t_\perp \leq 0} t_\perp(p_\perp) b dp_\perp / 2\pi. \quad (4.87)$$

Если эта энергия $A(t_\perp)$ становится отрицательной при достаточно большом t_\perp , то спонтанное возникновение солитонных стенок может стать энергетически выгодным. Это происходит когда выигрыш из-за кинетической энергии наполовину заполненной солитонной зоны, описываемый вторым членом в Ур. (4.87), компенсирует энергию солитонной стенки $E_s = (2/\pi)\Delta_0$ (на одну цепочку), связанную с координатной зависимостью параметра порядка и описываемую первым членом в Ур. (4.87).

Ур.(4.87) представляет нашу идею интерпретации фазовой диаграммы в органических металлах $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ (см. экспериментальные данные в [232]), в α -(BEDT-TTF) $_2\text{KHg}(\text{SCN})_4$ [105] и возможно некоторых других: с повышением давления система сначала достигает критического давления, p_{c1} , при котором $A(t_\perp) = 0$, и затем плавно, по

мере повышения концентрации солитонных стенок, переходит в солитонную фазу (SP). При некотором более высоком давлении p_c происходит уже фазовый переход первого рода в металлическую фазу.

Для описания последовательности таких переходов, необходимо выражение для энергии солитонную фазы. Эта задача была решена в [198] для ВЗП упорядочения и для "прямого" вектора нестинга $\mathbf{Q}_0 = (\pm 2k_F, 0)$. Результаты для ВЗП могут применяться и к ВСП. Не останавливаясь на доказательстве, отметим, что калибровочное преобразование волновых функций, как в [198], удаляет большие и удовлетворяющие условию нестинга члены в $t_b(p_\perp)$ из всех выражений ниже. Как результат, только "антинестинговый" член $t'_b(p_\perp)$ входит в Ур. (4.87): $t_\perp(p_\perp) \rightarrow t'_b(p_\perp)$. В приближении сильной связи (разложении $t_b(p_\perp)$ по гармоникам) это означает, что при $\mathbf{Q} = (2k_F, \pi/b, \pi/c^*)$ в $t'_b(p_\perp)$ входят только четные гармоники, начиная со второй.

Мы теперь запишем выражение для линейной плотности энергии W_{SP} солитонной фазы [198] в пределе большого расстояния между солитонными стенками и нулевой температуре $T = 0$:

$$W_{SP} = -\frac{\Delta_0^2}{2\pi\hbar v_F} + n_s A(t'_b) + n E_-^2 B, \quad (4.88)$$

где n – линейная плотность солитонных стенок, а член E_-^2 в Ур. (4.88) соответствует экспоненциально затухающему взаимодействию между солитонными стенками. Действительно, в пределе больших расстояний между стенками линейная плотность этих стенок связана с E_-^2 соотношением (см. [198] или обзор [38], стр. 165)

$$n_s = \frac{E_+/\hbar v_F}{K\left(\sqrt{1 - E_-^2/E_+^2}\right)} \approx \frac{\Delta_0/\hbar v_F}{\ln(4\Delta_0/E_-)}, \quad (4.89)$$

где $E_+ \approx \Delta_0$ при $n_s \rightarrow 0$ и $K(r)$ – полный эллиптический интеграл 1-го рода. Ур. (4.89) дает

$$E_- \approx 4\Delta_0 \exp(-\Delta_0/\hbar v_F n_s). \quad (4.90)$$

$A(t'_b)$ дается Ур. (4.87) с $t_\perp(p_\perp) = t'_b(p_\perp)$, и

$$B(t_\perp) = \frac{1}{2\pi\Delta_0} - \frac{b/2\pi}{|dt'_b/dp_\perp|_0}, \quad (4.91)$$

где $|dt'_b/dp_\perp|_0$ – это значение поперечной скорости при четырех значениях p_\perp , где $t'_b(p_\perp) = 0$. При $B > 0$ прохождение через точку $A(t'_b) = 0$ соответствует переходу второго рода от "однородной" ВП к состоянию с решеткой солитонных стенок. $B < 0$ будет означать резкий фазовый переход первого рода при $A(t'_b) = 0$ [198]. Все результаты (4.87-4.91) выведены для $T = 0$.

Итак (см. обзор [38]), в солитонной фазе ВП параметр порядка зависит от координаты вдоль проводящих цепочек: $\Delta(x) \approx \Delta_0 \text{sn}(x/\xi_{DW})$, где $\text{sn}(y)$ - функция эллиптического синуса. В результате формируются периодически расположенные солитонные стенки шириной $\xi_{DW} = \hbar v_F / \pi \Delta_0$, на которых параметр порядка ВП меняет знак. Каждая солитонная стенка вносит одну (на проводящую цепочку) заряженную электроно-подобную квазичастицу на уровне Ферми. Для достаточно высокой линейной концентрации n_s солитонных стенок квазичастицы на соседних солитонных стенках перекрываются, образуя новую зону проводимости на уровне Ферми в середине энергетической щели ВП. Закон дисперсии в этой солитонной зоне дается формулой [198, 274]

$$E(\mathbf{k}) = E(k_x) + \varepsilon_+(k_y), \quad (4.92)$$

где перпендикулярная к проводящим цепочкам часть закона дисперсии дается "антинестинговым" членом в законе дисперсии (4.12):

$$\varepsilon_+(\mathbf{k}_\perp) = [t_\perp(\mathbf{k}_\perp) + t_\perp(\mathbf{k}_\perp - \mathbf{Q}_\perp)] / 2 \approx 2t'_b \cos(2k_y b). \quad (4.93)$$

Закон дисперсии $E(k_x)$ вдоль проводящих цепочек найден в статье [278] (см. рис. 1 в статье [278]), и для качественного анализа он может быть аппроксимирован функцией

$$E(k_x) \approx E_- \sin[\pi(|k_x| - k_F) / 2\kappa_0]. \quad (4.94)$$

Ширина солитонной зоны E_- и ее граница $\kappa_0 = \pi n_s / 2$ в импульсном пространстве связаны с линейной концентрацией n_s солитонных стенок [278], которая сильно зависит от анти-нестингового члена в законе дисперсии электронов и, следовательно, от давления. При небольшой концентрации солитонов $n_s \rightarrow 0$ ширина солитонной зоны дается Ур. (4.90). Граница солитонной зоны в импульсном пространстве имеет линейную малость по концентрации солитонных стенок, $\kappa_0 = \pi n_s / 2$, и ширина солитонной зоны E_- является экспоненциально малой для малых n_s . При большой концентрации солитонов $n_s \sim 1/\xi_{DW}$ и $E_- \sim \Delta_0$. Чтобы найти E_- и ее зависимость от давления нужно минимизировать полную энергию солитонной фазы.

Дифференцирование Ур. (4.88) по отношению к E_- дает оптимальное значение E_- , которое минимизирует энергию (4.88):

$$E_-^2 = -A \left(t'_b \right) / \left[B \left(t'_b \right) (2 \ln(4\Delta_0/E_-) + 1) \right]. \quad (4.95)$$

Эта ширина сильно зависит от закона дисперсии $\varepsilon_+(k_y) \equiv t'_b(k_y)$ в солитонной зоне. Для

дисперсии в Ур. (4.12) уравнения (4.87) и (4.91) дают

$$A(t'_b) = (2/\pi) (\Delta_0 - 2t'_b), \quad (4.96)$$

$$B(t'_b) = \frac{1}{2\pi\Delta_0} - \frac{1}{4\pi t'_b}. \quad (4.97)$$

Случайное вырождение, означающее что $A(t'_b)$ и $B(t'_b)$ обращаются в ноль в одной точке $2t'_b = \Delta_0$, является следствием конкретного закона дисперсии электронов в Ур. (4.12). В реальных соединениях это вырождение всегда снято высшими гармониками в дисперсии (4.12). В присутствии случайного вырождения (4.97), ширина солитонной зоны при $P \rightarrow P_{c1}$ (то есть, на $\Delta_0 \rightarrow 2t'_b$) уменьшается очень медленно:

$$E_- \approx \frac{2\Delta_0}{\sqrt{2 \ln(4\Delta_0/E_-) + 1}} \sim \Delta_0, \quad (4.98)$$

что означает резкий (хотя и второго рода) переход от однородной ВП к солитонной фазе. Без случайного вырождения (4.96),(4.97) мы имеем

$$E_- \sim \sqrt{\Delta_0 \delta} \equiv \sqrt{\Delta_0 (2t'_b - \Delta_0)} \propto \sqrt{P - P_{c1}}. \quad (4.99)$$

Количественная оценка зависимости $E_-(P)$ требует более точного расчета взаимодействия (4.91) между солитонными стенками.

Теперь мы вернемся к Ур. (4.85). Это уравнение определяет линию абсолютной неустойчивости металлического состояния по отношению к образованию ВП, или другими словами линию перехода 2-го рода между металлом и ВП. При низкой температуре, для большинства $t'_b(p_\perp)$ моделей это соответствует некоторому "сдвинутому" вектору \mathbf{Q}^* ВП. Как было отмечено выше, экспериментально [232] переход металл-ВП при более низкой температуре 1-го рода. При этих температурах линия, определяемая Ур. (4.85), имеет смысл только линии "переохлаждения".

Положения критических точек p_c и p_{c1} существенно зависят от конкретного вида закона дисперсии $t'_b(p_\perp)$ в направлении, перпендикулярном цепочкам. Функция $t'_b(p_\perp)$ в $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$, как и в других реальных материалах, точно не известна. Поэтому, для качественного анализа мы применяем выражения (4.88)-(4.99) в режиме *плотной* солитонной фазы, когда линейная плотность солитонных стенок может быть сравнима с их обратной шириной. Сначала сравним два простых примера, допускающих аналитический расчет. Во-первых, рассмотрим упрощенную модель, в которой $t'_b(p_\perp)$ имеет периодическую ступенчатую форму:

$$t'_b(p_\perp) = \begin{cases} 2t'_b, & 0 < p_\perp < \pi/b \\ -2t'_b, & \pi/b < p_\perp < 2\pi/b. \end{cases} \quad (4.100)$$

Во-вторых, рассмотрим приближение сильной связи, оставив только первые две гармоники (третья гармоника, как и первая, не нарушает условие идеального нестинга и не влияет на фазовую диаграмму):

$$t'_b(p_\perp) = 2t'_b \cos(2p_\perp b). \quad (4.101)$$

Мы рассчитали энергию солитонной фаз для обеих функций $t'_b(p_\perp)$. Также вычислялись оптимальные значения $E_-(n_s)$, чтобы найти минимум энергии (4.88) солитонной фазы. Для закона дисперсии (4.100) энергия доменной стенки $A(t'_b)$ становится отрицательной при $t'_b \geq t_{c1} \approx 0.32\Delta_0$. Эта точка соответствует переходу 2-го рода из однородной волны плотности в солитонную фазу. Затем мы сравнили энергию солитонной фазы W_{SP} с энергией металлической фазы, $W_n = -(1/\pi\hbar v_F) \langle [t'_b(p_\perp)]^2 \rangle_{p_\perp}$, и нашли точку $t_c \approx 0.54\Delta_0$, где эти две энергии становятся равными. Эта точка соответствует фазовому переходу первого рода из солитонной фазы (SP) к нормальной металлической фазе. Мы видим, что интервал $t_c - t_{c1} \approx 0.4t_c$ существования солитонной фазы для данной модели достаточно большой. Можно показать, что для модели, описанной в Ур. (4.87)-(4.91), функция (4.100) соответствует наибольшему возможному интервалу солитонной фазы.

Для второго дисперсионного соотношения (4.101) аналогичный расчет дает равные значения для t_c и для t_{c1} : $t_c = t_{c1} = \Delta_0/2$, т.е. в этом случае интервал для солитонной фазы отсутствует. Это еще раз свидетельствует о высокой чувствительности фазовой диаграммы ВП к конкретному виду $t'_b(p_\perp)$.

В эксперименте на $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ в статье [232] разница $t_c - t_{c1} \approx 0.1t_c$ соответствует промежуточному случаю между Ур. (4.100) и Ур. (4.101), более близкому к закону дисперсии в приближении сильной связи (4.101), чем к ступенчатому как в Ур. (4.100). Отношение $(t_c - t_{c1})/t_c \approx 0.1$, наблюдаемое в эксперименте [232] может быть легко подогнано в рамках нашей модели в Ур. (4.87)-(4.91) соответствующим выбором функции $t'_b(p_\perp)$, например, путем добавления четвертой гармоники в Ур. (4.101).

На Рис. 4.7 схематически показана фазовая диаграмма волны плотности вблизи квантовой критической точки. Сплошная линия обозначает переход первого рода между металлом и солитонной фазой. Пунктирная линия (из точек) обозначает переход второго рода между однородной фазой ВП и солитонной фазой (обозначаемой на рисунке SP). Штриховая линия представляет линию абсолютной неустойчивости металла по отношению к формированию ВП. При более высоких температурах эта линия представляет линию перехода второго рода между ВП и металлическим состоянием. При более низкой температуре штрихпунктирная линия имеет только смысл линии переохлаждения. Нижний заштрихованный прямоугольник показывает область, где

возникает сверхпроводимость. Вопросы возникновения сверхпроводимости на фоне ВП рассмотрены в главе 5. Верхний заштрихованный прямоугольник показывает область высокотемпературной солитонной фазы, где существенные количественные отклонения от формул (4.87)-(4.91) возникают из-за тепловых возбуждений в ВП и солитонной фазе. Строго говоря, выполненный в Ур. (4.87)-(4.91) расчет энергии солитонной фазы применим только при нулевой температуре. Однако, при высокой температуре чуть ниже линии перехода металл-ВП применимо разложение Гинзбурга-Ландау (см. раздел 4.2 ранее). Вероятно, это разложение может помочь и в заштрихованной высокотемпературной области на Рис. 4.7. Наклон пунктирной линии перехода второго рода возле $T = 0$ происходит потому, что при $T \neq 0$ второй член в $A(t_{\perp})$ уменьшается за счет тепловых возбуждений внутри доменной стенки из занятой части $t'_b(p_{\perp}) < 0$ солитонной зоны. Этот температурный наклон зависит от функции $t'_b(p_{\perp})$.

В статье [232] фазовую диаграмму $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ изучали путем измерения сопротивления вдоль направления цепочек. Характер перехода 1-го рода между металлом и волной плотности следует из эффектов гистерезиса, в то время как появление доменов определялось по изменениям в поведении удельного сопротивления вблизи p_c . Мы также предлагаем, что линия перехода 2-го рода между диэлектрической однородной волной плотности и солитонной фазой может быть обнаружена путем измерения резкого изменения анизотропии проводимости вблизи этого перехода [236] (см. также раздел 4.3 для более подробного рассмотрения этого вопроса). Действительно, согласно [236], при низких n_s (большое расстояние между доменными стенками) проводимость вдоль направления цепочек остается очень низкой из-за экспоненциально малого перекрытия волновых функций электрона на соседних стенках. Что касается поперечной проводимости, то она будет увеличиваться линейно с ростом n_s .

Значение t'_b само по себе является не единственным параметром, который определяет зависимость от давления. Выражение для $B(t_{\perp})$ в Ур. (4.91) существенно зависит от $|dt'_b/dp_{\perp}|_0$. B -член не является аналитическим при $t'_b \rightarrow 0$; изменение его знака сразу изменяет всю физику [198].

На Рис. 4.7 линия перехода в сверхпроводящее состояние, обнаруженная экспериментально возле p_c и в металлической фазе при более низких температурах ($T_c \sim 1K$) [232, 272], показана лишь схематично. Ее появление неизбежно в рамках нестинговой модели среднего поля. Действительно, логарифмическая сингулярность, которая входит в выражение для поляризационного оператора ВП (4.83), будет также возникать для куперовского канала [242]. При более высоких температурах

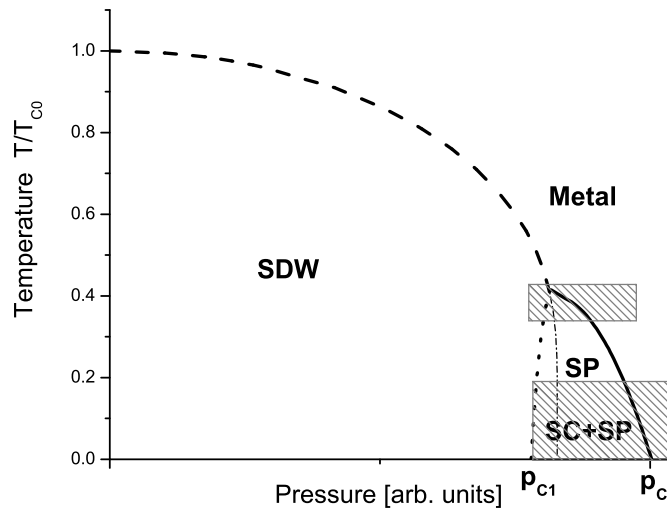


Рисунок 4.7: Схематическое изображение фазовой диаграммы волны плотности (ВП). Сплошная линия обозначает переход первого рода между металлом и солитонной фазой. Пунктирная линия (из точек) обозначает переход второго рода между однородной фазой ВП и солитонной фазой (обозначаеваемой на рисунке SP). Штриховая линия представляет линию абсолютной неустойчивости металла по отношению к формированию ВП. При более высоких температурах эта линия представляет линию перехода второго рода между ВП и металлическим состоянием. При более низкой температуре штрихпунктирная линия имеет только смысл линии переохлаждения. Нижний заштрихованный прямоугольник показывает область, где возникает сверхпроводимость. Вопросы возникновения сверхпроводимости на фоне ВП рассмотрены в главе 5. Верхний заштрихованный прямоугольник показывает область высокотемпературной солитонной фазы, где существенные количественные отклонения от формул (4.87)-(4.91) возникают из-за тепловых возбуждений в ВП и солитонной фазе. Строго говоря, выполненный в Ур. (4.87)-(4.91) расчет энергии солитонной фазы применим только при нулевой температуре. Однако, в этой высокотемпературной области применимо разложение Гинзбурга-Ландау (см. раздел 4.2 ранее). Детальная форма всех линий чувствительна к выбору "антинестингового" члена $t'_b(p_{\perp})$ (см. текст).

ВП преобладает, потому что голое взаимодействие, $u(\mathbf{Q})$, было выбрано так, чтобы быть больше для поперечного вектора \mathbf{Q}_\perp . Однако, с увеличением давления "антинестинговый" член t'_b растет и ВП становится подавленной, а сверхпроводимость, которая не чувствительна к виду t'_b , наконец, становится более выгодной. Удивительно, что T_{SC} для перехода в сверхпроводящее состояние согласно эксперименту не подавляется формированием солитонной фазы ВП, а напротив, увеличивается [232, 272]. Мы объясняем этот факт качественно, предположив, что длина когерентности сверхпроводимости, $\xi_0 \sim \hbar v_F / T_{SC}$, значительно больше, чем ожидаемая периодичность для параметра порядка в солитонной фазе $\hbar v_F / \Delta_0 \sim \hbar v_F / T_0$, что приводит к существенной джозефсоновской связи между солитонными стенками. Однако, проблема нуждается в дальнейшем анализе, чему посвящена глава 5.

Итак, мы показали, что в окрестностях квантовой критической точки в квазиодномерных слоистых проводниках, таких как Бечгардовские (Bechgaard) соли, мы встречаемся с новой фазой солитонных стенок. Когда давление повышается с $p = 0$, система пересекает линию p_{c1} фазового перехода второго рода и вступает в состояние с периодической солитонной структурой параметра порядка ВП с характерным зависящим от давления периодом порядка $\hbar v_F / \Delta_0 \sim 10^3 \text{ \AA}$. При более высоком давлении, p_c , фазовым переходом первого рода система переходит в металлическое состояние. Детали фазовой диаграммы сильно зависят от материальных параметров, в частности от формы "антинестингового" члена в законе дисперсии электрона.

4.4 Изменение анизотропии проводимости при переходе в состояние с частичной волной плотности

В этом разделе будет рассмотрено, какую информацию о микроскопической структуре состояния с волной плотности (ВП) можно получить экспериментально, наблюдая изменение анизотропии проводимости при переходе из металлического состояния в состояние с ВП. Будет рассматриваться случай неидеального нестинга поверхности Ферми (ПФ), когда при таком переходе в ВП сохраняется металлическая проводимость, то есть часть электронных состояний остается на уровне Ферми.

4.4.1 Однородная волна плотности с зависящей от импульса щелью

В случае возникновения однородной волны плотности с вектором \mathbf{Q}_0 и зависящей от импульса (и от температуры) щелью $\Delta^2(T, \mathbf{k})$, новый закон дисперсии квазичастиц дается Ур. (4.10). Если исходный закон дисперсии электронов $\varepsilon(\mathbf{k})$ обладал некоторой симметрией \mathcal{S} при поворотах, например, изотропией в проводящей плоскости, а щель ВП $\Delta^2(T, \mathbf{k})$ этой симметрией не обладает, то при образовании ВП возникает спонтанное нарушение не только трансляционной симметрии, связанной с волновым вектором ВП, но и симметрии \mathcal{S} . Это также относится к ситуациям, когда исходная симметрия \mathcal{S} была не строгой, а приближенной, то есть она была очень слабо нарушена каким-то малым возмущением, а в результате образования ВП становится сильно нарушенной. Поскольку большинство материалов не обладают идеальным нестингом ПФ, такое нарушение симметрии волной плотности является довольно распространенным явлением и может дать информацию о зависимости щели ВП от импульса. Это очень важная информация, позволяющая глубже понять микроскопическую структуру ВП и строить дальнейшие более сложные модели описания сильно коррелированных электронных систем. На данный момент, единственным методом экспериментального определения зависимости параметра порядка от импульса является фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES)[5]. Однако, как было указано во введении, в очень многих соединениях измерения ARPES затруднены или невозможны, например, из-за трудностей в получении атомно-гладких поверхностей. Погрешность измерений ARPES обычно достаточно велика и составляет в лучшем случае порядка 0.01эВ; поэтому даже если измерения ARPES доступны, они не позволяют проследить многие важные эффекты, такие как тонкая перестройка поверхности Ферми, возникающая в результате различного рода фазовых переходов в электронной системе. Кроме этого, метод ARPES в силу своей специфики позволяет достаточно хорошо определять электронные свойства в сечении поверхности Ферми (ПФ), параллельном плоскости исследуемого образца, и не позволяет определить свойства ПФ в направлении, перпендикулярном данной плоскости. Поэтому любой альтернативный метод изучения электронной структуры сильно коррелированных соединений оказывается очень полезным.

В принципе, изменение анизотропии проводимости может давать информацию о зависимости параметра порядка от импульса даже в том случае, когда никакая дополнительная симметрия не нарушается образованием зависящей от импульса щели

на уровне Ферми. Извлечение этой зависимости по анизотропии скачка проводимости требует более аккуратного расчета. В любом случае, определение зависимости параметра порядка ВП от импульса по анизотропии скачка (изменения) проводимости при переходе в ВП требует знания (хотя бы приближенного) исходных поверхности Ферми и закона дисперсии. Это не позволяет вывести универсальную формулу для данного эффекта. Ниже мы проиллюстрируем, как работает этот метод на примере трителлуридов редкоземельных металлов. Дальнейшее изложение этого раздела соответствует статье [273] (№ 16 в списке публикаций диссертанта).

Недавно, новое семейство квази-двумерных соединений – редкоземельных трителлуридов $R\text{Te}_3$ (где $R=Y, \text{La}, \text{Ce}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Ho}, \text{Dy}, \text{Er}, \text{Tm}$) вызвал всплеск научно-исследовательской деятельности [250, 251, 252]. Эти слоистые соединения имеют слабо ромбическую кристаллическую структуру (пространственная группа $Cmcm$). Они образованы двойными слоями номинально квадратных листов атомов Te, разделенных гофрированными слоями $R\text{Te}$. В этой пространственной группе ось b перпендикулярна слоям Te. Для всей серии редкоземельных металлов R , эти системы демонстрируют волну зарядовой плотности (ВЗП), несоизмеримую с кристаллической решеткой (с волновым вектором $\mathbf{Q}_{CDW1} = (0, 0, \sim 2/7c^*)$) и возникающую при достаточно высокой температуре [252, 253]. Соответствующий Пайерлсовский переход происходит при температуре выше 300 К. Для легких атомов ($\text{La}, \text{Ce}, \text{Nd}$) это единственный переход в ВЗП, а для более тяжелых R ($\text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}$) второй переход в ВЗП происходит при низкой температуре с волновым вектором $\mathbf{Q}_{CDW2} = (\sim 2/7a^*, 0, 0)$, перпендикулярным \mathbf{Q}_{CDW1} . Семейство $R\text{Te}_3$ может рассматриваться как модельная система, в которой структура ВЗП основного состояния может быть теоретически исследована [254]. Например, на фазовой диаграмме (в зависимости от параметра электрон-фононного взаимодействия) было получено состояние с двунаправленной ВЗП (шахматная доска), если температура ВЗП перехода достаточно низкая, в то время как состояние с однонаправленной ВЗП (полосатая структура), как это наблюдается экспериментально, происходит при более высокой температуре перехода [254]. Этот результат является актуальным для более глубокого понимания структуры зарядового упорядочения в сильно коррелированных материалах, например, с двунаправленной ВЗП в слабо допированных (underdoped) купратах [255].

Слоистые соединения $R\text{Te}_3$ проявляют сильную квазидвумерную анизотропию удельного электрического сопротивления: вдоль оси b оно, как правило, в ~ 40 раз больше, чем в плоскости (a, c) при температуре вблизи T_{CDW1} , и при дальнейшем

понижении температуры эта анизотропия усиливается [256]. При этом, выше T_{CDW1} удельное электрическое сопротивление в проводящей плоскости (a, c) изотропно.

Ниже Пайерлсовского перехода, во всех $R\text{Te}_3$ соединениях поверхность Ферми лишь частично покрыта энергетической щелью, в результате чего сохраняется металлическое поведение при низкой температуре. Эффект ВЗП на электрическое сопротивление в проводящей плоскости, наблюдаемый в экспериментах, был довольно слабым, не более нескольких процентов от общего сопротивления [252, 256]. Однако, из-за однонаправленности ВЗП следует ожидать анизотропию электропроводности в плоскости (a, c) в ВЗП состоянии [257, 253, 254]. В этом разделе мы сообщаем о теоретическом анализе и первом наблюдений анизотропии электропроводности в проводящей плоскости в $R\text{Te}_3$ соединениях ниже температуры Пайерлсовского перехода.

Мы изучили TbTe_3 , DyTe_3 и HoTe_3 соединения. В DyTe_3 первая ВЗП появляется при комнатной температуре $T_{CDW1} = 302$ К, а вторая ВЗП при $T_{CDW2} = 49$ К. В HoTe_3 первый и второй переходы в ВЗП происходят при температурах $T_{CDW1} = 283$ К и $T_{CDW2} = 110$ К соответственно [252]. В TbTe_3 ВЗП упорядочение наблюдается выше комнатной температуры: $T_{CDW1} = 336$ К. Второй ВЗП переход в этом соединении был недавно найден при $T_{CDW2} = 41$ К [258], при самой низкой температуре в серии $R\text{Te}_3$. Экспериментальные детали измерений и подготовки образцов описаны в работе [273].

На Рис. 4.8 показана температурная зависимость сопротивлений TbTe_3 , DyTe_3 и HoTe_3 , измеренная вдоль осей c и a с помощью метода Монтгомери, вместе с отношением анизотропии ρ_a/ρ_c в проводящей плоскости ac . Выше температуры T_{CDW1} Пайерлсовского перехода все исследованные соединения практически изотропны в плоскости ac , и $\rho_a/\rho_c \approx 1$. Ниже T_{CDW1} отношение ρ_a/ρ_c сильно увеличивается и достигает ~ 1.4 для TbTe_3 и ~ 2 для DyTe_3 и HoTe_3 при низкой температуре. Наблюдаемый эффект ВЗП на удельное сопротивление вдоль оси c намного слабее, чем изменение удельного сопротивления вдоль оси a . Таким образом, переход в ВЗП состояние в редкоземельных трителлуридах приводит к более сильному увеличению сопротивления в направлении, перпендикулярном вектору ВЗП \mathbf{Q} , чем в направлении, параллельном \mathbf{Q} -вектору. Такое поведение является обратным к тому, что наблюдается в квази-одномерных соединениях с ВЗП, где анизотропия является значительной в нормальном состоянии и сильно снижается ниже Пайерлсовского перехода [262].

В DyTe_3 и HoTe_3 наблюдаемая анизотропия начинает снижаться ниже $T = T_{CDW2}$. Наоборот, в TbTe_3 (см. Рис. 4.8) наблюдается резкое увеличение анизотропии ниже $T = 41$ К, что совпадает с T_{CDW2} в этом соединении (согласно статье [258]).

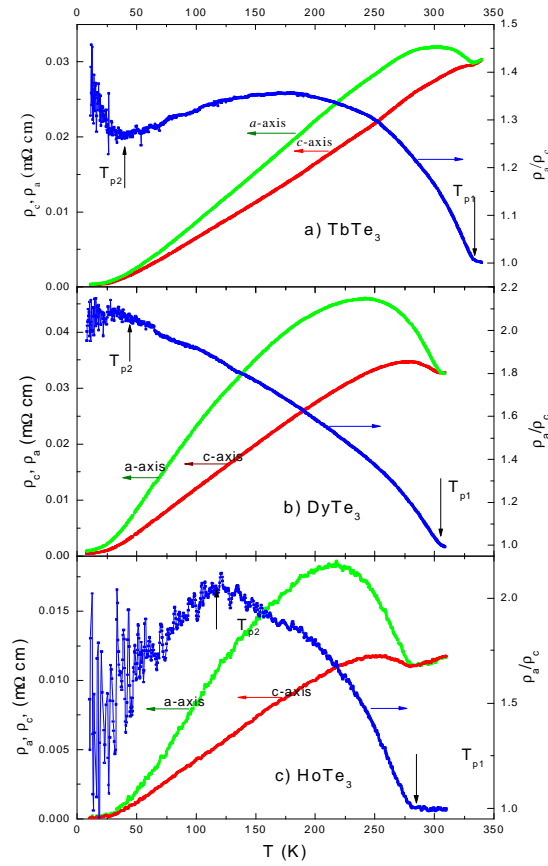


Рисунок 4.8: Экспериментальная температурная зависимость электрического сопротивления в TbTe_3 (Рис. а), DyTe_3 (Рис. б) и HoTe_3 (Рис. в) вдоль осей a и c , а также коэффициент анизотропии сопротивления, ρ_a/ρ_c , в плоскости $a - c$.

Чтобы описать анизотропное влияние ВЗП на удельное сопротивление вдоль осей a и c , которое показано на Рис. 4.8, мы вычислили электронную проводимость $\sigma_{xx} = 1/\rho_a$ и $\sigma_{yy} = 1/\rho_c$ в состоянии с ВЗП как функцию температуры. В τ -приближении², проводимость вдоль главных осей дается формулой [1]

$$\sigma_i(T) = 2e^2\tau \sum_{\mathbf{k}} v_i^2(\mathbf{k}) (-n'_F[\varepsilon(\mathbf{k})]), \quad (4.102)$$

где e - заряд электрона, τ - время свободного пробега, \mathbf{k} - импульс электрона [263], v_i - компонента скорости электрона вдоль направления i , $n'_F(\varepsilon) = -1/\{4T \text{ch}^2[(\varepsilon - \mu)/2T]\}$ - производная от функции распределения Ферми, которая ограничивает суммирование по

²Применение τ -приближения в отсутствие сильного магнитного поля оправдано при условии правильного вычисления времени свободного пробега τ с учетом различных механизмов рассеяния

импульсам вблизи ПФ, μ - химический потенциал, и $\varepsilon(\mathbf{k})$ - закон дисперсии электронов. Множитель 2 в Ур. (4.102) происходит от спинового вырождения.

Зависимость электронной скорости v_x и v_y от импульса может быть получена из закона дисперсии электронов, который зависит от щели ВЗП. Без ВЗП в проводящей плоскости ac закон дисперсии электронов в $R\text{Te}_3$ описывается простой двумерной моделью сильной связи в слоях Te , разработанной в [251]. В этой модели квадратная решетка атомов Te образует перпендикулярные цепочки из-за перекрытия p_x и p_z орбиталей. Параметры модели состоят из интегралов перескока электронов вдоль цепочки, t_{\parallel} , и перпендикулярно цепочке, t_{\perp} . В итоге, приближенный закон дисперсии записывается формулами

$$\begin{aligned}\varepsilon_1(k_x, k_y) &= -2t_{\parallel} \cos[(k_x + k_y)a/2] \\ &\quad - 2t_{\perp} \cos[(k_x - k_y)a/2] - E_F, \\ \varepsilon_2(k_x, k_y) &= -2t_{\parallel} \cos[(k_x - k_y)a/2] \\ &\quad - 2t_{\perp} \cos[(k_x + k_y)a/2] - E_F.\end{aligned}\tag{4.103}$$

В работах [251, 264] были рассчитаны следующие параметры для TbTe_3 :

$$t_{\parallel} \approx 2eV, \quad t_{\perp} \approx 0.37eV, \quad a \approx 4.4\text{\AA}.\tag{4.104}$$

Эти параметры незначительно отличаются для других соединений этого семейства. Энергия Ферми $E_F \approx 1.48$ eV выбрана, чтобы соответствовать данным ARPES по ПФ в TbTe_3 [251, 265]. Поверхности Ферми, рассчитанные из Ур. (4.103) выше перехода в ВЗП, показаны на рис. 4.9 (вставка). При $t_{\perp} = 0$ ПФ содержит только прямые линии, $k_x \pm k_y = \text{const} = \pm(2/a) \arccos(E_F/2t_{\parallel})$, которые изгибаются при ненулевом t_{\perp} . Кривизна поверхности Ферми пропорциональна отношению t_{\perp}/t_{\parallel} интегралов перескока. Конечно, реальный закон дисперсии в трителлуридах содержит также следующие члены разложения в приближении сильной связи, которые не выписаны в Ур. 4.103. Однако, эти члены много меньше чем представленные в Ур. (4.103), они меньше щели ВЗП и практически не влияют на анизотропию проводимости.

Скорость электронов, рассчитанная из Ур. (4.103) с помощью

$$v_x = \partial\varepsilon/\partial k_x, \quad v_y = \partial\varepsilon/\partial k_y,\tag{4.105}$$

существенно меняется вдоль поверхности Ферми. Зависимость v_x^2 и v_y^2 от k_x на ПФ выше температуры ВЗП перехода показана на Рис. 4.9. Можно видеть, что максимумы v_x^2 и v_y^2 находятся на разных частях ПФ. Эта асимметрия происходит из-за конечного t_{\perp} . Без ВЗП суммирование по импульсам в Ур. (4.102) дает одинаковый результат для v_x^2 и v_y^2 , что

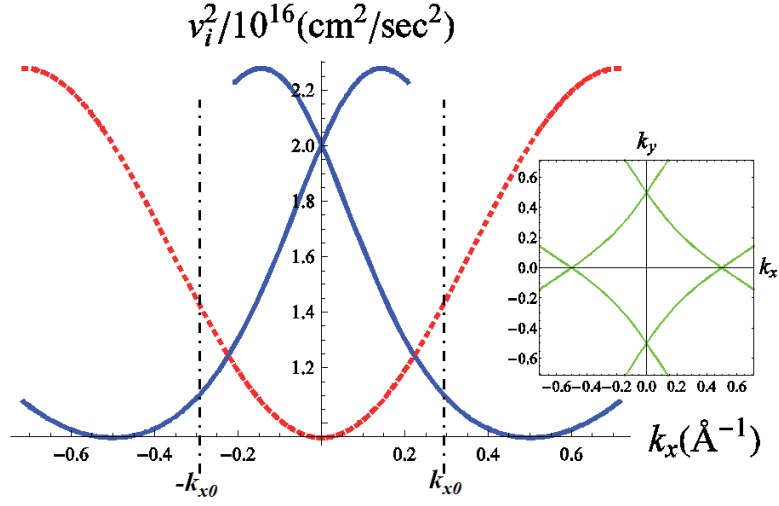


Рисунок 4.9: Зависимости от импульса двух основных компонент v_x^2 (сплошная синяя линия) и v_y^2 (пунктирная красная линия) квадрата скорости электрона вдоль Ферми-поверхности для TbTe₃ при температуре выше перехода в ВЗП, вычисленные из Ур. (4.103) и (4.105) с параметрами: $t_{\parallel} = 2$ eV, $t_{\perp} = 0.37$ eV. Вставка: поверхность Ферми в TbTe₃ при температуре выше перехода в ВЗП (зеленая сплошная линия), рассчитанная из Ур. (4.103). В состоянии с ВЗП энергетическая щель охватывает области $|k_x| \leq k_{x0} \approx 0.29 \text{ \AA}^{-1}$, ограниченные вертикальными штрихпунктирными линиями на рисунке. Эта щель нарушает эквивалентность между v_x^2 и v_y^2 : v_x^2 максимальна в области под щелью ВЗП, в то время как v_y^2 имеет максимум в бесщелевой области.

приводит к изотропной электронной проводимости в плоскости xy . Щель ВЗП нарушает этот баланс, потому что она охватывает только некоторые части ПФ. Зависимость щели ВЗП в TbTe₃ от k_x известна из данных по ARPES и показана на Рис. 13 статьи [251]. Щель ВЗП отлична от нуля только в области $|k_x/a^*| \equiv |k_x a/2\pi| \leq 0.2$, что соответствует

$$|k_x| \leq k_{x0} \approx 0.29 \text{ \AA}^{-1}. \quad (4.106)$$

Как можно видеть из Рис. 4.9, v_x^2 имеет максимальное значение именно в этой области, которая оказывается под щелью ВЗП, в то время как v_y^2 максимально в бесщелевой области $|k_x| > k_{x0}$. Поскольку при низкой температуре $T \ll \Delta_{CDW}$ интегрирование по импульсам в Ур. (4.102) включает в себя только бесщелевые области ПФ, это приводит к анизотропии проводимости.

Интегрирование по импульсу при $T \ll E_F$ выполняется стандартным способом. Интегрирование по импульсу вдоль проводящей плоскости разлагается на интегрирование

по параллельной и перпендикулярной к ПФ компонентам: $d^2k = dk_{\parallel}dk_{\perp} = dk_{\parallel}d\varepsilon/v_F$, где скорость Ферми $v_F = a\sqrt{t_{\parallel}^2(1 - \cos[(k_x \pm k_y)a]) + t_{\perp}^2(1 - \cos[(k_x \mp k_y)a])}$ не зависит от \mathbf{k} до членов второго порядка по $t_{\perp}/t_{\parallel} \ll 1$, и $dk_{\parallel} = \sqrt{1 + |dk_y/dk_x|_{FS}^2} dk_x$. В результате в состоянии с ВЗП мы получаем следующий коэффициент анизотропии проводимости

$$\frac{\sigma_{yy}}{\sigma_{xx}} \approx \frac{\int_{|k_x| \geq k_{x0}} dk_x \sqrt{1 + \left| \frac{dk_y}{dk_x} \right|_{FS}^2} v_y^2}{\int_{|k_x| \geq k_{x0}} dk_x \sqrt{1 + \left| \frac{dk_y}{dk_x} \right|_{FS}^2} v_x^2}. \quad (4.107)$$

Принимая параметры из Ур. (4.104), полученные на основе зонных расчетов в статье [251], получаем $\sigma_{yy}/\sigma_{xx} \approx 1.96$. Ур. (4.107) означает, что коэффициент анизотропии сопротивления $\rho_a/\rho_c \approx \sigma_{yy}/\sigma_{xx}$ возрастает от 1 до почти 2 при понижении температуры ниже T_{CDW1} . Это хорошо согласуется с экспериментальными данными на Рис. 4.8. Коэффициент анизотропии в Ур. (4.107) сильно зависит от значения t_{\perp} . На Рис. 4.10 мы построили коэффициент анизотропии σ_{yy}/σ_{xx} , вычисленный из Ур. (4.103)-(4.107), как функцию t_{\perp} . Стрелками показаны точки на этой линии, соответствующие экспериментальным значениям σ_{yy}/σ_{xx} для TbTe₃, DyTe₃ и HoTe₃. Эти точки дают экспериментальную оценку для параметра t_{\perp} в этих соединениях.

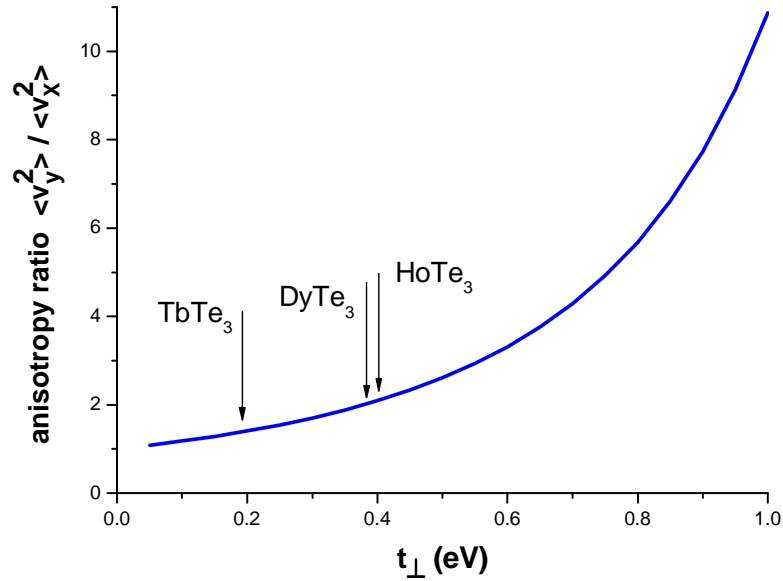


Рисунок 4.10: Коэффициент анизотропии сопротивления $\rho_a/\rho_c \approx \langle v_y^2 \rangle_{FS} / \langle v_x^2 \rangle_{FS}$ вдоль осей a и c как функция t_{\perp} , вычисленный из Ур. (4.103)-(4.107) при $t_{\parallel} = 2eV$. Стрелки указывают экспериментальные коэффициенты анизотропии для TbTe₃, DyTe₃ и HoTe₃.

Из рассчитанной зависимости квадрата импульса от скорости (см. Рис. 4.9) и измеренного знака анизотропии удельного сопротивления можно определить, даже без данных ARPES, что щель ВЗП возникает именно в области $|k_x| \leq k_{x0}$, а не наоборот. Значение анизотропии сопротивления может даже дать приблизительную оценку k_{x0} . Аналогичный анализ может дать качественную информацию по импульсной зависимости энергетической щели волны плотности в соединениях, где данные ARPES не доступны.

4.4.2 Определение микроскопической структуры волны плотности по скачку анизотропии проводимости ниже температуры перехода

Как уже описывалось в предыдущих разделах этой главе, в состоянии с волной плотности (ВП) при неидеальном нестинге поверхности Ферми (ПФ), щель в электронном спектре покрывает не всю ПФ, так что металлическая проводимость сохраняется даже ниже температуры пайерлсовского перехода. При этом ВП и металлическое (или сверхпроводящее) состояния могут сосуществовать. В дополнение к макроскопическому пространственному разделению этих совершенно различных состояний [266], такое состояние с *частичной* ВП может иметь две различные микроскопические структуры: (1) пространственно однородную структуру с измененной поверхностью Ферми (см. раздел 4.4.1 или, например, статьи [267, 268]) и (2) пространственно неоднородную солитонную структуру (см. разделы 4.2 и 4.3, или, например, статьи [38, 37, 269]). Довольно часто на фоне таких волн плотности возникает сверхпроводимость [270, 232, 272] и обладает многими необычными свойствами, в том числе сильным увеличением верхнего критического магнитного поля [271, 105, 268, 269], анизотропной температурой сверхпроводящего перехода [272] и т.д. Знание микроскопической структуры состояния с волной плотности при неидеальном нестинге важно для описания различных соединений, где волна зарядовой или спиновой плотности сосуществует с металлическим/сверхпроводящим состоянием. Для всех перечисленных выше сценариев металлическая проводимость уменьшается, но не исчезает после перехода в волну плотности. Это уменьшение проводимости может быть анизотропным (см. предыдущий раздел или [273]) и зависеть от микроскопической структуры ВП. В этом разделе мы покажем, как эта анизотропия может помочь отличить различные микроскопические структуры параметра порядка ВП. Эти результаты могут быть полезны для описания электронных свойств органических металлов α -(ET)₂MHg(SCN)₄, где M = K или Tl,

$(\text{TMTSF})_2X$, где $X = \text{PF}_6$ или ClO_4 , и других соединений. Во всех этих соединениях фазовая диаграмма в координатах $P - T$ имеет вид, схематически изображенный на Рис. 4.7. В металлическом состоянии, то есть выше температуры T_{DW} перехода в ВП, все эти соединения имеют квазиодномерную анизотропию и закон дисперсии, описываемый Ур. (4.11) и (4.12). По-видимому, солитонный сценарий неоднородной ВП может реализовываться только в соединениях с такой анизотропией, близкой к одномерной. Поэтому ниже для конкретности мы рассмотрим квазиодномерные проводники с законом дисперсии в металлическом состоянии, описываемый Ур. (4.11) и (4.12).

Однородная волна плотности с перестроенной ПФ

В состоянии с однородной ВП и неидеальным нестингом, часть электронных состояний на уровне Ферми сохраняется. При этом происходит кардинальная перестройка ПФ, обычно даже с изменением ее топологии. Если исходная ПФ состояла из двух гофрированных листов, соответствующих закону дисперсии в Ур. (4.11) и (4.12), то перестроенная ПФ ниже T_{DW} обычно содержит несколько квазидвумерных участков, часто называемых открытыми карманами ПФ. Для квазиодномерных металлов с законом дисперсии в Ур. (4.11) и (4.12) и волновым вектором ВП $\mathbf{Q}_0 = (\pm 2k_F, \pi/b, \pi/c)$, соответствующим оптимальному нестингу, перестройка ПФ из-за ВП изучалась в работе [268] (номер 21 в списке публикаций). Ниже T_{DW} в проводящей плоскости образуется восемь эллиптических вытянутых открытых карманов ПФ, по четыре кармана для каждого исходного листа ПФ (см. рис. 4.11). Анизотропия электропроводности в проводящей плоскости определяется двумя наклонными эллиптическими карманами ПФ, обозначенные цифрами 3 и 4 на этом рисунке. Тангенс угла наклона ϕ этих карманов (см. рис. 4.11) примерно дается отношением $\langle v_y^2 \rangle / \langle v_x^2 \rangle \sim \tan^2 \phi \approx (t_b/t_a)^2$, где угловые скобки означают усреднение по ПФ. Отсюда получаем согласно Ур. (4), что в состоянии с однородной ВП в квазиодномерных металлах с неидеальным нестингом коэффициент анизотропии примерно равен

$$\sigma_y/\sigma_x \approx \langle v_y^2 \rangle / \langle v_x^2 \rangle \sim \tan^2 \phi \sim (t_b/t_a)^2 \ll 1, \quad (4.108)$$

что близко к анизотропии без ВП. Это отношение слабо зависит от давления. Изменение коэффициента анизотропии при переходе в ВП мало для этого сценария микроскопической структуры ВП.

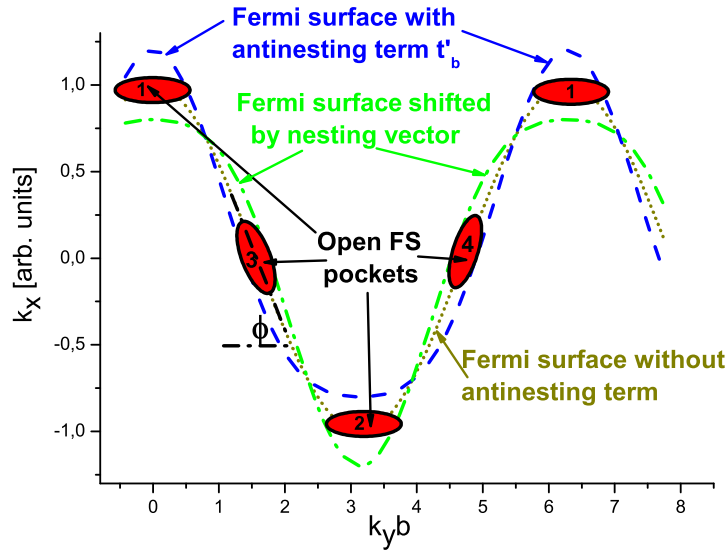


Рисунок 4.11: Схематическое изображение маленьких открытых карманов на одном листе поверхности Ферми (ПФ или FS на рисунке), которые возникают, когда антинестинговый член $2t'_b$ в Ур. (4.12) превышает энергетическую щель ВП Δ_0 . Синяя пунктирная линия показывает лист ПФ при неидеальном нестинге, т.е. при $2t'_b > \Delta_0$. Зеленая штрихпунктирная линия показывает другой лист ПФ, смещенный на вектор нестинга Q_0 . При идеальном нестинге эти две линии совпадают. Пунктирная коричневая линия показывает ПФ при $2t'_b = 0$. Красные сплошные эллипсы изображают небольшие карманы ПФ, которые появляются в состоянии с ВП при неидеальном нестинге, когда $2t'_b > \Delta_0$, т.е. когда давление превышает P_{c1} .

Солитонная структура волны плотности

В солитонной фазе ВП параметр порядка зависит от координаты вдоль проводящих цепочек: $\Delta(x) \approx \Delta_0 \text{sn}(x/\xi_{DW})$, где $\text{sn}(y)$ - функция эллиптического синуса. В результате формируются периодически расположенные солитонные стенки шириной $\xi_{DW} = \hbar v_F / \pi \Delta_0$, на которых параметр порядка ВП меняет знак. Каждая солитонная стенка вносит одну (на проводящую цепочку) заряженную квазичастицу на уровне Ферми. Для достаточно высокой линейной концентрации n_s солитонных стенок квазичастицы на соседних солитонных стенках перекрываются, образуя новую зону проводимости на уровне Ферми в середине энергетической щели ВП. Закон дисперсии в этой солитонной зоне дается формулами (4.92)-(4.94) в разделе 4.3.

Подставляя Ур. (4.92)-(4.94) в Ур. (4.105) получаем средний квадрат скорости в солитонной фазе

$$\langle v_y^2 \rangle \approx 2 (t'_b b / \hbar)^2, \quad \langle v_x^2 \rangle \approx (\pi E_- / 2 \hbar \kappa_0)^2 / 2, \quad (4.109)$$

и согласно Ур. (4) анизотропию проводимости

$$\sigma_y / \sigma_x \approx \langle v_y^2 \rangle / \langle v_x^2 \rangle \sim 16 (t'_b b \kappa_0 / \pi E_-)^2. \quad (4.110)$$

При $t'_b \ll \Delta_0$ все электронные состояния на уровне Ферми покрыты щелью ВП, в то время при $t'_b \gg \Delta_0$ нормальное металлическое состояние или однородная ВП с большими открытыми (бесщелевыми) карманами на ПФ, как правило, более благоприятны, чем солитонная фаза. Поэтому, обычно солитонная фаза неоднородной ВП образуется только при $t'_b \sim \Delta_0$. Тогда соотношение $\sigma_y / \sigma_x \sim 16 (t'_b b \kappa_0 / \pi E_-)^2 \gtrsim 1$ даже при больших солитонных концентрациях n_s , и $E_- \sim \Delta_0 \sim 2t'_b$. Следовательно, вопреки сценарию однородной ВП с бесщелевыми карманами на ПФ, формирование солитонной структуры ВП приводит к сильным изменениям и даже к инверсии анизотропии электропроводности в проводящей плоскости. Это позволяет различать экспериментально эти две микроскопические структуры ВП с неидеальным нестингом.

Применение к реальным соединениям и заключение

Выше мы показали, что изменение анизотропии проводимости при переходе из металлического состояния в состояние с волной плотности может дать информацию о микроскопической структуре этой ВП. Это наблюдение важно при неидеальном нестинге ПФ, когда даже в состоянии с ВП сохраняется металлическая проводимость, то есть металлическое состояние сосуществует с ВП. Для квазиодномерных проводников с законом дисперсии в Ур. (4.11) и (4.12) возможны две принципиально различные микроскопические структуры такого сосуществования: (1) однородная ВП с бесщелевыми карманами, когда металлическая фаза отделена от ВП в импульсном пространстве, и (2) неоднородная ВП (солитонная фаза). Мы показали, что в первом случае переход из металлического состояния в ВП сопровождается слабым изменением анизотропии проводимости в плоскости $x - y$ (в проводящем слое), а во втором сценарии этот переход приводит к сильным изменениям и даже к инверсии анизотропии электропроводности в проводящей плоскости. Интересно сравнить эти предсказания с экспериментальными данными в квази-одномерных органических металлах $(\text{TMTSF})_2X$, где $X = \text{PF}_6$ или ClO_4 . Эти данные изображены на Рис. 3 статьи [279] и на Рис. 3 статьи [280]. Если в $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ анизотропия сопротивления ρ_a / ρ_b в проводящей плоскости растет при

переходе из нормального металлического состояния в ВП при понижении температуры ниже $\sim 10\text{K}$, то в $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ она падает [279], а при сильном анионном беспорядке даже инвертируется (кривые 7-12 на Рис. 3 в статье [280]). Поэтому изменение анизотропии в $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ при сильном анионном беспорядке указывает на вероятную солитонную структуру ВП в этом соединении.

4.5 Перестройка поверхности Ферми, вызванная волной плотности, и ее влияние на магнитосопротивление

При переходе в состояние с ВП, перестройка части поверхности Ферми, удовлетворяющей условию нестинга (пусть даже приближенно), бывает довольно сильной, поскольку эта часть ПФ (при неидеальном нестинге) или вся ПФ (при идеальном нестинге) исчезает под щелью ВП. Такая перестройка ПФ рассмотрена в разделах 4.4 и 5.2, и новый закон дисперсии электронов описывается формулой (4.10). Часто встречается ситуация, когда образование волны плотности не связано напрямую с какой-то частью ПФ. Например, когда упорядочиваются локализованные спины, которые в любом случае не вносят вклад в электроны проводимости, и их упорядочение почти не изменяет ПФ. Или когда имеются две различные части ПФ, и только одна удовлетворяет условию нестинга; в этом случае только эта (удовлетворяет условию нестинга) часть ПФ покрыта щелью при образовании ВП, а другие части ПФ почти не изменяются. В обоих случаях, образование ВП вносит лишь периодический потенциал рассеяния на вектор \mathbf{Q}_0 , но не убирает электроны проводимости с уровня Ферми на этих участках ПФ, напрямую не участвующих в образовании ВП. Сила этого потенциала рассеяния пропорциональна параметру порядка Δ , и его действие на оставшиеся электроны проводимости по-прежнему описывается Ур. (4.5) или даже (4.8), где суммирование по \mathbf{Q} в Ур. (4.5) включает все волновы вектора ВП (обычно только $\pm\mathbf{Q}_0$).

Описанная выше ситуация *слабого* влияния ВП на электроны проводимости очень распространена в высокотемпературных сверхпроводниках (купратах, пниктидах и др.), в тяжелофермионных и других соединениях. Влияние ВП на оставшиеся электроны проводимости может быть описано в приближении слабой связи, когда потенциал рассеяния на вектор $\pm\mathbf{Q}_0$ слегка перестраивает энергетический спектр $\varepsilon(\mathbf{k})$ согласно Ур. (4.10), создавая щель $\sim \Delta_{DW}$ только вблизи небольшого числа *связанных вектором \mathbf{Q}_0 ВП* точек ПФ \mathbf{k} , где $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k} \pm \mathbf{Q}_0)$, и почти не меняя закон дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$ на всей оставшейся ПФ. Поскольку обычно $\Delta \ll E_F$, на большинство металлических

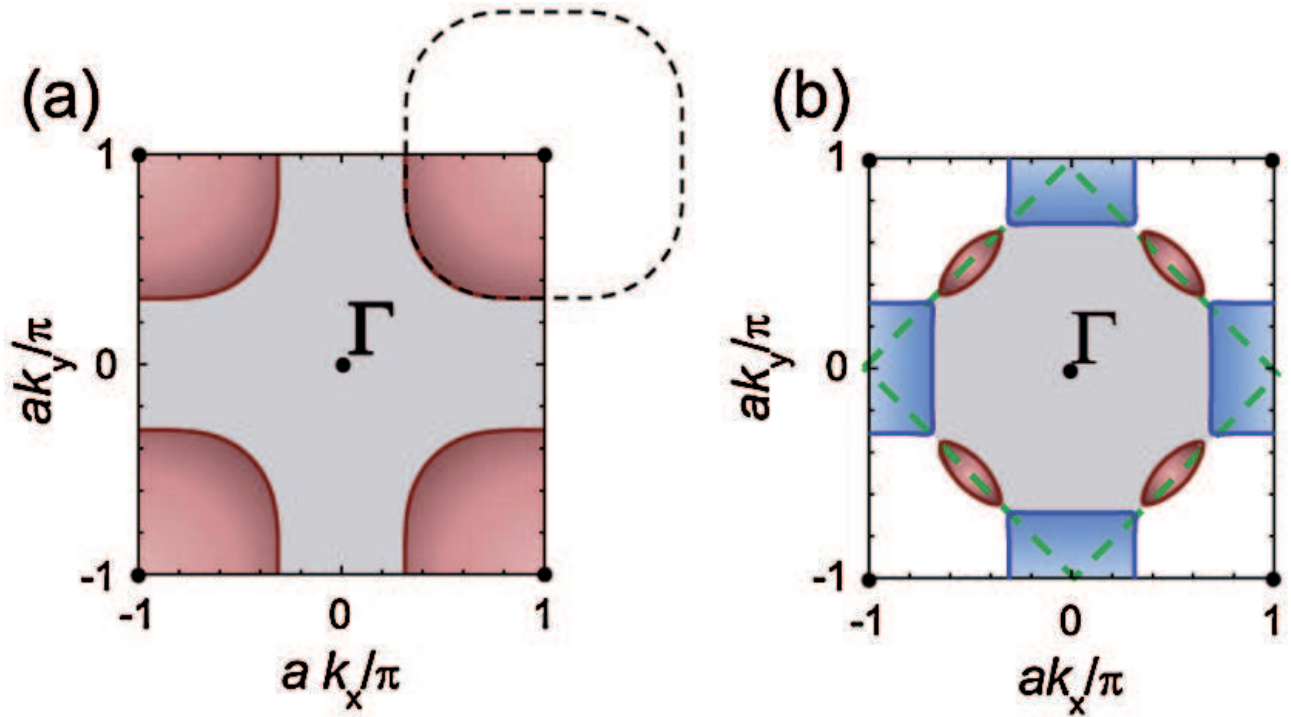


Рисунок 4.12: (а) Исходная поверхность Ферми в электрон-допированном высокотемпературном сверхпроводнике $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ в отсутствие волн плотности (при уровне допирования $x \geq 0.17$). Пунктирная линия соответствует большой замкнутой орбите в расширенной зоне Бриллюэна, ответственной за шубниковские осцилляции. (б) Перестроенная поверхность Ферми в этом соединении при $x \leq 0.16$, состоящая из одного электронного и двух дырочных карманов в уменьшенной зоне Бриллюэна (прерывистая зеленая линия). Дырочные карманы отвечают за медленных осцилляции, наблюдаемые при $x \leq 0.16$. Рисунок взят из работы [20].

свойств это дополнительное рассеяние на вектор $\pm Q_0$ оказывает слабое влияние. Тем не менее, образование щели даже в нескольких точках меняет топологию ПФ и топологию электронных траекторий в магнитном поле. Это в первую очередь отражается на частотах магнитных квантовых осцилляций (МКО), как было показано экспериментально во многих соединениях. Например, в электрон-допированном высокотемпературном купратном сверхпроводнике $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ при изменении степени допирования от $x \leq 0.15$ до $x \geq 0.17$ было обнаружено кардинальное изменение всех частот МКО [20], связанное с перестройкой поверхности Ферми при подавлении волны спиновой плотности из локализованных спинов (см. Рис. 4.12). В некотором интервале допирования около $x = 0.16$ наблюдалось сразу два набора частот МКО [20], соответствующих исходной и перестроенной ПФ, что связано с явлением магнитного пробоя [2, 4], поскольку образовавшаяся щель $2\Delta_{DW} \sim 10T_{cDW}$ в *связанных ВП* точках мала по сравнению с полем магнитного пробоя. Аналогичное изменение частот квантовых осцилляций было обнаружено в органических металлах, например, в α -(ET)₂MHg(SCN)₄, где (ET)=(BEDT-TTF) и M = K или Tl (см. Рис. 4.13 или Рис. 2 в статье [294]). В этом квазидвумерном соединении поверхность Ферми в металлическом состоянии состоит из двумерных эллиптических карманов и квазиодномерных листов, изображенных на Рис. 4.13с слева. Квазиодномерные листы обладают свойством нестинга и приводят к волне зарядовой плотности (ВЗП) при температуре $T_{cDW} \sim 10K$.³ Ниже этой температуры квазиодномерные листы ПФ покрыты энергетической щелью ВЗП и не вносят вклад в плотность состояний на уровне Ферми, которая определяется только двумерными карманами. Тем не менее, в состоянии с ВЗП появляется новая частота λ МКО в дополнение к частоте α (см. Рис. 4.13 или Рис. 2 в статье [294]), соответствующей оставшимся двумерным эллиптическим карманам ПФ, что является уже неоспоримым доказательством перестройки ПФ, впервые предложенной для этого соединения в работе [296] на основе данных об угловой зависимости магнитосопротивления. Эта новая частота исчезает при подавлении ВЗП магнитным полем или давлением. Частота α , соответствующая исходной ПФ, сохраняется и в состоянии с ВЗП из-за магнитного пробоя.

Кроме возникновения новых частот МКО, перестройка ПФ, вызванная волной плотности или упорядочением локализованных магнитных моментов с волновым вектором Q_0 , приводит к другим интересным эффектам в магнитосопротивлении. Магнитное поле является очень важным при наблюдении эффектов подобной перестройки ПФ, поскольку

³Эта температура перехода зависит от внешнего давления и магнитного поля, в качественном согласии с фазовыми диаграммами, изображенными на Рис. 4.6, 4.7, и 5.1

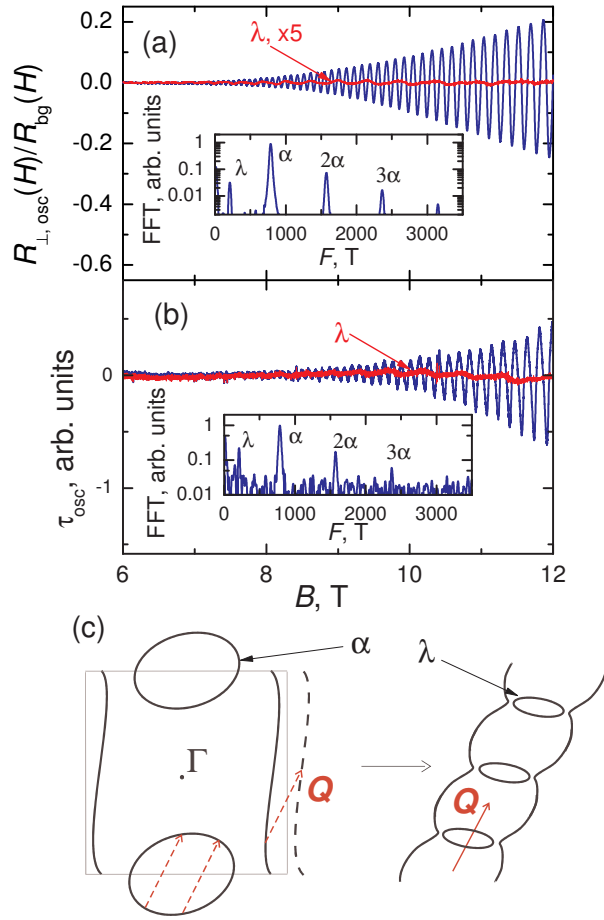


Рисунок 4.13: Осциллирующая компонента магнитосопротивления (a) и магнитного момента (b) в α -(ET) $_2$ MHg(SCN) $_4$ при $T = 0.45$ K, $\theta = 31.5^\circ$. Красные кривые получены путем фильтрации α -осцилляций и демонстрируют поведение медленных колебаний с частотой $F_\lambda = 210$ T. На Рис. (a) λ -осцилляции увеличены на коэффициент 5 для лучшей видимости. Вставки в (a) и (b) показывают соответствующие Фурье-спектры. (c) Схематический 2D вид перестройки поверхности Ферми в связи с потенциал ВП с волновым вектором Q . Исходная поверхность Ферми (левая панель) состоит из пары открытых листов и цилиндра. ВП, создавая новую периодичность с волновым вектором Q , открывает щель на уровне Ферми на открытых q1D листах, а также на небольшом участке в квазидвумерной (q2D) зоне для состояний, разделенных на вектор Q (правая панель).

оно заставляет электроны двигаться вдоль ПФ, и траектории этого движения оказываются очень чувствительны к перестройки ПФ. Когда упорядочиваются локализованные моменты, это не приводит к заметному изменению плотности состояний проводящих электронов, и магнитное поле оказывается не заменимым при определении перестройки ПФ, включая изменение топологии ПФ. Ниже мы рассмотрим некоторые из особенностей магнитосопротивления при подобной перестройке ПФ, вызванной ВП.

4.5.1 Сильная зависимость эффективной массы электронов на поверхности Ферми от их импульса, измеряемая по магнитным квантовым осцилляциям

Важным проявлением слабого (по сравнению с энергией Ферми) потенциала волны зарядовой или спиновой плотности, приводящего к перестройке поверхности Ферми (ПФ) с изменением ее топологии (переходы Лифшица 2.5 рода), может быть значительное локальное (то есть на некоторых небольших участках ПФ) увеличение эффективной массы электронов. Это локальное увеличение эффективной массы может наблюдаться в экспериментах по магнитным квантовым осцилляциям, если наклонить магнитное поле так, чтобы экстремальные поперечные сечения ПФ проходили через эти области увеличенной эффективной массы электронов. Такое увеличение наблюдалось, например, в тяжело-фермионном соединении CeIn_3 в работе [281], где это увеличение интерпретировалось в терминах сильных спиновых флуктуаций вблизи "горячих точек ПФ". Следуя работе [282] (№ 18 в списке публикаций), мы покажем, что это увеличение эффективной массы электронов можно объяснить и в терминах перестройки ПФ, вызванной антиферромагнитным (АФМ) упорядочением локализованных спинов атомов Се. Похожее локальное (в импульсном пространстве) увеличение эффективной массы проводящих электронов из-за перестройки ПФ, вызванной ВП, может возникать и во многих других соединениях.

В работе [281] было также отмечено, что положения этих "горячих" точек, где наблюдается увеличение эффективной массы электронов, совпадают с положениями шеек (горлышек) квазидвумерной ПФ, выступающей из аналогичной ПФ для немагнитного соединения LaIn_3 с похожей электронной структурой (см. схематический Рис. 4.14). Шеи попадают близко к границе новой зоны Бриллюэна (BZ) для CeIn_3 , образованной антиферромагнитным упорядочением с волновым вектором $\mathbf{Q} = (\pi/a)(1, 1, 1)$, который соединяет противоположные "горячие" точки на поверхности Ферми [283]. Поэтому эти

участки ПФ должны быть как-то изменены или даже усеченным из-за отражения электронов на границах новой зоны Бриллюэна. Топологическое изменение геометрии ПФ возле шеи, известное как переходы Лифшица "2.5" рода, могут привести к слабой сингулярности в термодинамических и транспортных свойствах [2]. Покажем, что при соответствующих направлениях поля это также влияет на характеристики магнитных квантовых осцилляций (МКО) и эффекта де Гааза - ван Альфена (dHvA) на "горячих" точках в CeIn_3 .

Мы рассмотрим эффект dHvA для трех ориентаций поля в *кубическом* кристалле CeIn_3 или LaIn_3 . Увеличение эффективной массы наблюдалось для двух ориентаций поля: $\mathbf{B} \parallel (110)$ и $\mathbf{B} \parallel (111)$. [281] В первом случае экстремальные траектории электронов будут проходить через четыре шеи на ПФ. Более детальные измерения в статье [281] были выполнены для $\mathbf{B} \parallel (111)$. В этом случае экстремальная электронная орбита не пересекает "горячих" точек, но может проходить вблизи них, если диаметр шеек достаточно большой. Измерения dHvA при $\mathbf{B} \parallel (100)$, когда экстремальные траектории электронов проходят вдали от любого "горячего" пятна, предоставляют неувеличенное значение эффективной массы $m_1 = 2m_0$. [281]

Увеличение массы в эффекте dHvA из-за седловых точек электронной орбиты

Для начала, мы объясним в рамках простой модели, увеличение массы при $\mathbf{B} \parallel (111)$ с помощью близости электронной траектории к седловым точкам, где эффективная масса в эффекте dHvA имеет логарифмическую особенность [2]. Если ПФ имеет шеи, при определенных ориентациях магнитного поля, траектория электронов, соответствующая экстремальному сечению ПФ, проходит через седловые точки (см. "saddle point" на Рис. 4.14).

Мы берем Ферми-поверхность с осевой симметрией по оси z и узким горлышком, как показано на Рис. 4.14. Для краткости мы опускаем сначала эффекты антиферромагнитного упорядочения и других побочных спиновых эффектов на "голый" закон дисперсии электронов, выбранный в виде (мы положили $\hbar = 1$)

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = (k_x^2 + k_y^2)/2m_1 + 2t_z[1 - \cos(k_z d)], \quad (4.111)$$

где $k_{x,y,z}$ - компоненты импульса вдоль осей x, y, z , и t_z - интеграл перескока по оси z . $k_z d = \pm\pi$ определяет положения шеек. Поверхность Ферми ($\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_F$) имеет вид:

$$(k_x^2 + k_y^2)/2m_1 - 2t_z[1 + \cos(k_z d)] = \Delta, \quad (4.112)$$

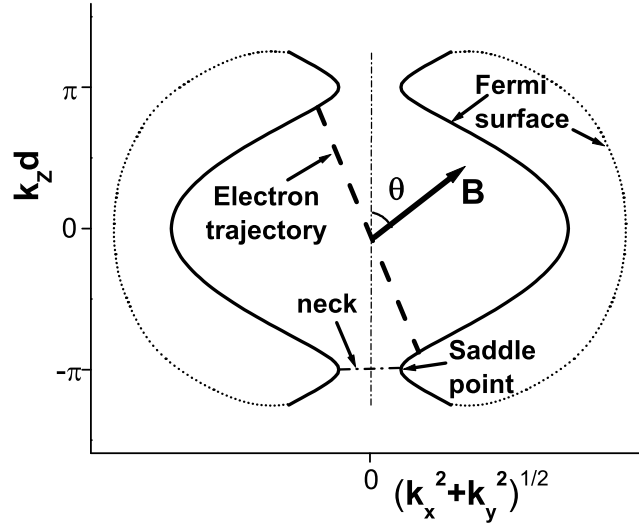


Рисунок 4.14: Ферми поверхности (сплошная линия) и экстремальные орбиты электрона (прерывистая линия). Шейки и седловые точки из-за шеек на ПФ подписаны как "neck" и "saddle point". Пунктирные линии схематично показывают внешнюю поверхность Ферми в CeIn_3 (см. [284, 285]).

где $\Delta \equiv \varepsilon_F - 4t_z$. Радиус шеек $k_{neck} = \sqrt{2m_1\Delta}$. В CeIn_3 и LaIn_3 шейки узкие, $k_{neck}d/\pi \ll 1$.

Магнитное поле $\mathbf{B} = B_0(\sin\theta, 0, \cos\theta)$ на Рис. 4.14, направленное под углом $\theta = 70.53^\circ$ относительно z -оси, будет имитировать $B \parallel (111)$ в кубическом кристалле CeIn_3 , где экстремальные орбиты проходят недалеко от *других шести* "горячих" точек, но не пересекают их [281]. Повернем x и z координатные оси на угол θ , чтобы направление магнитного поля было вдоль k'_z -оси:

$$\begin{cases} k_x = k'_x \cos\theta + k'_z \sin\theta \\ k_z = -k'_x \sin\theta + k'_z \cos\theta. \end{cases} \quad (4.113)$$

Дисперсионное соотношение (4.111) в новых переменных принимает вид:

$$\varepsilon(\mathbf{k}') = [(k'_x \cos\theta + k'_z \sin\theta)^2 + k_y'^2]/2m_1 + 2t_z\{1 - \cos[d(-k'_x \sin\theta + k'_z \cos\theta)]\}. \quad (4.114)$$

Электроны движутся вдоль квази-классических траекторий с постоянными энергией и k'_z . В эффекте dHvA важны только электронные траектории, которые окружают экстремальные сечения ПФ $S_{ex}(k'_z = 0)$ или вокруг шеек.

Эффективная масса электрона определяется интегралом [2]

$$2\pi m^* = \frac{\partial S_{extr}}{\partial \varepsilon} = \oint \frac{dk_\perp}{v_\perp}. \quad (4.115)$$

Вдоль траектории с постоянными $\varepsilon(\mathbf{k}')$, k'_z , $d\varepsilon(k'_x, k'_y) = v'_x dk'_x + v'_y dk'_y = 0$, и интеграл (4.115) переписывается в виде

$$2\pi m^*(\theta) = \oint \frac{dk'_x}{v'_y} = 4 \int_0^{k_{x0}} \frac{dk'_x}{v'_y(k'_x)}, \quad (4.116)$$

где

$$v'_y(k'_x) = \frac{\sqrt{2m_1[\Delta + 2t_z[1 + \cos(k'_x d \sin \theta)]] - k_x'^2 \cos^2 \theta}}{m_1} \quad (4.117)$$

и пределы интегрирования $k_{x0}(\theta)$ возле шеи являются решением уравнения $v'_y(k'_{x0}, \theta) = 0$. Экстремальная траектория электронов проходит через седловую точку, если в дополнение к Ур. (4.117), удовлетворено условие $v_x(\theta)|_{k'_y=k'_z=0, \varepsilon=\varepsilon_F} = 0$. Из (4.117) можно найти критический угол наклона θ_c (для узких шеек $\tan \theta_c \approx \pi/k_{neck}d$), соответствующий скачку частоты dHvA. Для меньших θ электронная траектория не проходит через седловые точки. При более высоких углах наклона θ , электронные траектории над шеями приходят в следующую зону Бриллюэна.

Рассмотрим случай с узким горлом. Введя обозначение $\bar{\theta} = \pi/2 - \theta$, получаем для седловой точки $\tan \bar{\theta}_c = k_{neck}d/2\pi \ll 1$. Условие экстремальной траектории $k'_z = 0$ в Ур. (4.113), возвращает нас в Ур. (4.116) к интегрированию по k_z : $dk'_x = -dk_z/\cos \bar{\theta}$. Разлагая $v'_y(k'_x)$ в Ур. (4.117) вблизи k'_{x0} при $\bar{\theta}$ вблизи $\bar{\theta}_c$, получаем ($\delta \equiv \pi/d - k_z \ll 1$ и $k_x = -k_z \tan \bar{\theta}$)

$$m^*(\bar{\theta}) = \frac{2}{\pi d} \left(\frac{m_1}{t_z} \right)^{1/2} \int_{\delta_0}^{\sim \frac{\pi}{d}} \frac{d\delta}{\sqrt{\delta^2 + \left(\frac{\pi}{d}\right)^2 \left(\frac{\bar{\theta}_c^2 - \bar{\theta}^2}{m_1 t_z d^2}\right)}}, \quad (4.118)$$

где $\delta_0 \equiv (\pi/d) \sqrt{(\bar{\theta}^2 - \bar{\theta}_c^2)/m_1 t_z d^2}$, i.e. $m^*(\bar{\theta})$ логарифмически расходится как

$$m^*(\bar{\theta}) = (2/\pi) (m_1/d^2 t_z)^{1/2} \ln(1/d\delta_0). \quad (4.119)$$

Для $\mathbf{B} \parallel$ оси z на Рис. 4.14, осцилляции dHvA в модели Ур. (4.111) измеряют только поперечное сечение центрального ("живота") и толщину "шей". Если мы вернемся к кубическому случаю и $\mathbf{B} \parallel$ (111), экстремальные траектории не пересекают ни одну из шести "горячих" точек на Рис.3 статьи [281], но численно проходят довольно близко к ним (отклонение траектории от центра "горячих" точек $\bar{\theta} = 19.47^\circ$). Таким образом возникает вопрос, насколько широки шеи, чтобы привести к значительному увеличению эффективной электронной массы в эффекте dHvA.

Из данных dHvA для LaIn_3 (Рис. 4 статьи [286]) известны площади экстремальных сечений в зонах "шей" и "живота" ПФ: $k_{neck}a = 0.27$ и $k_F \approx 2.24$. Принимая значение $d = 2a/\sqrt{3}$ в Ур. (4.111), как для кубической решетки, это дает $k_{neck}d \approx 0.32$ и $k_F d \approx$

2.6. Седловые точки в LaIn_3 появляются при угле $\bar{\theta}_c \approx 5.8^\circ$. Следовательно, шеи ПФ в немагнитном LaIn_3 слишком узкие, чтобы повлиять на эффективную массу при $\mathbf{B} \parallel (111)$.

В CeIn_3 радиус "живота" ПФ k_F очень близок к тому, что в LaIn_3 , в то время как сечение "шей" зависит от антиферромагнитного параметра порядка и величины магнитного поля (кроме того, зоны становятся расщепленными по спину). В поле $B = 15\text{T}$, частота $d\text{HvA}$ от шеи (j-орбиты) в 3 раза больше, чем в LaIn_3 [284], что дает $k_{neck}d \approx 0.55$ и $\bar{\theta} \approx 10^\circ$. Это уже ближе, но все еще довольно далеко от угла наклона $\bar{\theta}_0 = 19.47^\circ$. Однако, согласно экспериментальным статьям [281, 285], радиус шеи ПФ в CeIn_3 значительно выше. Тогда радиус горлышка (шей) может достигнуть и превзойти критическое значение $k_{neck}^{crit}d \approx 1.1$, при котором $\bar{\theta}_c = \bar{\theta}_0$ и экстремальная орбита проходит через седловую точку в поле $\mathbf{B} \parallel (111)$. К сожалению, до сих пор нет экспериментальных данных по полевой зависимости радиуса шеи ПФ в CeIn_3 .

Если \mathbf{B} перпендикулярно к плоскости на Рис. 4.14 для нашей модели (4.111), то экстремальные траектории будут проходить вдоль ПФ показанной на Рис. 4.14. Увеличение эффективной массы в этом случае будет определяться шириной шеи ПФ: $m^* \approx 2m_1\sqrt{2\hbar^2/t_z m_1 d^2} \ln(2\pi\sqrt{t_z/\Delta})$. В кубическом CeIn_3 это будет соответствовать $\mathbf{B} \parallel (110)$: четыре сингулярности в седловых точках из-за шей ПФ могли бы обеспечить сильное увеличение эффективной массы в эффекте $d\text{HvA}$, как это наблюдалось в работе [281]. Строго говоря, частота $d\text{HvA}$ для (d)-ПФ должна быть заметна только при сильном спиновом расщеплении зоны проводимости, связанным не с зеемановским членом, а скорее с обменным взаимодействием при антиферромагнитном (АФМ) упорядочении.

CeIn₃ и другие ReIn₃.

Поверхность Ферми в CeIn_3 сейчас известна [281, 284, 285]. Две важные черты этой ПФ являются общими с немагнитным LaIn_3 [286]: 1) практически сферическая ПФ (обозначаемая буквой (d) [288, 284, 285, 289]) с диаметром в К-пространстве вблизи АФМ вектора $\mathbf{Q} = (\pi/a)(1, 1, 1)$; 2) "шей" (или "горловины") торчащие из этой почти сферической ПФ по направлению к внешней ПФ.[284, 285] Орбиты $d\text{HvA}$ и "шей" ПФ обозначаются буквой (j); их размеры варьируются внутри группы веществ ReIn_3 [288, 289]. Анализ $d\text{HvA}$ осцилляций, а также эксперименты по электрон-позитронной аннигиляции в парамагнитной фазе [284, 285] подтвердили локализованный характер f-электронов атомов Ce [283, 290, 291]. Угловой момент $J=5/2$ в кубической среде распадается на квартет Γ_8 и крамерсовский дуплет Γ_7 ; последний отвечает за АФМ упорядочение в CeIn_3 [283]. Вектор \mathbf{Q} соответствует АФМ намагниченности $\mathbf{S}_\perp(\mathbf{Q})$,

направленной перпендикулярно к соседним ферромагнитным плоскостям (111) [290]. Магнитная анизотропия мала [291], и ниже мы будем ей пренебрегать.

CeIn_3 – умеренный тяжелофермионный материал с параметром Зоммерфельда $\gamma = 130 \text{ mJ/K}^2 \text{ моль}$. При атмосферном давлении температура Нееля $T_N = 10 \text{ K}$. Намагниченность близка к величине $0.71 \mu_B$, ожидаемой для локализованных Γ_7 дублетов [281]. АФМ упорядочение можно подавить с помощью приложенного давления $P_c \approx 26 \text{ kbar}$ [292]. В окрестностях этого давления наблюдалось сосуществование АФМ и сверхпроводимости [293]. Магнитный квантовый переход был обнаружен в поле $B \approx 61 \text{ T}$ [281]. Как было сказано выше, авторы утверждали сильные многочастичные эффекты в "горячих" точках на листе (d) ПФ.[281]

Антиферромагнитное (АФМ) упорядочение в CeIn_3 .

Для обычных антиферромагнетиков, достаточно сильное приложенное магнитное поле разрушает АФМ упорядочение, направляя спины параллельно полю \mathbf{B} . Для CeIn_3 температура Нееля $T_N = 10 \text{ K}$ выглядит уже довольно низкой, так что можно применить теорию среднего поля Ландау для фазовых переходов:[287]

$$F(T, B) = a(T - T_N)\mathbf{S}_\perp^2 + b\mathbf{S}_\perp^4 - \frac{\chi \mathbf{B}^2}{2} + \eta(\mathbf{B}\mathbf{S}_\perp)^2 + \eta' \mathbf{B}^2 \mathbf{S}_\perp^2, \quad (4.120)$$

где \mathbf{S}_\perp является локальной компонентой спина вдоль вектора намагниченности, и в Ур. (4.120) оставлены только члены, не зависящие от кристаллической анизотропии. Из Ур. (4.120) следует квадратичная зависимость $T_N(B) = T_N[1 - (B/B_c)^2]$, воспроизводя с высокой точностью результат на Рис. 1а статьи [281]. Это согласуется с предположением, что магнитная анизотропия действительно мала. В эффекте dHvA масса листа (d) вдали от сингулярных ориентаций поля также сравнительно невелика: $m^* \approx 2m_e$. [281] Таким образом, мы предполагаем, что АФМ упорядочение и явления, изучаемые в статье [281], слабо связаны с Кондо особенностями в CeIn_3 , то есть (d) и (j) участки ПФ слабо связаны с f-электронами. Следующий вопрос можно ли объяснить низкую $T_N = 10 \text{ K}$ для CeIn_3 через РККИ механизм [1] с помощью только (d)-листа ПФ. Диаметр (d)-листа равен Q и, следовательно, способен обеспечить соизмеримое РККИ взаимодействие. Также известно, что для CeIn_3 параметры ПФ не сильно отличаются от остальных соединений семейства ReIn_3 . [288] Из Ур. (4.120) следует $|\mathbf{S}_\perp|(Q) \approx (1 - T/T_N)^{1/2}$ при $B = 0$, и $|\mathbf{S}_\perp| = (1 - (B/B_c)^2)^{1/2}$ при $T = 0$.

Энергетический спектр вблизи "горячих точек" при ненулевых B и $|S_{\perp}|$.

Введем обменное взаимодействие $J\hat{\sigma}\mathbf{S}_i$ между локализованными спинами и электронами проводимости. Этот обмен приводит к РККИ взаимодействию между локализованными спинами [1]. Оно может быть оценено как $J \sim \sqrt{T_N/\nu_F}$, где ν_F – плотность состояний на уровне Ферми. Если предположить, что только (d) -части электронного спектра вносят вклад в РККИ взаимодействие, получаем $\nu_F \approx 3/2\varepsilon_F \approx 3m_1/k_{\text{belly}}^2 = 1/3000K$. Это дает $J \approx 170K$. Поэтому при всех \mathbf{B} , $\mu_B B \ll J$.

Эффективное магнитное поле, действующее на электроны

$$\mu_B \mathbf{B}_{eff} = \mu_B \mathbf{B} + J\mathbf{S}_{\parallel}, \quad (4.121)$$

где \mathbf{S}_{\parallel} локальная спиновая компонента, параллельная \mathbf{B} . Введем два взаимно перпендикулярных (в отсутствие анизотропии) единичных вектора $\hat{\mathbf{n}}_S$ и $\hat{\mathbf{n}}_B$ из матриц Паули вдоль направлений \mathbf{S}_{\perp} и \mathbf{B} соответственно. Тогда новый энергетический спектр в АФМ фазы определяется из двух уравнений для электронных состояний с импульсами $(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{Q})$:

$$\begin{cases} (\hat{E} - \hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{n}}_B \mu_B \mathbf{B}_{eff})\Psi_{\mathbf{k}} = -J\hat{\mathbf{n}}_S \mathbf{S}_{\perp} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \\ (\hat{E} - \hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \hat{\mathbf{n}}_B \mu_B \mathbf{B}_{eff})\Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -J\hat{\mathbf{n}}_S \mathbf{S}_{\perp} \Psi_{\mathbf{k}}. \end{cases} \quad (4.122)$$

Умножая оба уравнения на $\hat{\mathbf{n}}_S$ и исключая $\Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ получаем уравнение в спиновом пространстве:

$$(\hat{E} - \hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \hat{\mathbf{n}}_B \mu_B \mathbf{B}_{eff})(\hat{E} - \hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{n}}_B \mu_B \mathbf{B}_{eff})\Psi_{\mathbf{k}} = J^2 |\mathbf{S}_{\perp}|^2 \Psi_{\mathbf{k}} \quad (4.123)$$

Из этого Ур. (4.123) получаем четыре энергетические ветви спектра

$$E_{k,\sigma}^{\pm} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} - \mu_B B_{eff} \sigma\right)^2 + J^2 S_{\perp}^2}. \quad (4.124)$$

Если вектор \mathbf{Q} точно соединяет две противоположные шеи на Рис. 4.14, получаем около шеи

$$E_{k,\sigma}^{\pm} = \varepsilon_{\mathbf{k}} \pm \sqrt{(\mu_B B_{eff})^2 + J^2 |S_{\perp}|^2}. \quad (4.125)$$

Выше B_c две ветви переходят в Зеемановское расщепление уровней в эффективном поле в Ур. (4.121) и $S_{\parallel} = 1$. Для удобства, мы нормируем $|\mathbf{S}_{\parallel}|^2 + |\mathbf{S}_{\perp}|^2 = 1$. Подставляя Ур. (4.121) в (4.125) получаем при $\mu_B B \ll J$

$$E_{k,\sigma}^{\pm} \approx \varepsilon_{\mathbf{k}} \pm (J + \mu_B \mathbf{B} \mathbf{S}_{\parallel}). \quad (4.126)$$

АФМ упорядочение добавляет новые черты в закон дисперсии электронов и в Ферми-поверхность в модели (4.111). Со знаками (\pm) есть две ветви, показанные на рис. 4.15. Для знака (+) измерения dHvA при $B \ll B_c$ видят сокращение ширины шеек по сравнению с голым спектром (т. е. без АФМ упорядочения). Если $\Delta = k_{neck}^2/2m_1 < J$, эти шеи в (d)-частях ПФ будут полностью уничтожены, как показано на Рис. 4.15. В противном случае, эти шеи будут только сужаться. Для знака (-) ширина шей увеличивается из-за АФМ упорядочения.

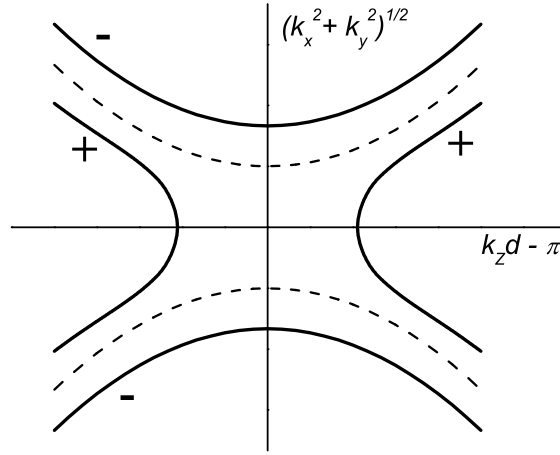


Рисунок 4.15: Схематическое изображение поверхности Ферми возле "шей" в присутствии (сплошная линия) и без (пунктирная линия) АФМ упорядочения. Знаки (\pm) на рисунке соответствуют (\pm) знакам в уравнении (4.124)

Авторы статьи [281] использовали ширину шеек $\approx 1/12$ орбиты окружности. Это близко к данным статьи [285], но не согласуется с оценками в статье [284]. Используя данные статьи [285] мы получим Δ сопоставимую с J . Если это верно, то можно действительно связать описанный выше механизм увеличения массы для $\mathbf{B} \parallel (111)$, с уширением щели между двумя внешними (-) траекториями на Рис. 4.15. Это уширение щели зависит от магнитного поля, как описано в Ур. (4.126). При $J = 170\text{K}$ и $B = 60\text{T}$ это дает приблизительно $0.4J$. Приведенная оценка для Δ и J показывает, что вполне реально объяснить наблюдаемое повышение массы при $\mathbf{B} \parallel (111)$. С другой стороны, мы должны повторить, что нет никаких экспериментальных данных для количественной подгонки, потому что до сих пор не было предпринято никаких попыток определить полевою зависимость расщепление зон и частот dHvA, соответствующих J-орбите на поверхности Ферми (вокруг шей).

Расщепление зон и dHvA эксперимент.

В сильном магнитном поле (выше B_c) эффективное Зеемановское расщепление, описываемое Ур. (4.121) с $|\mathbf{S}_{\parallel}| = 1$, приводит к спиновой зависимости энергетического спектра и ширины шеи. Зеемановское расщепление делает шею ПФ толще для одной спиновой компоненты и тоньше для другой, что приводит к зависимости эффективной массы от спина, как указано выше. Эта спиновая зависимость наблюдается для обоих (110) и (111) направлений магнитного поля. В частности, для направления $\mathbf{B} \parallel (111)$ логарифмическая расходимость эффективной массы из-за седловой точки на ПФ возможна только для одной спиновой компоненты (знак (-) на Рис. 4.15). С последующим увеличением магнитного поля (предполагая $J > 0$), эта компонента спина перестает давать вклад в dHvA сигнал с этой частотой, поскольку все траектории электрона начинают уходить с (d)-листа ПФ. Это может быть экспериментально проверено.[292] При $\mathbf{B} \parallel (110)$ ожидается такое же поведение, за исключением того, что спиновая компонента (-) для этого направления поля перестает давать вклад в старую частоту dHvA при более низких полях, чем для $\mathbf{B} \parallel (111)$. При $B < B_c$ расщепление электронного энергетического спектра сохраняется, но в этом случае $|\mathbf{S}_{\parallel}| = \sqrt{1 - |\mathbf{S}_{\perp}|^2} = B/B_c$. Хотя в статье [281] спиновая зависимость эффективной массы не учитывалась, она была замечена достаточно определенно в CeIn_3 под давлением.[292]

Более замечательный эффект для $\mathbf{B} \parallel (110)$ состоит в том, что два знака в Ур. (4.125) будут соответствовать двум различным частотам dHvA. Если одна из шеек исчезает (знак (+) на Рис. 4.15), одна из dHvA частот соответствует траектории вокруг (d)-листа ПФ. Первостепенное значение имеют dHvA эксперименты, явно измеряющие частоты от j-траекторий на ПФ как функции поля (для $\mathbf{B} \parallel (111)$, т. е. вдоль направления шеи), что подтвердило бы зонную структуру CeIn_3 с АФМ упорядочением, построенную в данной работе.

Подведем итог. Путем использования специфической формы энергетического спектра CeIn_3 в терминах сферической (d) и шее-образной (j) области на поверхности Ферми, мы построили полную (T-V) фазовую диаграмму для антиферромагнетизма в этом соединении, в согласии с экспериментами [281]. Мы проанализировали взаимосвязь между антиферромагнетизмом и внешним магнитным полем и их влияние на перестройку ПФ, в частности на существование, положение и ширину узкого "горла" ("шеи") ПФ. Используя полученную картину перестройки поверхности Ферми из-за АФМ упорядочения, мы количественно объяснили наблюдаемое повышение эффективной массы электрона в так называемых "горячих точках", наблюдаемое в статье [281]. Мы подчеркиваем важность

фазового перехода Лифшица "2.5" рода между магнитным CeIn_3 и немагнитным LaIn_3 . Наше намерение заключалось в том, чтобы показать, что информация о топологии поверхности Ферми важна для CeIn_3 , хотя квантовые критические явления при магнитных переходах в других тяжело-фермионных материалах могут иметь общий характер. Несколько простых экспериментов предложено для проверки изложенных выше идей.

4.5.2 Дальнейшие перспективы. Дополнительный механизм рассеяния электронов из-за пространственно неоднородного магнитного пробоя.

В этом разделе, в качестве дальнейшей перспективы развития теории магнитосопротивления в режиме перестройки поверхности Ферми из-за волны плотности, следуя работе 19 из списка публикаций диссертанта, мы полуфеноменологически предложим новый механизм рассеяния электронов, который может привести к сильному продольному магнитосопротивлению и даже иногда к инверсии МКО магнитосопротивления. Этот механизм возникает из-за слабой пространственной неоднородности ВП, которая в условиях перестройки ПФ также приводит к пространственно неоднородной щели и вероятности магнитного пробоя (МП). Причем в силу экспоненциальной зависимости вероятности МП от щели МП [295], даже слабая пространственная неоднородность щели ВП в условиях перестройки ПФ может привести к сильной пространственной неоднородности вероятности МП. Из-за пространственной неоднородности вероятности магнитного пробоя электроны на соседних слоях рассеиваются по-разному, что приводит к эффективному рассеянию и релаксации импульса даже в направлении вдоль магнитного поля и перпендикулярного проводящим слоям. Причем в чистых проводниках, таких как органические металлы, этот дополнительный механизм рассеяния может быть существенно сильнее обычного рассеяния на примесях. Действительно, при движении по циклотронной орбите в условиях МП, электрон за циклотронный период $2\pi/\omega_c$ несколько раз проходит через области МП (для замкнутой α -орбиты на Рис. 4.13с таких области четыре). Если вероятность предложенного механизма рассеяния в каждой такой области МП порядка единицы, а $\omega_c\tau \gg 1$, где τ – время рассеяния на обычных примесях, то предложенный новый механизм рассеяния будет намного сильнее примесного. Существует некоторое экспериментальное указание на то, что этот механизм рассеяния может быть достаточно сильным: в интервале магнитного поля $B \sim B_{MB}$, где B_{MB} – поле МП, определяющее

амплитуду МП [2]

$$p = \exp(-B_{MB}/B), \quad (4.127)$$

продольное магнитосопротивления в органических металлах сильно возрастает (см., например, Рис. 1 в статье [300] или Рис. 4 и 5 в статье [301]). Этот новый механизм рассеяния может оказаться очень полезным для измерений флуктуаций параметра порядка волн плотности или антиферромагнитного упорядочения в высокотемпературных сверхпроводниках, что является важной проблемой для понимания механизмов высокотемпературной сверхпроводимости. Однако применимость стандартной теории магнитного пробоя [2], развитой для трехмерных металлов, к сильно-коррелированным системам требует дополнительного исследования. Например, перенормировка электронных состояний из-за волн плотности, существенно меняющая электронные состояния вблизи "горячих" точек поверхности Ферми, связанных вектором нестинга, также может существенно изменить амплитуду магнитного пробоя и его полевую зависимость, поскольку область магнитного пробоя в импульсном пространстве находится именно в этих "горячих" точках поверхности Ферми. Поэтому, в условиях сильных $e-e$ корреляций формула (4.127) может сильно измениться, или, по крайней мере, поле пробоя B_{MB} оказаться перенормированным. Если волна плотности имеет мягкие моды, то рассеяние на этих мягких возбуждениях может повлиять на фазовую когерентность в условиях магнитного пробоя, что сделает не применимой теорию когерентного магнитного пробоя, развитую в [295]. Теоретическое описание влияния электрон-электронного взаимодействия на амплитуду магнитного пробоя довольно сложное и выходит за рамки диссертации. Эти вопросы требуют дальнейшего теоретического и экспериментального исследования. Однако, учет электрон-электронного взаимодействия за рамками приближения среднего поля для ВП не изменит факта появления дополнительного механизма рассеяния электронов из-за локальных изменений вероятности магнитного пробоя, вызванных статическими (по сравнению с циклотронным периодом) локальными вариациями щели волны плотности.

Ниже мы исследуем только переверот фазы магнитных квантовых осцилляций межслоевого магнитосопротивления, наблюдаемый в органическом металле α -(ET)₂MHg(SCN)₄ при переходе в состояние с волной плотности и, возможно, связанный с предложенным новым механизмом рассеяния электронов при перестройке ПФ.

Рассмотрим перестройку ПФ в α -(ET)₂MHg(SCN)₄, изображенную на Рис. 4.13с. Существует два подмножества электронных состояний на уровне Ферми в нашей системе с магнитным пробоем (МП, или в формулах "MB" от английского magnet-

ic breakdown). Первое появляется из-за МП и соответствует замкнутой траектории электрона вдоль α -карманов поверхности Ферми, см. Рис. 4.13с. Эта орбита отвечает за квантовые осцилляции с частотой F_α , которая будет единственно-наблюдаемой частотой при амплитуде МП $p = 1$. Второе подмножество включает в себя все другие электронные траектории, соответствующие перестроенной поверхности Ферми: открытые траектории на сильно гофрированных квази-одномерных листах ПФ, а также очень маленькие цилиндры ПФ, соответствующие частоте F_λ , а также множество других МП орбит, которые не вносят вклад в α -частоту МКО. Основной вклад в плотность состояний электронов от второго подмножества происходит от квази-одномерных неквантованных орбит, и ниже мы называем это второе подмножество квази-одномерной ветвью (q1D), принимая во внимание, что первое подмножество, производящее α -частоту, мы называем квази-двумерной ветвью (q2D). При конечной амплитуде МП присутствуют обе ветви спектра электронов. Чтобы пройти всю α -орбиту, электроны должны пройти четыре МП перехода, как показано на рис. 4.13(с). Таким образом, амплитуда вероятности прохождения α -орбиты составляет $p^4 R_D$ [297], где p - амплитуда МП и R_D - фактор Дингла, идущий от рассеяния электронов на короткодействующих примесях [298]; в чистых образцах R_D близок к единице. Следовательно, по аналогии со случаем МКО в режиме конечной амплитуды p МП [297], мы можем очень приблизительно оценить плотность состояний q2D электронов как $\rho_{2D}(\varepsilon) \approx |p|^4 \rho(\varepsilon)$, и плотность состояний на q1D ветви как $\rho_{1D}(\varepsilon) = (1 - |p|^4) \rho(\varepsilon)$, где $\rho(\varepsilon)$ - полная плотность состояний [299].

В α -(ET)₂MHg(SCN)₄ при $B = 20$ Т амплитуда МП p близка к единице: $|p| = \exp(-B_{\text{МВ}}/2B) \simeq 0.86$, используя оценку $B_{\text{МВ}} \simeq 6$ Т для поля магнитного пробоя. Однако, относительный вес q1D ветви спектра по-прежнему сопоставим с весом q2D ветви, то есть с ее вкладом в общую плотность состояний: $1 - p^4 \approx 0.45$. Значительный вклад в q1D состояний проявляется, например, в поведении угловых осцилляций.

МП с конечной амплитудой также индуцирует переходы между этими двумя ветвями спектра: от q1D к q2D с амплитудой p и вероятностью $|p|^2$, и от q2D к q1D с амплитудой $q = e^{i\phi} \sqrt{1 - |p|^2}$ и с вероятностью $1 - |p|^2$. Для идеального кристалла, амплитуда МП не зависит от координаты. Однако, в различных органических металлах параметр порядка имеет пространственные неоднородности, например, как в солитонной фазе ВП из-за неидеального нестинга (см. раздел 4.3) или из-за магнитного поля (см. раздел 4.2). Эти солитоны локально уменьшают значение щели ВП Δ_{DW} . Поскольку щель ВП определяет щель МП, а именно, $B_{\text{МВ}} \propto \Delta_{DW}^2$, амплитуда p МП значительно увеличивается на солитонных стенках или пятнах. Для простоты, рассмотрим модель, где амплитуда МП

$p = p_0(B)$ везде, за исключением некоторых областей (или пятен) с "дефектами" МП, где $p = p_1 \approx 1$. Это означает, что пятно МП дефекта перебрасывает электроны в q2D состояния. Рассеявшиеся электроны изменяют импульс не только в проводящей плоскости, но и в направлении, перпендикулярном слоям (z -направление), потому что дефекты МП локальные (ограниченные) вдоль оси z , что приводит к релаксации z -компоненты импульса электрона, подобно влиянию примесей.

Несмотря на очевидное сходство между рассеянием на дефектах МП и на случайным образом распределенных примесях, существует важное различие между ними. Примеси рассеивают электроны в любое состояние с той же энергией, и в борновском приближении скорость рассеяния на таких примесях $1/\tau_i \propto \rho(\varepsilon)$, где полная плотность состояний $\rho(\varepsilon)$ есть сумма q1D и q2D ветвей спектра: $\rho(\varepsilon) = \rho_{1D}(\varepsilon) + \rho_{2D}(\varepsilon)$. В нашей модели, дефекты МП рассеивают электроны только в q2D ветвь спектра, и их скорость рассеяния

$$1/\tau_{\text{MB}} \propto \rho_{2D}(E_F). \quad (4.128)$$

В τ -приближении межслоевая проводимость дается выражением [1]

$$\sigma_{zz} = 2e^2 \tau_{\text{tot}} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} v_{z\alpha}^2(\mathbf{k}) (-n'_F[\varepsilon_\alpha(\mathbf{k})]), \quad (4.129)$$

где $\alpha = 1, 2$ обозначает номер ветви, полная скорость рассеяния определяется суммой вкладов от дефектов МП и от примесей:

$$1/\tau_{\text{tot}} = 1/\tau_{\text{MB}} + 1/\tau_i, \quad (4.130)$$

а $v_{z\alpha}$ – компонента скорости электрона v_z на уровне Ферми из $\alpha = \text{q1D}$ или q2D частей спектра электронов. Производная функции распределения Ферми $n'_F(\varepsilon) = -1/\{4T \text{ch}^2[(\varepsilon - E_F)/2T]\} \rightarrow \delta(\varepsilon - E_F)$ при $T \rightarrow 0$, и Ур. (4.129) упрощается [1]:

$$\sigma_{zz} = 2e^2 \tau_{\text{tot}}(E_F) \langle v_z^2 \rangle \rho(E_F). \quad (4.131)$$

$\langle v_z^2 \rangle$ – квадрат скорости, усредненный по ПФ. В очень чистых образцах $1/\tau_{\text{MB}} \gg 1/\tau_i$, так что основная релаксация импульса электрона возникает в результате рассеяния на дефектах МП:

$$1/\tau_{\text{tot}} \approx 1/\tau_{\text{MB}}. \quad (4.132)$$

Увеличение скорости рассеяния в режиме МП может объяснить наблюдение необычно сильного магнитосопротивления в этом соединении при $B \sim 10$ Т.

Собирая Ур. (4.128)-(4.132), получаем

$$\sigma_{zz} \propto \frac{\langle v_{z1D}^2 \rangle \rho_{1D}(E_F) + \langle v_{z2D}^2 \rangle \rho_{2D}(E_F)}{\rho_{2D}(E_F)}. \quad (4.133)$$

Из-за квантования уровней Ландау, плотность состояний на q2D ветвях спектра $\rho_{2D}(E_F)$ является осциллирующей функцией энергии $E_F/\hbar\omega_c$ вокруг постоянного значения ρ_{2D0} . Для q1D ветви, квантования уровней Ландау нет, и плотность состояний на q1D ветви не осциллирует: $\rho_{1D}(E_F) \approx \rho_{1D0}$.

Средний квадрат скорости на q2D ветви $\langle v_{z2D}^2 \rangle$ – также осциллирующая функция $E_F/\hbar\omega_c$, но амплитуда и даже знак его осцилляций зависит от соотношения t_\perp , $\hbar\omega_c$ и \hbar/τ . В трехмерных металлах с $t_\perp \gg \hbar\omega_c$ осцилляции $\langle v_{z2D}^2 \rangle$ слабы и находятся в противофазе к осцилляциям плотности состояний, которая и определяет фазу шубниковских осцилляций в трехмерных металлах. В почти двумерных металлах с $t_\perp \ll \hbar\omega_c$, но для слабых квантовых осцилляций, осцилляции $\langle v_{z2D}^2 \rangle$ гораздо слабее, чем осцилляции $\rho_{2D}(E_F)$. Чтобы показать это, рассмотрим $\langle v_{z2D}^2 \rangle = I(E_F)/\rho_{2D}(E_F)$, где квантовые осцилляции $I(E_F) \equiv \sum_{FS} v_{z2D}^2$ даются Ур.(3) статьи [31] и осцилляции $\rho_{2D}(E_F) \propto 1/\tau_i(E_F)$ даются Ур. (2) статьи [31]. При $t_\perp \ll \hbar\omega_c$, если оставить только первые гармоники квантовых осцилляций, это дает

$$\rho_{2D}(\varepsilon) \propto 1 - 2R_D \cos(2\pi\varepsilon/\hbar\omega_c), \quad (4.134)$$

где R_D – фактор Дингла, а

$$I(\varepsilon) \propto 1 - 2R_D \cos(2\pi\varepsilon/\hbar\omega_c) \propto \rho_{2D}(\varepsilon), \quad (4.135)$$

т.е.

$$\langle v_{z2D}^2 \rangle = I(E_F)/\rho_{2D}(E_F) = \text{const} \quad (4.136)$$

с точностью до членов порядка R_D^2 . Следовательно, для $R_D \ll 1$ при $t_\perp \ll \hbar\omega_c$,

$$\langle v_{z2D}^2 \rangle \approx \langle v_{z1D}^2 \rangle \approx 2t_\perp^2 d^2/\hbar^2. \quad (4.137)$$

Для сильных квантовых осцилляций в почти двумерных металлах, т.е. когда $R_D \approx 1$ и $t_\perp \ll \hbar\omega_c$, осцилляциями $\langle v_{z2D}^2 \rangle$ нельзя пренебрегать, и они должны быть рассчитаны за пределами τ -приближения [32, 68]. В этом пределе, осцилляции $\langle v_{z2D}^2 \rangle$ находятся в фазе с осцилляциями плотности состояний $\rho_{2D}(\varepsilon)$:

$$\langle v_{z2D}^2 \rangle(\varepsilon) \approx \langle v_{z1D}^2 \rangle [1 - 2\beta R_D \cos(2\pi\varepsilon/\hbar\omega_c)], \quad (4.138)$$

где эффективный параметр $\beta \lesssim 1$ зависит от магнитного поля.

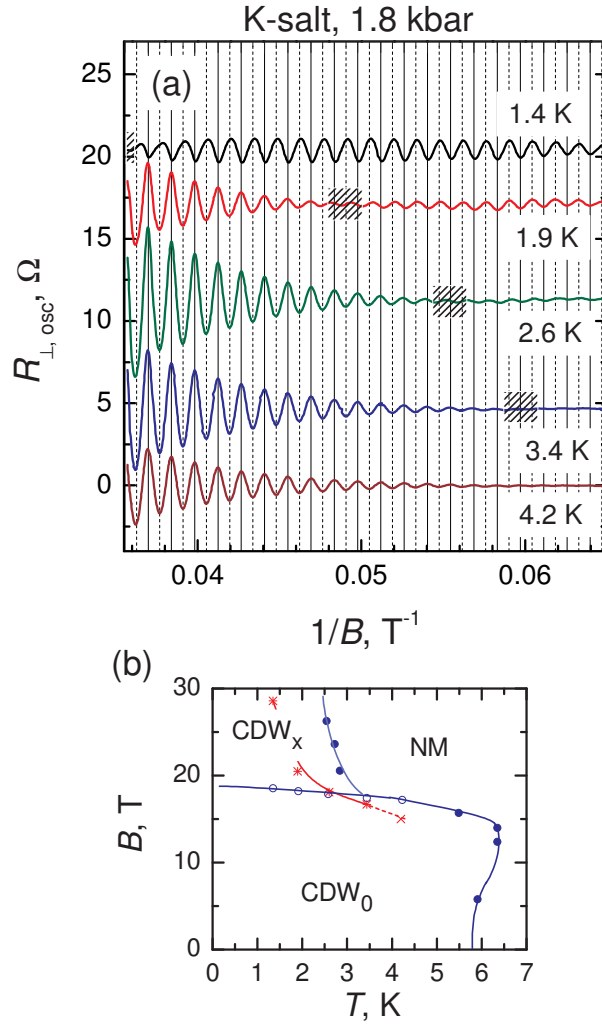


Рисунок 4.16: (а) Осцилляции межслоевого сопротивления в $\alpha\text{-(ET)}_2\text{KHg(SCN)}_4$ под давлением $P = 1.8$ кбар, отложенные как функция $1/B$ для различных температур. Вертикальные сплошные (штриховые) линии сетки соответствуют целым (полуцелым) числам заполнения уровней Ландау. Заштрихованными прямоугольниками указаны области, в которых фаза осцилляций изменяется на π . (б) $T - B$ фазовая диаграмма волны зарядовой плотности (заполненные и пустые синие круги), взятая из статьи [104] и похожая на теоретически предсказанную на Рис. 4.6. Красные звездочки обозначают точки инверсии фазы шубниковских осцилляций, определенные из данных на Рис. (а).

Подставляя Ур. (4.134) и (4.138) в Ур. (4.133), получаем

$$\sigma_{zz} \propto \text{const} + \left(\frac{\rho_{1D0}}{\rho_{2D0}} - \beta \right) 2R_D \cos(2\pi F/B). \quad (4.139)$$

Для сравнения, в случае примесного рассеяния, т.е. без МП дефектов, в квази-2D пределе мы получили бы [4]

$$\sigma_{zz} \propto 1 - 2R_D \cos(2\pi F/B). \quad (4.140)$$

Следовательно, в рамках модели выше, шубниковские осцилляции изменяют свой знак, когда отношение $\rho_{1D0}/\rho_{2D0} = \beta$. Таким образом, пространственные флуктуации магнитного пробоя могут привести к инверсии фазы сигнала шубниковских осцилляций. Поскольку щель МП, определяемая щелью волны плотности, мала возле границы между ВП и обычным металлическим состоянием, аномальная фаза шубниковских осцилляций возникает только при температурах несколько ниже перехода в ВП. Это объясняет температурную зависимость границы инверсии фазы шубниковских осцилляций, наблюдаемую в α -(ET)₂MHg(SCN)₄ [см. Рис. 4.16(b)], которая близка к теоретически предсказанной границе ВЗП-металл в сильном магнитном поле на Рис. 4.6. Наконец, согласно Рис. 4.16(b), аномальная фаза менее стабильна в ВЗП_x состоянии, которое имеет гораздо большую концентрацию солитонов. В рамках предложенной модели, это очевидно связано со значительным падением щели ВП в высокополевой ВЗП_x фазе.

Глава 5

Сверхпроводимость на фоне волны зарядовой или спиновой плотности

В предыдущей главе мы изучали сосуществование металлического состояния и волны зарядовой или спиновой плотности. В этой главе мы исследуем свойства и микроскопическую структуру сверхпроводимости (SC), сосуществующей с волной плотности (ВП или DW). Такое сосуществование может возникать, когда нестинг поверхности Ферми (ПФ) не является идеальным, и в состоянии с ВП некоторые электронные состояния остаются на уровне Ферми и приводят к куперовской неустойчивости. Закон дисперсии таких квазичастичных состояний сильно отличается от того, что было без ВП, что сильно меняет свойства сверхпроводимости на фоне ВП. Например, в этой главе мы покажем, что в таком сверхпроводящем состоянии возрастает верхнее критическое поле H_{c2} . Также будет исследовано взаимодействие спиновой структуры параметров порядка сверхпроводимости и волны спиновой плотности (ВСП). Будет показано, что если ВСП делит общую зону со сверхпроводимостью, то она сильно подавляет синглетное сверхпроводящее спаривание, в то время как намного слабее влияет на температуру триплетного сверхпроводящего перехода. Полученные в этой главе результаты помогают объяснить экспериментальные наблюдения в слоистых органических металлах $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ и $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$, где сверхпроводимость возникает на фоне ВП под давлением и проявляет многие необычные свойства. Эти результаты соответствуют статьям № 20-22 в списке публикаций диссертанта.

5.1 Введение

Взаимодействие между сверхпроводимостью (SC) и волной зарядовой или спиновой плотности является предметом активного изучения в течение более чем 30 лет (для обзора см., например, [270, 316]). ВП традиционно считается сильным препятствием для формирования сверхпроводимости, потому что она создает энергетическую щель на уровне Ферми.[302, 303, 304] Сосуществование ВП и сверхпроводимости было рассмотрено в металлах с несколькими зонами проводимости или с неидеальным нестингом ПФ, когда даже в состоянии с ВП существует конечная плотность электронных состояний на уровне Ферми.[305, 306, 307] Тогда, согласно простейшей картине [305, 306], температура сверхпроводящего перехода T_c^{SC} уменьшается экспоненциально, когда формируется ВП, потому что электроны, участвующие в образовании ВП, выпадают из сверхпроводящего конденсата.

Однако, в ряде соединений [например, в слоистых органических сверхпроводниках $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ и $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$],[232, 105, 272] температура сверхпроводящего перехода T_c^{SC} на фоне ВП очень близка (или даже превосходит) T_c^{SC} без ВП. В $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ сверхпроводимость сосуществует с волной спиновой плотности (ВСП) при температуре ниже $T_c^{SC} \approx 1.1\text{K}$ в интервале давления выше некоторого критического давления $P_{c1} \approx 8.5\text{кбар}$, но ниже $P_c \approx 9.5\text{кбар}$, при котором происходит фазовый переход 1-го рода из ВСП в металлическое состояние (см. Рис. 7 в статье [232], Рис. 1 в статье [272] или схематическую фазовую диаграмму на Рис. 5.1). Такое сосуществование довольно удивительно, так как это соединение имеет только одну квази-одномерную (Q1D) зону проводимости. Особое внимание было уделено тому, что верхнее критическое поле H_{c2} в сверхпроводящем состоянии в несколько раз превышает ожидаемый парамагнитный предел [308] (см. Refs. [276, 309]), и никаких изменений в сдвиге Найта не наблюдается в этом соединении по мере понижения температуры [310]. Обе эти черты позволяют говорить о спин-триплетном сверхпроводящем состоянии в $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$. Кроме того, верхнее критическое поле H_{c2} перпендикулярно проводящим слоям, обусловленное орбитальным эффектом магнитного поля, сильно увеличивается когда давление достигает P_{c1} и имеет необычную кривизну вверх как функция температуры[271]. Эти наблюдения говорят об очень сильном влиянии ВП на сверхпроводящие свойства в этом смешанном состоянии.

Электронная структура смешанной фазы в $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ все еще находится в стадии обсуждения и изучения. Угловые осцилляции магнитосопротивления [311, 266] говорят

скорее в пользу макроскопического пространственного разделения фаз [266], однако их интерпретация в состоянии с неоднородной ВП требует дополнительного теоретического анализа. Разделение фаз ВП и сверхпроводимости (или металла) в виде макроскопических доменов [232, 271, 266], будучи естественным при внешнем ограничении постоянного объема образца, кажется странным при фиксированном давлении, когда весь образец может выбрать состояние с наименьшей свободной энергией. Кроме того, этот сценарий не позволяет объяснить рост H_{c2} перпендикулярно проводящим слоям. Действительно, наблюдаемая в [271] зависимость верхнего критического поля от давления и температуры требует, чтобы толщина d сверхпроводящих доменов, если они существуют, была значительно меньше длины когерентности сверхпроводимости (SC) $\xi_{SC} = \pi\hbar v_F/\Delta_{SC} \sim 10^{-4}$ см, когда давление приближается к P_{c1} [см. Ур. (5.53) и обсуждение в разд. 5.3 и 5.5.2]. При этом возникает множество вопросов о структуре такого микроскопически смешанного состояния, потому что если ширина доменов меньше ξ_{SC} (например, порядка длины когерентности ВП $\xi_{DW} = \pi\hbar v_F/\Delta_{DW}$), то размерное квантование, связанное с ограничением волновых функций электрона на этом масштабе, требует затрат дополнительной энергии больше, чем энергетическая щель сверхпроводимости.

Как было показано в предыдущей главе 4, существуют две различные микроскопические структуры состояния ВП с неидеальным нестингом, при которых сохраняется металлическая проводимость. В обоих сценариях увеличение давления приводит к росту "антинестингового" члена t'_b в Ур. (4.12), что вызывает постепенное подавление ВП. В первой пространственно однородной структуре, подавление ВП при $P > P_{c1}$ идет через формирование бесщелевых металлических карманов в электронном спектре (или на поверхности Ферми), которые при увеличении давления увеличиваются в импульсном пространстве, сливаясь в нормальное металлическое состояние (постепенно или через фазовый переход). Этот сценарий похож на рассмотренный в статьях [305, 306], однако отличается от него, поскольку формирование ВП сильно изменяет закон дисперсии квазичастиц в бесщелевых частях поверхности Ферми, что в конечном счете и приводит к изменению сверхпроводящих свойств на фоне ВП. Во втором сценарии микроскопического сосуществования сверхпроводимости и ВП, уже изучавшемся нами в разделе 4.3, параметр порядка ВП при давлении $P > P_{c1}$ становится пространственно неоднородным: на нем возникают амплитудные солитоны [38, 37]. Эти солитонные структуры часто возникают в состояниях с волнами зарядовой плотности при высоком давлении или в магнитном поле (см., например, обзоры в Refs. [38, 37] и разделы 4.2 и 4.3 ранее). Металлическая или сверхпроводящая фаза проявляются в виде металлических доменных стенок, и

концентрация этих солитонных стенок возрастает с увеличением давления. При конечной плотности солитонов, т.е. выше P_{c1} , электронные волновые функции в одиночных солитонах сильно перекрываются, образуя новую почти периодическую сверхструктуру ВП и приводя к металлическому поведению на фоне ВП.

Обе описанные выше микроскопические структуры ВП могут реализоваться в сверхпроводниках на фоне ВП и будут изучаться в этой главе. Эксперименты по ядерному магнитному резонансу (ЯМР) [312] согласуются со сценарием, где разделение фаз происходит на микроскопическом масштабе, не превышающем длину когерентности ВП $\xi_{DW} = \pi\hbar v_F/\Delta_{DW}$, таким образом подтверждая описанные выше сценарии. В обоих случаях, при достаточно низкой температуре, сверхпроводимость появляется при давлении $P > P_{c1}$, и ВП имеет сильное влияние на свойства такой смешанной фазы.[313] Как мы увидим ниже, в обоих случаях ВСП сильно уменьшает температуру перехода спин-синглетной сверхпроводимости, что может сделать спин-триплетное спаривание более выгодным в согласии с экспериментами в $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ [276, 309, 310]. Эта возможность появляется из-за спин-зависящего рассеяния на конденсате ВСП и отсутствует, когда сверхпроводимость сосуществует с ВЗП. Однако, ВЗП (как и ВСП) изменяет спектр квази-частиц и перенормирует e-e взаимодействие, что также сильно изменяет сверхпроводящие свойства, например, увеличивает верхнее критическое поле.

В настоящей главе мы подробно изучим микроскопическую структуру и свойства сверхпроводимости на фоне ВП. При этом мы будем считать, что температура сверхпроводящего перехода много меньше температуры перехода в ВП, что является самой распространенной ситуацией. В этом случае энергетический масштаб ВП много больше энергетического масштаба сверхпроводимости. Поэтому, обратное влияние сверхпроводимости на волну плотности будет пренебрежимо мало для того, чтобы существенно повлиять на микроскопическую структуру ВП, и этим обратным влиянием можно пренебречь. Напротив, влияние ВП на сверхпроводимость будет определяющим. Поэтому вместо термина конкуренции сверхпроводимости и ВП, который часто применяют при разложении свободной энергии по степеням двух (ВП и сверхпроводимости) параметров порядка, мы чаще используем выражение "сверхпроводимость на фоне ВП". Этот подход позволяет более глубоко изучить влияние ВП на сверхпроводящие свойства, чем при разложении Гинзбурга-Ландау по двум параметрам порядка. Поэтому для дальнейшего изучения необходимо сначала описать состояние с ВП при неидеальном нестинге без учета сверхпроводимости. В разделе 5.2 будет подробно рассмотрен случай однородной ВП с бесщелевыми карманами на

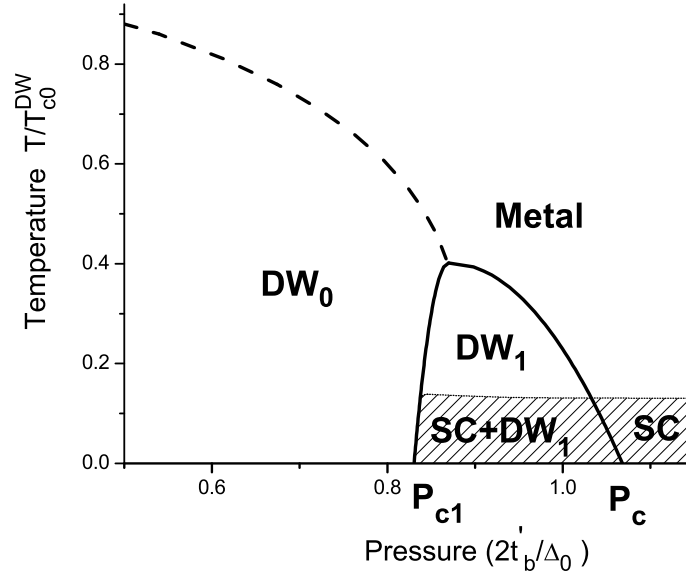


Рисунок 5.1: Схематическое изображение фазовой диаграммы в $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$, где сверхпроводимость сосуществует с ВП в некотором интервале давлений выше P_{c1} , но ниже P_c . DW_0 обозначает однородную ВП, когда энергетическая щель покрывает всю квазиодномерную поверхность Ферми. DW_1 обозначает ВП при неидеальном нестинге, когда член t'_b в законе дисперсии (4.12) является достаточно сильным по сравнению с щелью ВП Δ_0 , так что возникают бесщелевые карманы ПФ или неоднородная солитонная структура ВП.

ПФ, возникающими выше критического давления $P > P_{c1}$, и на этом фоне будет исследована куперовская неустойчивость для различных типов спаривания. В разделе 5.3 мы изучим свойства сверхпроводимости, возникающие на фоне такого однородного состояния с ВП. В разделе 5.4 мы изучим возникновение и свойства сверхпроводимости на фоне однородной волны спиновой плотности (ВСП), когда происходит зацепление спиновой структуры параметров порядка этих двух многочастичных состояний, что может повлиять на тип сверхпроводящего спаривания. В разделе 5.5 будет рассмотрен случай сверхпроводимости на фоне ВП с солитонной структурой. В обоих сценариях будет показано, что изменение закона дисперсии квази-частиц волной плотности сильно влияет на многие сверхпроводящие свойства, такие как зависимость верхнего критического поля от температуры и давления. Наши результаты направлены в основном на описание слоистых квази-одномерных органических сверхпроводников, таких как $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$,

$(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$, $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$, но также могут применяться и к другим сверхпроводникам с ВП.

5.2 Сверхпроводящая неустойчивость на фоне однородной волны плотности

5.2.1 Модель

Для описания волны плотности (ВП) мы используем ту же модель, что и в предыдущей главе (все формулы разделов 4.1 и 4.2.2). То есть, мы ограничимся приближением среднего поля (раздел 4.1) и будем использовать квази-одномерный закон дисперсии электронов, заданный Ур. (4.11) и (4.12) из раздела 4.2.2. Поскольку магнитное поле разрушает сверхпроводимость намного раньше, чем волну плотности, зеемановской энергией σH в Ур. (4.11), подавляющей ВЗП, можно пренебречь.

Однако, для описания сверхпроводимости не достаточно ограничиться е-е взаимодействием при $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_N$, и вместо двух констант взаимодействия U_c и U_s для сверхпроводящего спаривания нужно рассматривать функции $U_c(\mathbf{Q})$ и $U_s(\mathbf{Q})$. Строго говоря, для сверхпроводящего спаривания, нужно учитывать как импульсную, так и частотную зависимость потенциала (4.4). Ниже мы рассмотрим лишь упрощенную модель, аналогичную модели БКШ [315], где частотная зависимость потенциала взаимодействия учитывается только через ультрафиолетовую обрезку в куперовской петле (поляризационном операторе) на дебаевской частоте. Электрон-электронное (е-е) взаимодействие через обмен фононами всегда дает притяжение и только спин-независящее зарядовое е-е взаимодействие $U_c(\mathbf{Q})$. Кулоновское и обменное е-е взаимодействия в модели Хаббарда дают как зарядовую $U_c(\mathbf{Q})$, так и спиновую $U_s(\mathbf{Q})$ функции е-е взаимодействия.

Без ВП, функции $U_c(\mathbf{Q})$ и $U_s(\mathbf{Q})$ определяют возможность и тип сверхпроводящего спаривания (см. обзоры в [316, 317, 318]). В присутствии пайерлсовской неустойчивости, голые функции е-е взаимодействия $U_{c0}(\mathbf{Q})$ и $U_{s0}(\mathbf{Q})$ могут быть сильно перенормированы, что влияет на тип спаривания и температуру сверхпроводящего перехода T_c^{SC} [317, 318]. Многие теоретические подходы были использованы для расчета эффективного сверхпроводящего взаимодействия в присутствии неустойчивости по отношению к ВП: суммирование паркетных диаграмм в квази-одномерных металлах [319], приближение случайных фаз (суммирование лестничных диаграмм, или RPA) в квази-одномерных металлах [320, 321], ренормгрупповой подход [322, 323], теория возмущений до третьего

порядка [324], метод обмена флуктуациями [325], и т.д. Перенормированные функции $U_c(\mathbf{Q})$ и $U_s(\mathbf{Q})$ сильно зависят от голых (неперенормированных или исходных) функций взаимодействия [320, 322], которые, как правило, неизвестны. Таким образом, теоретические предсказания о типе сверхпроводящего спаривания в конкретных соединениях по-прежнему остаются неясными и зачастую противоречивы, как и расчеты перенормированных функций е-е взаимодействия. Однако, из этих расчетов можно сделать достаточно общее заключение: перенормировка функций е-е взаимодействия из-за суммирования лестничных диаграмм вблизи пайерлсовской неустойчивости обычно приводит (1) к усилению е-е взаимодействия в куперовском канале и (2) к его сильной зависимости от импульса. Первое увеличивает температуру сверхпроводящего перехода, иногда полностью компенсируя уменьшение плотности состояний вблизи уровня Ферми из-за образования ВП. Второе увеличивает вероятность куперовского спаривания электронов с ненулевым угловым моментом (например, d-спаривания).

В дополнение к перенормировке е-е взаимодействия, ВП влияет сильно на энергетический спектр квази-частиц. Это изменение спектра приводит к качественно новым сверхпроводящим свойствам, которые отсутствовали без ВП.¹ Ниже мы сосредоточимся на влиянии этого изменения спектра квазичастиц на сверхпроводящие свойства на фоне ВП. Для этого используем упрощенную модель е-е взаимодействия. (1) При исследовании сверхпроводимости на фоне волны плотности, для сокращения длины формул мы положим $U_s(\mathbf{Q}) = 0$ (при описании самих ВП, особенно волн спиновой плотности, будем учитывать $U_s(\mathbf{Q}) \neq 0$). Включение $U_s(\mathbf{Q}) \neq 0$ в куперовское спаривание изменяет только функции е-е взаимодействия для разных типов спаривания (см. Ур. (10) в статье [317]). Многие важные качественные характеристики сверхпроводимости на фоне ВП, такие как увеличение верхнего критического поля H_{c2} или подавление синглетного спаривания волной спиновой плотности, могут быть получены в этой упрощенной модели. (2) Что касается зависимости от импульса $U_c(\mathbf{Q})$, для описания сверхпроводимости в одномерных и квази-одномерных металлах, как правило, выделяют только рассеяния вперед и назад:

$$U_c(\mathbf{Q}) = \begin{cases} U_c^f, & Q_x \ll 2k_F \\ U_c^b, & Q_x \approx 2k_F \end{cases} . \quad (5.1)$$

В зависимости от знаков и отношения констант е-е взаимодействия для рассеяния назад

¹Например, как будет показано ниже, возникает заметный рост и сильная зависимость верхнего критического поля H_{c2} от давления. Также будет показано, что даже без учета перенормировки е-е взаимодействия, волна спиновой плотности сильно влияет на тип сверхпроводящего спаривания.

U_c^b и вперед U_c^f , выигрывает синглетное или триплетное сверхпроводящее спаривание. Сильная Q_y -зависимость е-е взаимодействия может привести к d- и f-спариванию [322, 323]. Мы не рассматриваем эти экзотические типы сверхпроводящего спаривания за отсутствие их надежного экспериментального подтверждения в квази-одномерных органических металлах. Доступные измерения электропроводности и теплопроводности в органических сверхпроводниках с ВП показало отсутствие нулей параметра порядка на поверхности Ферми [326], что исключает большинство спариваний с более высокими гармониками вдоль k_y . Гамильтониан (4.1) также не учитывает спин-орбитального взаимодействия, которое предполагается слабым.

Ниже мы будем считать температуру перехода в ВП гораздо выше температуры сверхпроводящего перехода: $T_c^{DW} \gg T_c^{SC}$, что соответствует большинству сверхпроводников на фоне ВП. Например, в $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ $T_c^{DW} \approx 8.5\text{K} \gg T_c^{SC} \approx 1.1\text{K}$, а в $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$, $T_c^{CDW} \approx 8\text{K} \gg T_c^{SC} \approx 0.1\text{K}$. Поэтому мы в первую очередь изучаем структуру состояния с ВП в интервале давлений $P_{c1} < P < P_c$, а затем рассмотрим сверхпроводимости на этом фоне.

5.2.2 Пространственно однородная волна плотности с открытыми карманами на поверхности Ферми

Пространственно однородная волна зарядовой плотности с бесщелевыми состояниями на уровне Ферми, возникающими из-за неидеального нестинга и приводящими к возникновению открытых карманов на поверхности Ферми, уже была рассмотрена в разделах 4.1 и 4.2.2. Ниже мы запишем формулы, аналогичные Ур. (4.16)-(4.24), но с учетом возможной спиновой структуры параметра порядка для волны спиновой плотности. В случае однородного параметра порядка ВП, $\Delta_0(x) = \Delta_0 = \text{const}(T, P)$, электронные функции Грина в состоянии с ВП в рамках приближения среднего поля могут быть записаны в явном виде. Введем термодинамические функции Грина

$$\hat{g}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \tau - \tau') = \langle T_\tau \{ a_\alpha^\dagger(\mathbf{k}', \tau') a_\beta(\mathbf{k}, \tau) \} \rangle, \quad (5.2)$$

где операторы берутся в представлении Гейзенберга, и функция Грина $\hat{g}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \tau - \tau')$ является оператором в спиновом пространстве. Параметр порядка волны зарядовой плотности (ВЗП)

$$\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}} = U_c \sum_{\mathbf{k}} \hat{g}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, -0) = \Delta_{\mathbf{Q}} \quad (5.3)$$

является единичным оператором в спиновом пространстве, в то время как параметр порядка волны спиновой плотности (ВСП) выражается через матрицы Паули $\hat{\sigma}$:

$$\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}\alpha\beta} = U_s (\vec{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \vec{\sigma}_{\gamma\delta}) \sum_{\mathbf{k}} \hat{g}_{\gamma\delta}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, -0) = (\vec{\sigma}\vec{l})\Delta_{\mathbf{Q}}, \quad (5.4)$$

где комплексный вектор \vec{l} определяет поляризацию ВСП. В присутствии магнитного поля \vec{H} и без внутренней магнитной анизотропии, $\vec{l} \perp \vec{H}$. Магнитное поле берется довольно слабыми, влияющим только на сверхпроводимость, но не на ВП [327], поскольку сильное магнитное поле будет подавлять сверхпроводимость. Мы рассмотрим только один параметр порядка ВП, т.е. $\Delta_{\mathbf{Q}} \neq 0$ только для $\mathbf{Q} = \pm\mathbf{Q}_N$, где $\mathbf{Q}_N \approx 2k_F\mathbf{e}_x + (\pi/b)\mathbf{e}_y + (\pi/\tilde{c})\mathbf{e}_z$, и $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ - это единичные векторы в x, y, z направлениях. В рамках приближения среднего поля имеем

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{Q}\mathbf{k}} a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) a_{\beta}(\mathbf{k}) \hat{\Delta}_{\mathbf{Q}\alpha\beta}.$$

Эрмитовость Гамильтониана требует $\hat{\Delta}_{-\mathbf{Q}\alpha\beta} = \hat{\Delta}_{\mathbf{Q}\beta\alpha}^*$. Ниже мы опускаем явные спиновые индексы, оставив только символ "шляпки" над спиновыми операторами. Для ВСП уравнения движения в частотном представлении принимают вид

$$[i\omega - \varepsilon(\mathbf{k})]\hat{g}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \omega) - \sum_{\mathbf{Q}} \Delta_0(\vec{\sigma}\vec{l})\hat{g}(\mathbf{k}', \mathbf{k} - \mathbf{Q}, \omega) = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \quad (5.5)$$

Если пренебречь рассеянием в состоянии с $|k_x| \gtrsim 2k_F$, уравнения (5.5) разделяются:

$$\begin{pmatrix} i\omega_n - \varepsilon(\mathbf{k}) & \Delta_0(\vec{\sigma}\vec{l}) \\ \Delta_0^*(\vec{\sigma}\vec{l}) & i\omega_n - \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{Q}) \end{pmatrix} \hat{G} = \hat{I}, \quad (5.6)$$

где матричная функция Грина

$$\hat{G} \equiv \begin{pmatrix} g^{RR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega) & g^{LR}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, \omega)(\vec{\sigma}\vec{l}) \\ g^{RL}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}, \omega)(\vec{\sigma}\vec{l}) & g^{LL}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}, \omega) \end{pmatrix}, \quad (5.7)$$

\hat{I} - это единичная матрица 2×2 , а R и L надстрочные индексы обозначают правый и левый листы поверхности Ферми электронов:

$$a_{\alpha}(\mathbf{k}, \tau) \equiv \begin{cases} a_{\alpha}^R(\mathbf{k}, \tau), & k_x > 0 \\ a_{\alpha}^L(\mathbf{k}, \tau), & k_x < 0 \end{cases}. \quad (5.8)$$

Электронные функции Грина в состоянии с ВЗП (см. разделы 4.2.2 и 4.2.3) получаются из Ур. (5.6) и (5.7) удалением спиновых операторов $(\vec{\sigma}\vec{l})$ из недиагональных элементов.

Вводя обозначения $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = [\varepsilon(\mathbf{k}') \pm \varepsilon(\mathbf{k})] / 2$ и

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) \equiv \varepsilon_{+}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}) \pm \sqrt{\varepsilon_{-}^2(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}) + |\Delta_0|^2}, \quad (5.9)$$

такие же как и в Ур. (4.23) и (4.10), из Ур. (5.6) получаем

$$g^{LR}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, \omega) = \frac{\Delta_0}{[i\omega - E_1(\mathbf{k})][i\omega - E_2(\mathbf{k})]}, \quad (5.10)$$

$$g^{RL}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}, \omega) = \frac{\Delta_0^*}{[i\omega - E_1(\mathbf{k})][i\omega - E_2(\mathbf{k})]},$$

и

$$g^{RR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega) = \frac{i\omega - \varepsilon(\mathbf{k})}{[i\omega - E_1(\mathbf{k})][i\omega - E_2(\mathbf{k})]} = g^{LL}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega). \quad (5.11)$$

Для квазичастиц с законом дисперсии (5.9) открытые (бесщелевые) карманы на поверхности Ферми появляются, когда $|\varepsilon_{+}(\mathbf{k})|_{\max} = 2t'_b > |\Delta_0|$, и эти карманы ответственны за куперовскую неустойчивость при $P > P_{c1}$. С законом дисперсии (4.12) при $P > P_{c1}$ существуют четыре открытых кармана на каждом из двух листов исходной поверхности Ферми (см. Рис. 4.11): два электронных кармана с $E_2(k) = \varepsilon_{+}(\mathbf{k}) + \sqrt{\varepsilon_{-}^2(\mathbf{k}) + |\Delta_0|^2} < 0$ при $k_{y\max}b = \pi/2, 3\pi/2$ и $k_{x\max} = k_F$, и два дырочных кармана с $E_1(k) = \varepsilon_{+}(\mathbf{k}) - \sqrt{\varepsilon_{-}^2(\mathbf{k}) + |\Delta_0|^2} > 0$ при $k_{y\max}b = 0, \pi$ и $k_{x\max} = k_F \pm 2t_b/v_F$ (см. Рис. 4.11). Дырочные карманы новой ПФ являются вытянутыми эллипсами, удовлетворяющими $E_1(\mathbf{k}) = 0$ и имеющими главные оси вдоль векторов \mathbf{k}_x и \mathbf{k}_y . Два электронных кармана на ПФ являются подобными эллипсами, повернутыми в k_x - k_y плоскости на углы

$$\phi_e = \pm \arctan(2t_b b / \hbar v_F). \quad (5.12)$$

Вблизи точек $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\max}$, где $|\varepsilon_{+}(\mathbf{k})|$ имеет максимум и формируются открытые карманы, дисперсию (5.9) можно разложить по малым отклонениям $\Delta\mathbf{k} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}_{\max}$ от этих точек:

$$E_1(\Delta k_y, \varepsilon_{-}) \approx -\delta_F + a_1(\Delta k_y)^2 + b_1\varepsilon_{-}^2, \quad (5.13)$$

где $\Delta k_y \equiv k_y - k_{y\max}$ и из Ур. (4.12) получаем

$$\varepsilon_{-}(\mathbf{k}) \approx v_F(k_x - k_F) - 2t_b b \sin(k_{y\max}b) \Delta k_y / \hbar, \quad (5.14)$$

$$\delta_F \equiv |\varepsilon_{+}(\mathbf{k})|_{\max} - |\Delta_0| = 2t'_b - |\Delta_0|,$$

$$a_1 \approx 4t'_b b^2 \text{ and } b_1 \approx 1/2\Delta_0. \quad (5.15)$$

Здесь δ_F имеет смысл энергии Ферми в этих небольших карманах [331], а последний член в Ур. (5.14) вращает электронные карманы ПФ на угол (5.12).

Без ВП, плотность состояний электронов с квази-одномерным законом дисперсии (4.11) на уровне Ферми равна

$$\rho_0(E_F) = \int \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \delta[\hbar v_F (k_x \pm k_F)] = \frac{1}{\pi \hbar v_F b}.$$

Для оценки плотности состояний на уровне Ферми в состоянии с ВП, когда открытые карманы только появляются, воспользуемся соотношением [332]

$$\rho(\varepsilon) = -(1/\pi) \text{Im} [\text{Tr} G_{ret}(\varepsilon)]. \quad (5.16)$$

Запаздывающая функция Грина получается из (5.11) аналитическим продолжением $i\omega \rightarrow \varepsilon + i0$. Его подстановка в (5.16) дает плотность состояний на уровне Ферми (при $\varepsilon = 0$):

$$\rho(E_F) = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{E_1(\mathbf{k})} \delta[E_2(\mathbf{k})] + \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{E_2(\mathbf{k})} \delta[E_1(\mathbf{k})] \right), \quad (5.17)$$

где $\delta[x]$ как обычно δ -функция Дирака. Для малых карманов ПФ, то есть при $\delta_F \ll \Delta_0$, вычеты полюсов функций Грина равны

$$\frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{E_1(\mathbf{k})} = \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{E_2(\mathbf{k})} \approx \frac{1}{2},$$

и вклад в плотность состояний одного кармана ПФ при одной ориентацией спина равен

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \int \frac{dk_x d\Delta k_y}{(2\pi)^2} \delta \left[\frac{a_1 (\Delta k_y)^2 + b_1 \varepsilon_-^2 - \delta_F}{2} \right] \\ &= \int \frac{dx dy / (2\pi)^2}{\hbar v_F \sqrt{a_1 b_1}} \frac{\delta(x^2 + y^2 - \delta_F)}{2} \\ &= \int \frac{dr^2 / 8\pi}{\hbar v_F b} \delta(r^2 - \delta) = \frac{1}{8\pi \hbar v_F b}. \end{aligned}$$

Для дисперсии (4.12) при $2t'_b > \Delta_0$ возникает 8 открытых карманов на ПФ, и общая плотность состояний на уровне Ферми в расчете на одну спиновую компоненту в состоянии с волной плотности получается такая же, как и без ВП:

$$\rho(E_F) = 8\rho_1 = \frac{1}{\pi \hbar v_F b}. \quad (5.18)$$

Этот результат отличается от изученных ранее моделей [305, 306], где закон дисперсии электронов на открытых (бесщелевых) участках ПФ не меняется после формирования ВП, и плотность состояний на уровне Ферми уменьшается, когда формируется ВП, так что температура сверхпроводящего перехода уменьшается экспоненциально. В нашей модели,

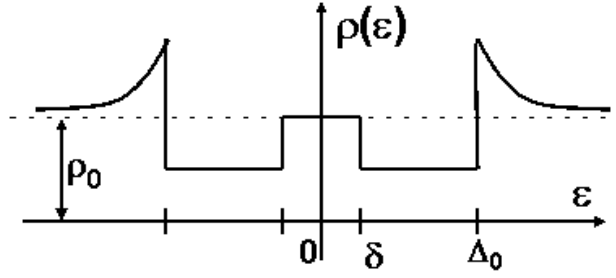


Рисунок 5.2: Схематическое изображение плотности состояний $\rho(\varepsilon)$ вблизи уровня Ферми в состоянии с ВП при $2t'_b > \Delta_0$, содержащем бесщелевые карманы на ПФ. На рис. ρ_0 - плотность состояний в металлической фазе, Δ_0 - энергетическая щель ВП, и $\delta \equiv \delta_F$ - энергия Ферми в новом открытом кармане ПФ [см. Ур. (5.15)].

плотность состояний на уровне Ферми в состоянии с ВП с открытыми карманами на ПФ такая же, как и без ВП. Поэтому, температура сверхпроводящего перехода в нашей модели меняется не настолько сильно, когда ВП с бесщелевыми карманами полностью подавляется с восстановлением металлического состояния (см. разд. 5.2.4 ниже для более подробной информации). Плотность состояний вблизи уровня Ферми определяет также многие другие физические свойства. Ее схематический вид как функция энергии, отсчитанной от уровня Ферми, показана на Рис. 5.2.

5.2.3 Куперовская неустойчивость в металлической фазе квазиодномерных металлов

Прежде чем перейти к описанию сверхпроводимости на фоне волны плотности, рассмотрим как выглядит куперовская неустойчивость в металлической фазе квазиодномерных металлов. В терминах электронов на левом и правом листах поверхности Ферми (соответственно движущихся влево и вправо), Гамильтониан взаимодействия в Ур. (4.3),(4.4) и (5.1) принимает вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{Q}} U_c^b a_\alpha^{\dagger R}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) a_\alpha^L(\mathbf{k}) a_\beta^{\dagger L}(\mathbf{k}' - \mathbf{Q}) a_\beta^R(\mathbf{k}') \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{Q}} U_c^f a_\alpha^{\dagger R}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) a_\alpha^R(\mathbf{k}) a_\beta^{\dagger L}(\mathbf{k}' - \mathbf{Q}) a_\beta^L(\mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (5.19)$$

Верхние индексы L и R для операторов рождения $a_\alpha^{\dagger L(R)}$ и уничтожения $a_\alpha^{L(R)}$ электронов означают, что они на левом и правом листах поверхности Ферми соответственно.

Поскольку каждая функция Грина имеет два оператора рождения или уничтожения электронов, то эти функции приобретают два верхних индекса L или R [см. Ур. 5.7]. Без волны плотности и сверхпроводимости, то есть в металлическом состоянии, импульс электронов сохраняется, а значит индексы L или R в функциях Грина должны совпадать. В состоянии с волной плотности рассеяние на ее волновой вектор \mathbf{Q}_0 означает смену листа ПФ и смене индекса. Введем также аномальные функции Грина (функции Горькова) [332]:

$$F^{L(R)R(L)}(X_1, X_2) = \langle T(\hat{\Psi}^{L(R)}(X_1)\hat{\Psi}^{R(L)}(X_2)) \rangle, \quad (5.20)$$

где $X = (\tau, \mathbf{r})$ и $\hat{\Psi}^{L(R)}(X)$ - полевые операторы для левой и правой части зоны Бриллюэна, формально, состоящей из электронов с импульсами $P_{\parallel} < 0$ (L) и $P_{\parallel} > 0$ (R). Средние значения в Ур. (5.20) при $\tau_1 = \tau_2 + 0$

$$\begin{aligned} \hat{f}_{\alpha\beta}^{LR}(\mathbf{r}) &= \langle \hat{\Psi}_{\alpha}^L(\mathbf{r})\hat{\Psi}_{\beta}^R(\mathbf{r}) \rangle; \\ \hat{f}_{\alpha\beta}^{RL}(\mathbf{r}) &= \langle \hat{\Psi}_{\alpha}^R(\mathbf{r})\hat{\Psi}_{\beta}^L(\mathbf{r}) \rangle \end{aligned} \quad (5.21)$$

имеют смысл волновой функции куперовских пар и определяет параметра порядка сверхпроводимости $\hat{\Delta}_{SC}(\mathbf{r})$. Символ "шляпки" над функциями $\hat{f}^{LR}(\mathbf{r})$ и $\hat{\Delta}_{SC}(\mathbf{r})$ означает, что эти функции являются операторами в спиновом пространстве. В материалах с пространственной инверсией, таких как $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$, $\hat{f}^{LR} = \pm \hat{f}^{RL}$, а знак (\pm), зависит от того, является ли сверхпроводящее спаривание синглетным (+) или триплетным (-). Ниже мы предполагаем пространственно однородный параметра порядка сверхпроводимости: $\hat{f}_{\alpha\beta}^{LR}(\mathbf{r}) = \hat{f}_{\alpha\beta}^{LR}$. В импульсном представлении Ур. (5.21) переписывается в виде

$$\begin{aligned} \hat{f}_{\alpha\beta}^{LR} &= \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\alpha}^L(\mathbf{k})a_{\beta}^R(-\mathbf{k}) \rangle; \\ \hat{f}_{\alpha\beta}^{RL} &= \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\alpha}^R(\mathbf{k})a_{\beta}^L(-\mathbf{k}) \rangle. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Для куперовской петли введем обозначение

$$\Pi_d = T \sum_{\mathbf{k}, \omega} g^{RR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega) g^{LL}(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}, -\omega), \quad (5.23)$$

где функции Грина $g^{RR(LL)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega)$ в металлическом состоянии даются Ур. (5.11) при $\Delta_0 = 0$. Из Гамильтониана (5.19) с определением (5.23) получаем уравнения Горькова для возникновения сверхпроводимости:

$$\begin{aligned} \hat{f}^{LR} &= - \left(U_c^b \hat{f}^{RL} + U_c^f \hat{f}^{LR} \right) \Pi_d, \\ \hat{f}^{RL} &= - \left(U_c^b \hat{f}^{LR} + U_c^f \hat{f}^{RL} \right) \Pi_d. \end{aligned} \quad (5.24)$$

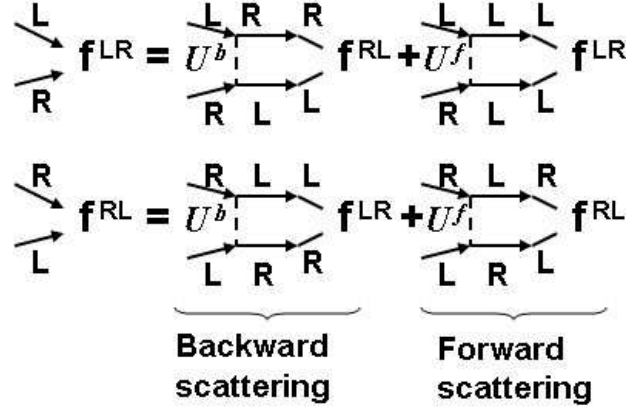


Рисунок 5.3: Диаграммное представление уравнений Горькова для функции \hat{f}^{LR} и \hat{f}^{RL} без ВП. Сплошные линии изображают функций Грина электрона $g^{RR(LL)}(\mathbf{k}, \omega)$ в металлическом состоянии. Пунктирные линии представляют е-е взаимодействие, описываемое двумя константами связи U_c^f и U_c^b .

Ур. (5.24) схематически показано на Рис. 5.3. Сумма и разность двух строчек в Ур. (5.24) дает уравнение на температуру перехода T_{c0}^{SC} в сверхпроводящее состояние из металлического:

$$\begin{aligned} \hat{f}^{LR} + \hat{f}^{RL} &= - (U_c^f + U_c^b) (\hat{f}^{LR} + \hat{f}^{RL}) \Pi_d, \\ \hat{f}^{LR} - \hat{f}^{RL} &= - (U_c^f - U_c^b) (\hat{f}^{LR} - \hat{f}^{RL}) \Pi_d. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Первая строка в Ур. (5.25) соответствует четному по координате спин-синглетному, а вторая нечетному по координате триплетному сверхпроводящему спариванию. Обычно, $-U_c^f - U_c^b > U_c^b - U_c^f$, и температура перехода в синглетную сверхпроводимость выше. Ур. (5.25) переписывается как

$$1 = g \Pi_d, \quad g = \max \{ -U_c^f - U_c^b, U_c^b - U_c^f \}. \quad (5.26)$$

Таким образом, в нашей модели возникает синглетная или триплетная сверхпроводимость в зависимости от соотношения констант U_c^f и U_c^b . Немагнитные примеси также подавляют триплетную сверхпроводимость. Куперовская петля Π_d в Ур. (5.23) имеет известную логарифмическую сингулярность, возникающую после суммирование по импульсам и частоте:

$$\Pi_d^{met} = \Pi_d^{met}(T) \approx \nu_F \ln(\bar{\omega}/T), \quad (5.27)$$

где верхняя обрезка $\bar{\omega}$ обычно порядка дебаевской частоты [332], а $\nu_F = \rho_0(E_F)$ - плотность состояний на уровне Ферми. Для квази-одномерного спектра электронов (4.12), $\nu_F = 1/\pi\hbar v_F b$. Из (5.26),(5.27) получаем уравнение для сверхпроводящей критической температуры T_{c0}^{SC} в рамках теории БКШ:

$$1 \approx g\nu_F \ln(\bar{\omega}/T_{c0}^{SC}). \quad (5.28)$$

5.2.4 Возникновение сверхпроводимости на фоне однородной волны зарядовой плотности и температура такого сверхпроводящего перехода

В этом разделе мы изучим сверхпроводящую неустойчивость в состоянии с волной зарядовой плотности (ВЗП), где спиновая структура параметров порядка ВП и сверхпроводимости не взаимодействуют. Как мы увидим ниже в следующем разделе, результаты, полученные в этом разделе, для спин-синглетной сверхпроводимости на фоне ВЗП можно применять после небольшой модификации для триплетной сверхпроводимости на фоне ВСП. Проблема сверхпроводящей неустойчивости и верхнего критического поля H_{c2} на фоне ВЗП довольно актуальна в связи с большим количеством экспериментальных данных в различных соединениях. Например, в органических сверхпроводниках α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄ фон ВЗП приводит к новым свойствам сверхпроводящего состояния [105]. Имеется много других сверхпроводников на фоне ВЗП и ВСП (см. таблицу 1 в любом из двух обзоров [270]).

Основные уравнения для ВЗП состояния без сверхпроводимости получаются из Ур. (5.7)-(5.15) путем удаления спинового множителя ($\vec{\sigma}\vec{l}$) из недиагональных элементов в формулах (5.5)-(5.7). Таким образом, матричные функции Грина в однородной ВЗП без сверхпроводимости напоминают Ур. (5.7):

$$\hat{G} \equiv \begin{pmatrix} g^{RR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega) & g^{LR}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, \omega) \\ g^{RL}(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}, \omega) & g^{LL}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k} - \mathbf{Q}, \omega) \end{pmatrix}, \quad (5.29)$$

где компоненты матрицы даны в Ур. (5.10)-(5.11). В дополнение к члену в Ур. (5.23), куперовская петля в состоянии с ВП содержит еще один член, возникающий от недиагональных элементов матричной функции Грина (5.29):

$$P_n = T \sum_{\mathbf{k}, \omega} g^{LR}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, \omega) g^{RL}(-\mathbf{k} + \mathbf{Q}, -\mathbf{k}, -\omega). \quad (5.30)$$

Поэтому уравнения Горькова на фоне ВП приобретают два дополнительных члена по сравнению с Ур.(5.24):

$$\begin{aligned}\hat{f}^{LR} &= - \left(U_c^b \hat{f}^{RL} + U_c^f \hat{f}^{LR} \right) \Pi_d - \left(U_c^b \hat{f}^{LR} + U_c^f \hat{f}^{RL} \right) \Pi_n, \\ \hat{f}^{RL} &= - \left(U_c^b \hat{f}^{LR} + U_c^f \hat{f}^{RL} \right) \Pi_d - \left(U_c^b \hat{f}^{RL} + U_c^f \hat{f}^{LR} \right) \Pi_n.\end{aligned}\quad (5.31)$$

При написании этих уравнений мы используем, что спиновая структура функции Горькова \hat{f}^{LR} коммутирует с функциями Грина $g^{R(L)R(L)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega)$ на фоне ВЗП. Ур. (5.31) схематически показано на Рис. 5.4.

Суммирование и вычитание двух линий в Ур. (5.31) дает следующие уравнения на температуру сверхпроводящего перехода для синглетного и триплетного спаривания соответственно:

$$\begin{aligned}\hat{f}^{LR} + \hat{f}^{RL} &= - (U_c^f + U_c^b) \left(\hat{f}^{LR} + \hat{f}^{RL} \right) (\Pi_d + \Pi_n), \\ \hat{f}^{LR} - \hat{f}^{RL} &= - (U_c^f - U_c^b) \left(\hat{f}^{LR} - \hat{f}^{RL} \right) (\Pi_d - \Pi_n).\end{aligned}\quad (5.32)$$

Ниже мы покажем, что Π_d и Π_n имеют одинаковый знак, и $|\Pi_d + \Pi_n| > |\Pi_d - \Pi_n|$. Поэтому, если в металлическом состоянии температура перехода T_{cSC}^{Singlet} в синглетное сверхпроводящее состояние выше, чем T_{cSC}^{Triplet} в триплетное, то на фоне ВЗП $T_{cSC}^{\text{Singlet}} > T_{cSC}^{\text{Triplet}}$ также выполняется. Для ВСП, взаимодействие спиновых структур сверхпроводимости и ВСП может это правило изменить (см. разд. 5.4).

Температура сверхпроводящего перехода в состоянии с однородной ВЗП с бесщелевыми карманами

Уравнение на температуру T_{cCDW}^{SC} перехода в синглетную сверхпроводимость на фоне ВЗП дано в первой строке в Ур. (5.32). Это уравнение можно переписать в виде $K_1 \equiv g(\Pi_d + \Pi_n) = 1$, где для синглетного спаривания $g = - (U_c^f + U_c^b)$. Используя $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(-\mathbf{k})$ и подставляя (5.10),(5.11), получим

$$K_1 = Tg \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{\omega^2 + [\varepsilon_-(\mathbf{k}) + \varepsilon_+(\mathbf{k})]^2 + |\Delta_0|^2}{[\omega^2 + E_1^2(\mathbf{k})][\omega^2 + E_2^2(\mathbf{k})]} \quad (5.33)$$

$$= \frac{Tg}{2} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \left(\frac{1}{\omega^2 + E_1^2(\mathbf{k})} + \frac{1}{\omega^2 + E_2^2(\mathbf{k})} \right) \quad (5.34)$$

$$= \frac{g}{v_F} \int_0^{2\pi/b} \frac{bdk_y}{2\pi} \int_{-\bar{\omega}}^{\bar{\omega}} \frac{d\varepsilon_-}{2\pi} \frac{\text{th} [E_1(\mathbf{k})/2T]}{E_1(\mathbf{k})}. \quad (5.35)$$

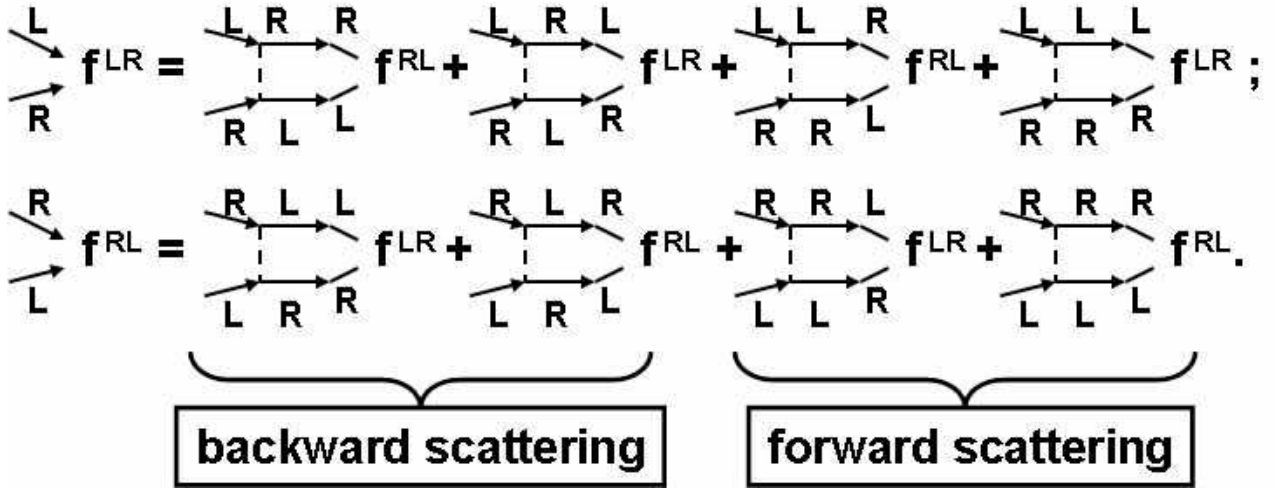


Рисунок 5.4: Диаграммное представление уравнений на функции Горькова \hat{f}^{LR} и \hat{f}^{RL} в присутствии ВЗП с двумя константами e - e взаимодействия. Сплошные линии представляют функции Грина электрона $g_n^{R(L)R(L)}(k\omega)$ в состоянии с ВЗП. Пунктирные линии представляют короткодействующее e - e взаимодействие, включающее рассеяние назад U_c^b или вперед U_c^f .

Во второй строке Ур. (5.34) мы подставили Ур. (5.9) и использовали симметрию функций $\varepsilon_{\pm}(k_y)$: $\varepsilon_{+}(k_y)$ - это четная функция k_y , и $\int dk_y F(\varepsilon_{\pm}(k_y)) = 0$ для любой нечетной функции $F(\varepsilon)$. Теперь перепишем K_1 в виде суммы $K_1 \equiv K_{ult} + K_{inf}$, где

$$\begin{aligned}
 K_{ult} &\equiv \frac{g}{v_F} \int_0^{2\pi/b} \frac{bdk_y}{2\pi} \int_{|\Delta_0|}^{\bar{\omega}} \frac{d\varepsilon_-}{\pi} \frac{\text{th}[E_1(\mathbf{k})/2T]}{E_1(\mathbf{k})} \\
 &\approx [g/\pi v_F] \ln(\bar{\omega}/\Delta_0)
 \end{aligned} \tag{5.36}$$

содержит ультрафиолетовую логарифмическую расходимость в выражении (5.35), а

$$K_{inf} \equiv \frac{g}{v_F} \int_0^{2\pi/b} \frac{bdk_y}{2\pi} \int_0^{|\Delta_0|} \frac{d\varepsilon_-}{\pi} \frac{\text{th}[E_1(\mathbf{k})/2T]}{E_1(\mathbf{k})} \tag{5.37}$$

может содержать инфракрасную логарифмическую расходимость, если имеются электронные состояния на уровне Ферми. При $P > P_{c1}$ бесщелевые электронные состояния появляются в виде небольших карманов Ферми-поверхности (см. разд. 5.2.2 и Рис. 4.11), или как солитонная зона (см. разделы 4.3, 4.4.2, 5.5, а также статьи [274, 275]). В каждом из этих двух случаев образуются маленькие "поверхности Ферми", приводящие к куперовской неустойчивости при достаточно низкой температуре и к возникновению сверхпроводящего спаривания.

Подставляя Ур. (5.13)-(5.15) для $E_1(\mathbf{k})$ в Ур. (5.37) и вводя обозначение $r^2 \equiv a_1 (\Delta k_y)^2 + b_1 \varepsilon_-^2$, получаем

$$\begin{aligned} K_{\text{inf}} &\approx \frac{N_P^e g b / v_F}{4\pi \sqrt{a_1 b_1}} \int_0^{\Delta_0} \frac{\text{th} [(\delta_F - r^2) / 2T]}{\delta_F - r^2} dr^2 \\ &\approx \frac{N_P^e g}{2\pi v_F \sqrt{2t'_b / \Delta_0}} \ln \left[C \sqrt{\Delta_0 \delta_F / T} \right], \end{aligned} \quad (5.38)$$

где число $C \sim 1$, N_P^e - число не покрытых щелью ВП электронных карманов на одном листе ПФ. С законом дисперсии (4.12), при $2t'_b > \Delta_0$ в каждой зоне Бриллюэна возникает два электронных и два дырочных кармана на каждом листе ПФ (см. рис. 4.11), так что $N_P^e = 2$. Таким образом, когда только появляются небольшие бесщелевые карманы ПФ, т.е. при $0 < 2t'_b / \Delta_0 - 1 \ll 1$,

$$K_1 \approx \frac{g}{\pi v_F} \left[\ln (\bar{\omega} / \Delta_0) + \ln \left(C \sqrt{\Delta_0 \delta_F / T} \right) \right]. \quad (5.39)$$

Сравнение Ур. (5.39) и (5.28) показывает, что критическая температура T_{cCDW}^{SC} сверхпроводящего перехода на фоне ВЗП связана с температурой сверхпроводящего перехода T_{c0}^{SC} без ВЗП как

$$T_{cCDW}^{SC} \approx C T_{c0}^{SC} \sqrt{\delta_F / \Delta_0}. \quad (5.40)$$

Этот результат отличается от Ур. 3.5 и 3.7 в статье [306], где T_{cCDW}^{SC} была экспоненциально меньше, чем T_{c0}^{SC} . Происхождение этого различия было объяснено в конце раздела 5.2.2, где была вычислена плотность состояний на уровне Ферми в состоянии с ВП и маленькими открытыми (бесщелевыми) карманами на ПФ (см. Рис. 5.2) и показано, что она приблизительно равна плотности состояний в металлическом состоянии. Используемое в статьях [305, 306] предположение о том, что закон дисперсии электронов в не покрытых щелью ВП участках ПФ не изменяется после образования ВП, не верно, особенно когда эти карманы малы по сравнению с исходной ПФ. Для квази-одномерного закона дисперсии в Ур. (4.11) и (4.12), согласно Ур. (5.40), температура сверхпроводящего перехода на фоне ВП T_{cCDW}^{SC} даже без учета перенормировки е-е взаимодействия лишь немного меньше, чем T_{c0}^{SC} без ВП. С учетом перенормировки е-е взаимодействия, в принципе, может оказаться $T_{cCDW}^{SC} > T_{c0}^{SC}$, что и наблюдается в органических металлах α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄ и (TMTSF)₂PF₆.

Ур. (5.36)-(5.40) были получены с логарифмической точностью, т.е. предполагая, что $\ln (\delta_F / T) \gg 1$ и $\ln (\Delta_0 / \delta_F) \gg 1$. Этой точности не достаточно, чтобы определить константу C . Для более точной оценки температуры перехода - T_{cCDW}^{SC} , мы вычислили интеграл (5.35) численно для конкретного закона дисперсии (4.12). Этот расчет подтверждает

приближенную формулу (5.40) при $\delta_F \ll \Delta_0$, и дает значение константы $C \approx 1.86$ (см. Рис. 5.5). При $\delta_F/t'_b \ll 1$ аналитические и численные результаты совпадают, в то время как при $\delta_F \sim t'_b$ отношение $T_{cCDW}^{SC}(\delta_F)/T_{c0}^{SC}$ имеет тенденцию к насыщению, будучи всегда меньше единицы. В согласии с Ур. (5.40), соотношение $T_{cCDW}^{SC}/T_{c0}^{SC}$ практически не зависит от T_{c0}^{SC} . Ур. (5.40) и численный результат на Рис. 5.5 применим только при $0 < \delta_F < \delta_{F\max}$. При $\delta_F \geq \delta_{F\max}$ ВП полностью подавлена, а система находится в металлическом или чисто сверхпроводящем состоянии. Значение $\delta_{F\max}$ зависит от дисперсии электронов [274], от вида е-е взаимодействия, и от многих других факторов. В частности, критические флуктуации при $P \approx P_{c1}$ и $P \approx P_c$ могут существенно повлиять на фазовую диаграмму. Обратное влияние сверхпроводимости на ВП, пренебрегаемое в настоящем анализе, также может повлиять на значение $\delta_{F\max}$ при $T_{c0}^{SC} \sim T_{DW}$. Поэтому, мы не вычисляем значение $\delta_{F\max}$, но берем его из эксперимента. В $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ на основе фазовой диаграммы на Рис. 7 статьи [232] можно оценить $\delta_{F\max}/t'_b \sim 0.2$. В $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$ интервал $0 < \delta_F < \delta_{F\max}$ гораздо больше, и $P_{c1} \approx P_c/2$ (см. Рис. 9 статьи [105]). На Рис. 5.5 пунктирной линией изображено примерное экспериментальное значение $\delta_{F\max}$ для $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$.

Приведенные выше аналитические и численные оценки показывают, что ВЗП состояние с малыми бесщелевыми карманами на поверхности Ферми всегда неустойчиво к формированию сверхпроводимости, и что температура сверхпроводящего перехода T_{cCDW}^{SC} на фоне ВЗП не очень низкая, порядка температуры сверхпроводящего перехода T_{c0}^{SC} без ВЗП. Формирование малых бесщелевых карманов на поверхности Ферми при увеличении "антинестингового" члена t'_b при $P > P_{c1}$, как правило, сопровождается уменьшением энергетической щели Δ_0 ВЗП и, следовательно, быстрым ростом размеров $\delta_F(P)$ бесщелевых карманов. Поэтому, из Ур. (5.40) получаем, что критическая температура T_{cCDW}^{SC} также растет очень быстро при $P > P_{c1}$.

Критические флуктуации и связанная с ними перенормировка эффективного е-е взаимодействия [316, 317, 318], сопровождающие переход от ВП в металлическое состояние во всем интервале давлений $P_{c1} \lesssim P \lesssim P_{c1}$, может значительно увеличить температуру сверхпроводящего перехода T_{cCDW}^{SC} на фоне ВП и влиять на зависимость $T_{cCDW}^{SC}(P)$. ВП также влияет на экранирование кулоновского е-е взаимодействия, которое изменяет эффективные константы связи и температуру сверхпроводящего перехода. Даже небольшое изменение в е-е взаимодействии приводит к резким изменениям в температуре сверхпроводящего перехода [332]. Точный расчет $T_{cCDW}^{SC}(P)$ на фоне ВП должен аккуратно учитывать все эти эффекты, что выходит за рамки настоящей

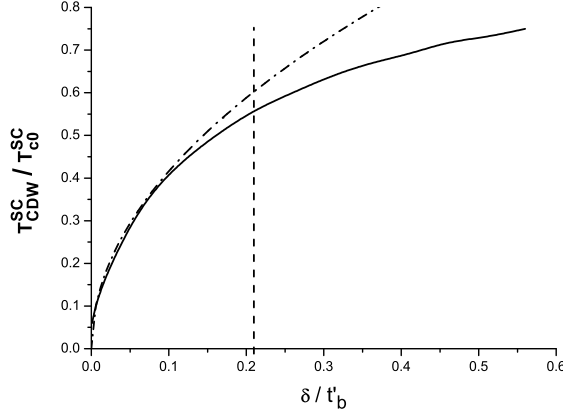


Рисунок 5.5: Температура сверхпроводящего перехода T_{cDW}^{SC} на фоне ВЗП при неидеальном нестинге с малыми бесщелевыми карманами на поверхности Ферми. Сплошная линия показывает отношение T_{cDW}^{SC}/T_{c0}^{SC} как функцию размера δ_F бесщелевых карманов на ПФ, полученное численным расчетом из Ур. (5.35). Штрих-пунктирная линия представляет собой аналитическую формулу (5.40) с численно рассчитанной константой $C \approx 1.86$. Приблизительное экспериментальное значение $\delta_{F\max}$ в $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ обозначается вертикальной пунктирной линией.

работы. Однако, даже в рамках упрощенной модели, не учитывающей перенормировку e - e взаимодействия, мы получили неожиданный результат, что формирование энергетической щели ВП с небольшими бесщелевыми карманами на ПФ почти не уменьшает температуру сверхпроводящего перехода, то есть уменьшает ее не экспоненциально (как ожидалось из-за образования щели ВП, частично покрывающей ПФ), а только на коэффициент $\sim \sqrt{\delta_F/\Delta_0} \lesssim 1$. Это очень важно для возможности возникновения сверхпроводимости на фоне волны плотности.

Таким образом, выше мы показали возможность возникновения сверхпроводимости на фоне волны плотности при разумных (не очень низких) температурах, сравнимых с температурой перехода без ВП. В следующем разделе мы исследуем некоторые необычные свойства такого сверхпроводящего состояния.

5.3 Верхнее критическое магнитное поле H_{c2} в сверхпроводящем состоянии на фоне однородной волны зарядовой плотности

Верхнее критическое поле в сверхпроводниках на фоне волны плотности ранее было рассмотрено теоретически только в модели [333], где щель ВП появляется только на тех участках ПФ, где условие нестинга выполнено, в то время как на остальной части ПФ электронный спектр не изменяется. Как было показано выше, это приближение обычно не работает, и закон дисперсии электронов сильно меняется из-за ВП даже на участках ПФ, где условие нестинга не выполнено и нет щели ВП. В нашей модели с исходным квазиодномерным законом дисперсии в Ур. (4.12) и малыми бесщелевыми карманами ПФ, новый закон дисперсии, описываемый Ур. (4.10), имеет сингулярность, когда размер карманов $\delta_F \rightarrow 0$, то есть когда давление $P \rightarrow P_{c1}$. Эта сингулярность сильно влияет на сверхпроводящие свойства и на верхнее критическое поле H_{c2} . Другие более ранние расчеты H_{c2} в статьях [334, 335] в сверхпроводниках с ВП также использовали модели, сильно отличающиеся от рассмотренной выше, и не учитывали указанную сингулярность.

Для расчета верхнего критического поля H_{c2} мы используем разложение Гинзбурга-Ландау (G-L) по параметру порядка сверхпроводимости. Основной вклад в градиентный член функционала Гинзбурга-Ландау происходит от бесщелевых карманов поверхности Ферми ($|\varepsilon_+(\mathbf{k})| > \Delta_0$). Для произвольного закона дисперсии электронов, функционал G-L был получен в статье [337]. Параметр порядка сверхпроводимости в общем случае является функцией двух волновых векторов:

$$\Delta(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \Delta_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) = \Delta(\mathbf{q})\psi(\mathbf{k}),$$

где вектор $\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ дает пространственную модуляцию параметра порядка сверхпроводимости $\Delta(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{q} \Delta(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$, и $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1$ - импульс электрона в куперовской паре. В случае s-спаривания, $\psi(\mathbf{k}) = const = 1$. Для триплетного спаривания $\Delta_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) = -\Delta_{\mathbf{q}}(-\mathbf{k})$, и для квази-одномерного закона дисперсии (4.12) с двумя отдельными листами ПФ мы можем взять $\psi(\mathbf{k}) = sign(k_x)$. Для вычисления градиентного члена в разложении Гинзбурга-Ландау, мы используем Ур. (11) статьи [337], что дает уравнение Гинзбурга-

Ландау для параметра порядка в виде

$$\sum_{j,k} \frac{1}{2m_{jk}} [\nabla_j + 2ieA_j(\mathbf{r})] [\nabla_k + 2ieA_k(\mathbf{r})] \Delta(\mathbf{r}) + T \left\{ \frac{T_c^{SC} - T}{T_c^{SC}} - f |\Delta(\mathbf{r})|^2 \Delta(\mathbf{r}) \right\} = 0, \quad (5.41)$$

где $A_j(\mathbf{r})$ – векторный потенциал электромагнитного поля,

$$\frac{1}{m_{jk}} = \frac{7\xi(3)}{12\pi^2 T} \int \mathbf{v}_j \mathbf{v}_k \psi^2(\mathbf{k}) \frac{d\sigma_F}{|\mathbf{v}|} / \int \frac{d\sigma_F}{|\mathbf{v}|} \quad (5.42)$$

$$\equiv \frac{7\xi(3)}{12\pi^2 T} \frac{\int \mathbf{v}_j \mathbf{v}_k \psi^2(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} \delta(E(\mathbf{k}) - E_F)}{\int \psi^2(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} \delta(E(\mathbf{k}) - E_F)},$$

$$f = \frac{7\xi(3)}{8(\pi T)^2} \int \psi^4(\mathbf{k}) \frac{d\sigma_F}{|v_F^*|}, \quad (5.43)$$

и $\int d\sigma_F$ означает интеграл по поверхности Ферми в импульсном пространстве. Поскольку уравнение Гинзбурга-Ландау (5.41) было выведено при $T_c^{SC} - T \ll T_c^{SC}$, можно заменить T на T_c^{SC} в Ур. (5.42) и (5.43). Вводя обозначения

$$k_x^* = k_x - k_F; \quad k_y^* \equiv \Delta k_y \left(2b\sqrt{2t'_b \Delta_0} / \hbar v_F \right),$$

можно переписать закон дисперсии в Ур. (5.13) для дырочных карманов ПФ в виде

$$E(\mathbf{k}^*) = \frac{(\hbar v_F)^2}{2\Delta_0} [k_y^{*2} + k_x^{*2}] - \delta_F. \quad (5.44)$$

Поверхность Ферми, $E(\mathbf{k}^*) = 0$, параметризуется углом ϕ , где $\tan \phi \equiv k_y^*/k_x^*$. Скорость квази-частиц на ПФ является функцией этого угла:

$$v_x = v_F \sqrt{2\delta_F / \Delta_0} \cos \phi;$$

$$v_y = (4b/\hbar) \sqrt{\delta_F t'_b} \sin \phi.$$

Выполнение интегрирование в (5.42), получим вклад от каждого бесщелевого кармана в тензор массы (5.42):

$$\left(\frac{1}{m_{xx}} \right)_h = \frac{7\xi(3) v_F^2}{12\pi^2 T_c^{SC}} \left(\frac{\delta_F}{\Delta_0} \right); \quad (5.45)$$

$$\left(\frac{1}{m_{yy}} \right)_h = \frac{14\xi(3) b^2 t'_b \delta_F}{3\pi^2 \hbar^2 T_c^{SC}}; \quad \left(\frac{1}{m_{xy}} \right)_h = 0.$$

Этот тензор массы сильно анизотропен:

$$\left(\frac{m_{yy}}{m_{xx}} \right)_h = \frac{\hbar^2 v_F^2}{8t'_b \Delta_0 b^2} \sim \left(\frac{\hbar v_F}{2bt'_b} \right)^2 \gg 1.$$

Тензор масс для электронных карманов может быть получен вращением тензора (5.45) на углы (5.12):

$$\begin{aligned}\left(\frac{1}{m_{xx}}\right)_e &= \left(\frac{1}{m_{xx}}\right)_h \cos^2 \phi_e + \left(\frac{1}{m_{yy}}\right)_h \sin^2 \phi_e \\ \left(\frac{1}{m_{yy}}\right)_e &= \left(\frac{1}{m_{xx}}\right)_h \sin^2 \phi_e + \left(\frac{1}{m_{yy}}\right)_h \cos^2 \phi_e.\end{aligned}$$

Недиагональные элементы $(1/m_{xy})_e$ исчезают после суммирования по двум электронным карманам, которые повернуты в противоположных направлениях. Полный тензор масс в функционале Гинзбурга-Ландау дается суммой по всем карманам ПФ:

$$\frac{1}{m_{ij}} = 4 \left[\left(\frac{1}{m_{ij}}\right)_e + \left(\frac{1}{m_{ij}}\right)_h \right],$$

и подставляя $|\phi_e| = \arctan(2t_b b / \hbar v_F) \ll 1$, мы получаем

$$\begin{aligned}\frac{1}{m_{xx}} &\approx \frac{14\xi(3)v_F^2}{3\pi^2 T_c^{SC}} \left(\frac{\delta_F}{\Delta_0}\right); \\ \frac{1}{m_{yy}} &\approx \frac{7\xi(3)v_F^2}{3\pi^2 T_c^{SC}} \left(\frac{\delta_F}{\Delta_0}\right) \left(\frac{2t_b b}{\hbar v_F}\right)^2.\end{aligned}\tag{5.46}$$

Из уравнений Гинзбурга-Ландау получаем i -компоненту верхнего критического поля

$$H_{c2}^i = e_{ijk} \frac{(T_c^{SC} - T)c}{e\hbar} \sqrt{m_j m_k},\tag{5.47}$$

где e_{ijk} – абсолютно антисимметричный тензор третьего ранга. Для $H \parallel z$, подстановка (5.46) в (5.47) дает

$$H_{c2}^z = C_1 \cdot \left(\frac{T_c^{SC}}{\delta_F}\right) \frac{c(T_c^{SC} - T)}{b v_F e},\tag{5.48}$$

где

$$C_1 = \frac{3\pi^2}{7\xi(3)\sqrt{2}} \left(\frac{\Delta_0}{2t_b}\right).\tag{5.49}$$

Величина константы C_1 в Ур. (5.49) очень чувствительна к закону дисперсии электронов (4.12), например, к присутствию четвертой гармоники $2t_4 \cos(4k_y b)$ в Ур. (4.12). Четвертая гармоника с $t_4/t_2 > 0$ увеличивает размер δ_F бесщелевых дырочных карманов ПФ при $k_y b \approx \pi n$ на $2t_4$, уменьшая на столько же размер электронных карманов при $k_y b \approx \pi(n + 1/2)$. Если $2t_4 > \delta_F$, электронные карманы исчезают, и только дырочные карманы дают вклад в массовый тензор (5.42). В этом случае, полный массовый тензор очень анизотропный и дается Ур. (5.45), умноженным на число дырочных карманов. Его подстановка в Ур. (5.47) дает существенно большую константу C_1 :

$$C_1 = \frac{3\pi^2}{14\xi(3)} \sqrt{\frac{\Delta_0}{2t'_b}} \approx 1.76,\tag{5.50}$$

которая больше чем в Ур. (5.49) в $t_b/\sqrt{\Delta_0 t'_b} \approx t_b/t'_b\sqrt{2}$ раз. Аналогичное увеличение константы C_1 также появляется, если волновой вектор ВП \mathbf{Q} смещается от $\mathbf{Q}_0 = (2k_F, \pi/b)$, так что электронные карманы исчезают, в то время как размер δ_F дырочных карманов увеличивается. Точный расчет константы C_1 требует детального знания закона дисперсии электронов.

Согласно Ур. (5.48), H_{c2}^z расходится при $P - P_{c1} \rightarrow 0$, так как $\delta_F \propto P - P_{c1}$ [331]. Предполагая $T_c^{SC} \approx const$, как это наблюдается в органических сверхпроводниках $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ и $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$, получаем

$$H_{c2}^z \propto 1/(P - P_{c1}). \quad (5.51)$$

В нашей упрощенной модели (5.40), температура сверхпроводящего перехода $T_c^{SC} \propto \sqrt{\delta_F} \propto \sqrt{P - P_{c1}}$, и из Ур. (5.48) мы получаем лишь корневую расходимость производной $dH_{c2}^z(T)/dT$ в окрестности температуры перехода $T = T_c^{SC}$:

$$dH_{c2}^z(T)/dT \approx H_{c0}/\sqrt{P/P_{c1} - 1}. \quad (5.52)$$

Эта производная определяет наклон линии сверхпроводящего перехода на фазовой диаграмме в координатах $T - H$ вблизи $H = 0$. Однако, расчет температуры сверхпроводящего перехода, особенно вблизи квантовой критической точки $P = P_{c1}$, всегда основывается на многих приближениях, будучи заведомо сложной проблемой. Поскольку при выводе Ур. (5.40) мы пренебрегли перенормировкой e-e взаимодействия из-за критических флуктуаций, зависимость $T_c^{SC}(P)$ в Ур. (5.48) должна быть взята из эксперимента для лучшей точности. Физическая причина повышения (5.51) верхнего критического поля H_{c2} в районе P_{c1} состоит в увеличении эффективной массы в уравнениях Гинзбурга-Ландау [см. Ур. (5.45) и (5.46)], что происходит из-за сильного изменения закона дисперсии квазичастиц (в частности, от снижения их среднеквадратичных скоростей) на уровне Ферми в карманах ПФ, не покрытых щелью ВП.

Расходимость H_{c2}^z , когда давление приближается к P_{c1} , наблюдается в смешанном состоянии в $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ (см. Рис. 2 в статье [271]), а также в $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$ (см. Рис. 5 и 6 в статье [105]). Эти графики приведены также на Рис. 5.6. Объяснить эту зависимость $H_{c2}^z(P - P_{c1})$ в случае макроскопического пространственного разделение фаз, принятого в статье [271], можно только если ширина d_s сверхпроводящих доменов будет намного меньше, чем длина когерентности сверхпроводимости ξ_{SC} . Действительно, в тонких сверхпроводниках II-го типа толщиной $d_s \ll \xi_{SC}$ верхнее критическое поле H_{c2}

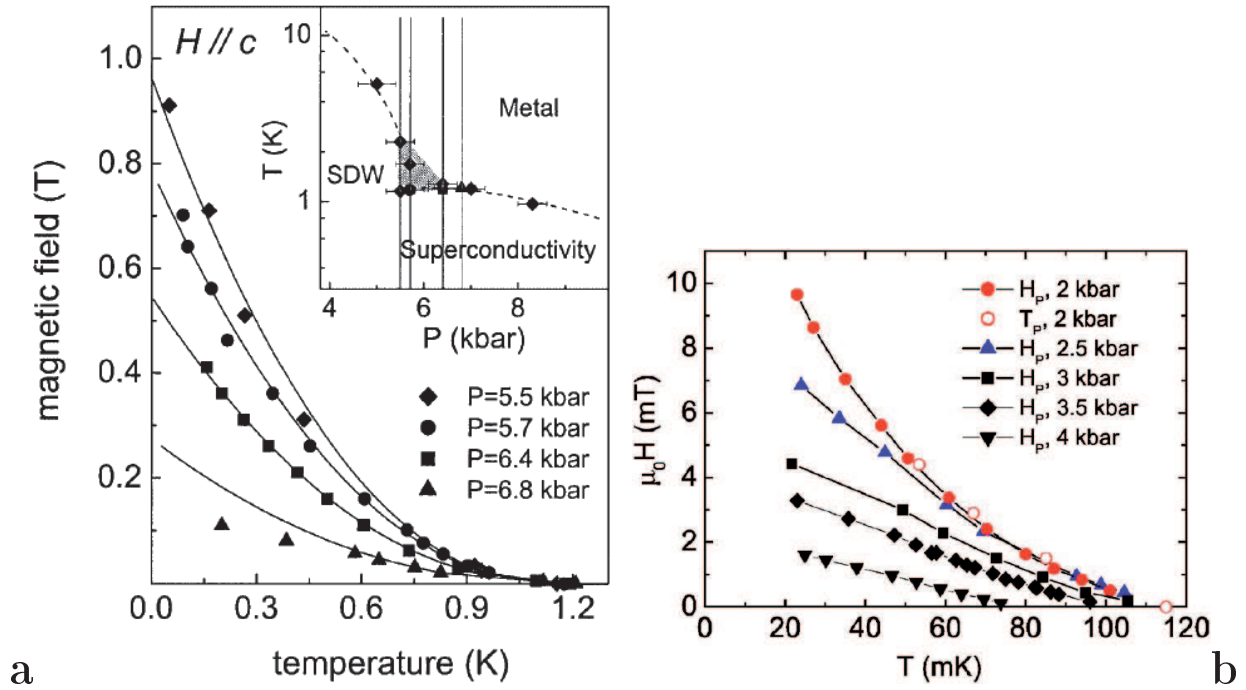


Рисунок 5.6: Экспериментальные зависимости верхнего критического поля H_{c2}^z , перпендикулярного проводящим слоям, от температуры в органических металлах $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ (Рис. а) и $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$ (Рис. б) вблизи квантового фазового перехода волны плотности при $P \rightarrow P_{c1}$. Эти экспериментальные данные взяты из Рис. 2 статьи [271] и из Рис. 5 статьи [105] соответственно.

выше чем в объемных сверхпроводниках на множитель (см. Ур. 12.4 в монографии по сверхпроводимости [338])

$$H_{c2}/H_{c2}^0 \approx \sqrt{12}\xi_{SC}/d_s. \quad (5.53)$$

В обсуждении в статье [271], в выражение для H_{c2} в тонких сверхпроводящих пластинах входит длина проникновения λ вместо длины когерентности ξ_{SC} , что является правильным только для сверхпроводников I типа. Если $d_s \ll \xi_{SC}$, то размер домена d_s порядка длины когерентности ВП, что стоит большой дополнительной энергии из-за изменения структуры ВП. Возможно, при такой малой толщине доменов, солитонный сценарий структуры ВП (см. раздел 4.3) окажется более выгодным энергетически. Свойства сверхпроводимости на фоне ВП в солитонной фазе будут рассмотрены ниже в разделе 5.5.

Проведем количественные сравнения с экспериментом, чтобы проверить, является ли предложенная нами теоретическая модель разумной для описания реальных соединений. В $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ скорость электронов на поверхности Ферми $v_F \approx 2 \cdot 10^7$ см/сек, постоянная

решетки в направлении y (расстояние между одномерными цепочками молекул) $b \approx 7.7 \text{ \AA}$ и $\Delta_0/2t_b \approx t'_b/t_b \approx 0.1$. Подстановка этих значений и $\delta_F \approx T_c^{SC}$ в Ур. (5.48) дает наклон $dH_{c2}^z/dT \approx 0.14 \text{ Tesla}/^\circ K$, что находится в разумном согласии с экспериментальными данными при $P \rightarrow P_{c1}$ (см. Рис. 2 в статье [271] или Рис. 5.6a).

В α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄ скорость электронов на поверхности Ферми[339] $v_F \approx 6.5 \cdot 10^6$, постоянная решетки[340] $b \approx 10 \text{ \AA}$, температура сверхпроводящего перехода [105] $T_c^{SC} \approx 0.1 K$ и $T_c^{CDW} \approx 8 K$. Хотя исходная поверхность Ферми в этом соединении обладает квази-двумерными карманами в дополнение к квази-одномерным листам, подвергающиеся ВЗП неустойчивости квази-одномерные листы ПФ играют важную роль в формировании сверхпроводимости, потому что сверхпроводимость в присутствии ВЗП (при $P < P_c$) возникает с примерно одинаковой температурой перехода T_c^{SC} , как в присутствии ВП при $P < P_c$, так и в ее отсутствие при $P > P_c$. Следовательно, сверхпроводимость и ВП делят одну и ту же квази-одномерную зону проводимости. В этом соединении $P_c \approx 2.5$ кбар [105], в то время как P_{c1} и $\delta_F(P)$ не известны. Вероятно, даже при атмосферном давлении $P > P_{c1}$ и $\delta_F \lesssim \Delta_0$. Подстановка $\delta_F \approx \Delta_0/2$ в Ур. (5.48) дает оценку $H_{c2}^z \approx (1 - T/T_c^{SC}) \cdot 3.2 mT$ в согласии с экспериментом (см. рис. 5 в статье [105] или Рис. 5.6b).

Верхнее критическое поле H_{c2} вдоль проводящей x - y плоскости в слоистых квази-одномерных сверхпроводниках оценивалась в статье [341]. Аналогичный расчет может быть применен в нашем случае, при условии, что точно известен закон дисперсии электронов в y и z направлениях.

5.4 Сверхпроводимость на фоне однородной волны спиновой плотности (ВСП)

Функции Грина в состоянии с ВСП даются Ур. (5.7)-(5.11), и уравнения Горькова для сверхпроводимости на фоне ВСП, схематически показанные на Рис. 5.4, записываются в виде

$$\begin{aligned} \hat{f}^{LR} = & -TU_c^b \sum_{\mathbf{k}, \omega} \left[g^{RR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega) \hat{f}^{RL} g^{LL}(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}, -\omega)^T + g^{LR}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, \omega) (\vec{\sigma} \vec{l}) \hat{f}^{LR} (\vec{\sigma} \vec{l})^T g^{RL}(\mathbf{Q} - \mathbf{k}, -\mathbf{k}, -\omega) \right. \\ & \left. - TU_c^f \sum_{\mathbf{k}, \omega} \left[g^{LL}(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}, -\omega) \hat{f}^{LR} g^{RR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega)^T + g^{RL}(-\mathbf{k} + \mathbf{Q}, -\mathbf{k}, -\omega) (\vec{\sigma} \vec{l}) \hat{f}^{RL} (\vec{\sigma} \vec{l})^T g^{LR}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, \omega) \right] \right] \end{aligned} \quad (5.54)$$

и

$$\begin{aligned} \hat{f}^{RL} = & -TU_c^b \sum_{\mathbf{k}, \omega} \left[g^{LL}(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}, -\omega) \hat{f}^{LR} g^{RR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega)^T + g^{RL}(\mathbf{Q} - \mathbf{k}, -\mathbf{k}, -\omega) (\vec{\sigma}\vec{l}) \hat{f}^{RL} (\vec{\sigma}\vec{l})^T g^{LR}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, \omega) \right. \\ & \left. - TU_c^f \sum_{\mathbf{k}, \omega} \left[g^{RR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega) \hat{f}^{RL} g^{LL}(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}, -\omega)^T + g^{LR}(\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \mathbf{k}, \omega) (\vec{\sigma}\vec{l}) \hat{f}^{LR} (\vec{\sigma}\vec{l})^T g^{RL}(\mathbf{Q} - \mathbf{k}, -\mathbf{k}, -\omega) \right] \right]. \end{aligned} \quad (5.55)$$

Спиновая структура функций Горькова \hat{f}^{LR} , которые зависят от типа сверхпроводящего спаривания, взаимодействует со спиновой структурой $(\vec{\sigma}\vec{l})$ параметра порядка ВСП. Этот факт значительно влияет на возникновение сверхпроводимости на фоне ВСП по сравнению с тем, что было получено на фоне ВЗП в разделе 5.2.4.

Используя обозначения из Ур. (5.23) и (5.30), перепишем Ур. (5.54) и (5.55) в виде

$$\hat{f}^{LR} + \hat{f}^{RL} = -T (U_c^b + U_c^f) \left[\Pi_d (\hat{f}^{RL} + \hat{f}^{LR}) + \Pi_n (\vec{\sigma}\vec{l}) (\hat{f}^{LR} + \hat{f}^{RL}) (\vec{\sigma}\vec{l})^T \right] \quad (5.56)$$

$$\hat{f}^{LR} - \hat{f}^{RL} = -T (U_c^b - U_c^f) \left[\Pi_d (\hat{f}^{RL} - \hat{f}^{LR}) + \Pi_n (\vec{\sigma}\vec{l}) (\hat{f}^{LR} - \hat{f}^{RL}) (\vec{\sigma}\vec{l})^T \right]. \quad (5.57)$$

5.4.1 Синглетное сверхпроводящее спаривание на фоне ВСП

Для спин-синглетного сверхпроводящего спаривания $\hat{f}^{LR} = \hat{f}^{RL} = \hat{\sigma}_y f^{LR}$. Поскольку

$$\hat{\sigma}_y (\vec{\sigma}\vec{l})^T = -(\vec{\sigma}\vec{l}) \hat{\sigma}_y, \quad (5.58)$$

Ур. (5.56) принимает вид

$$f^{LR} + f^{RL} = - (U_c^b + U_c^f) (f^{LR} + f^{RL}) (\Pi_d - \Pi_n). \quad (5.59)$$

Подставляя Ур. (5.23) и (5.30) в (5.56) и используя $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(-\mathbf{k})$, перепишем Ур. (5.59) в виде $K_{SDW}^s = 1$, где

$$K_{SDW}^s = Tg \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \frac{\omega^2 + [\varepsilon_-(\mathbf{k}) + \varepsilon_+(\mathbf{k})]^2 - |\Delta_0|^2}{[\omega^2 + E_1^2(\mathbf{k})] [\omega^2 + E_2^2(\mathbf{k})]} = 1. \quad (5.60)$$

Эта формула отличается от аналогичного уравнения (5.33) для ВЗП знаком перед $|\Delta_0|^2$ в числителе. Это изменение знака возникает из-за зацепления спиновой структуры параметров порядка сверхпроводимости и ВСП, математически выраженного в антикоммутировании матриц Паули, приводящего к Ур. (5.58). Оно имеет решающее значение для температуры сверхпроводящего перехода. Как и в случае с ВЗП, непокрытые щелью карманы ПФ появляются, когда $|\varepsilon_+(\mathbf{k})|_{\max} > |\Delta_0|$, и эти карманы ответственны за

инфракрасную логарифмическую расходимость K_1 при $T \rightarrow 0$. Если система находится вблизи фазового перехода при $P = P_{c1}$, где бесщелевые карманы только появляются, "антинестинговый" член t'_b в законе дисперсии электронов (4.12) незначительно превышает щель ВСП, и $|\varepsilon_+(\mathbf{k})|_{\max} - |\Delta_0| = \delta_F \ll |\Delta_0|$. Тогда в этих карманах $|\varepsilon_-(\mathbf{k})| \sim \delta_F \ll |\Delta_0|$, и числитель в Ур. (5.60) вблизи $\omega \rightarrow 0$ имеет малость $\delta_F/|\Delta_0| \ll 1$ по сравнению со случаем ВЗП. Это приводит к той же малости логарифмически расходящегося члена в K_{SDW}^s при $T \rightarrow 0$. Вместо Ур. (5.35) тогда получаем

$$K_{SDW}^s \approx \frac{g}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\text{th} [E_1(\mathbf{k})/2T]}{E_1(\mathbf{k})} \left(1 - \frac{4|\Delta_0|^2}{E_2^2(\mathbf{k})} \right). \quad (5.61)$$

Когда не покрытые щелью карманы маленькие, дополнительный множитель $[1 - 4|\Delta_0|^2/E_2^2(\mathbf{k})] \sim \delta_F/\Delta_0 \ll 1$ делает расходящееся (при низкой энергии) слагаемое в выражении (5.61) для ВСП гораздо меньше, чем в Ур. (5.35) для ВЗП. Таким образом, температура перехода в спин-синглетную сверхпроводимость на фоне ВСП экспоненциально меньше по сравнению тем, что мы получили на фоне ВЗП в Ур. (5.40):

$$T_{cSDW}^{SC} \sim \sqrt{\Delta_0 \delta_F} (T_{c0}^{SC}/\Delta_0)^{(\Delta_0/\delta_F)}. \quad (5.62)$$

Оценки (5.40) и (5.62) сильно зависят от закона дисперсии электронов и от вектора ВП.

5.4.2 Триpletное сверхпроводящее спаривание на фоне ВСП

Малость $\sim \delta_F/\Delta_0$ числителя в Ур. (5.60), возникающая для спин-синглетного сверхпроводящего спаривания на фоне ВСП, вовсе не обязательно появляется для спин-триpletного спаривания. Триpletный параметр порядка имеет спиновую структуру $\hat{f}^{LR} = \hat{\sigma}_y (\hat{\sigma} \tilde{\mathbf{d}}) f^{LR}$. Подставляя это вместе с $f^{RL} = -f^{LR}$ в Ур. (5.57), с помощью $(\vec{\sigma} \vec{l}) (\hat{\sigma} \tilde{\mathbf{d}}) = -(\hat{\sigma} \tilde{\mathbf{d}}) (\vec{\sigma} \vec{l}) + 2(\tilde{\mathbf{d}} \vec{l})$ и

$$(\vec{\sigma} \vec{l}) (\hat{\sigma} \tilde{\mathbf{d}}) \hat{\sigma}_y (\vec{\sigma} \vec{l})^T = (\hat{\sigma} \tilde{\mathbf{d}}) \hat{\sigma}_y - 2(\tilde{\mathbf{d}} \vec{l}) (\vec{\sigma} \vec{l}) \hat{\sigma}_y, \quad (5.63)$$

мы получаем следующие уравнения самосогласования (уравнения Горькова):

$$\begin{aligned} (f^{LR} - f^{RL}) (\hat{\sigma} \tilde{\mathbf{d}}) &= (U_c^b - U_c^f) (f^{LR} - f^{RL}) \\ &\times \left((\hat{\sigma} \tilde{\mathbf{d}}) \Pi_d - \left[(\hat{\sigma} \tilde{\mathbf{d}}) - 2(\tilde{\mathbf{d}} \vec{l}) (\vec{\sigma} \vec{l}) \right] \Pi_n \right). \end{aligned} \quad (5.64)$$

Для $\tilde{\mathbf{d}} \parallel \vec{l}$ уравнение на температуру сверхпроводящего перехода такое же, как и в случае синглетного спаривания на фоне ВЗП [см. первую строчку в Ур. (5.32)] с

единственной заменой константы взаимодействия с $U_c^b + U_c^f$ на $U_c^b - U_c^f$. Следовательно, при $U_c^f \ll U_c^b$, температура сверхпроводящего перехода T_c^{SC} для $\tilde{\mathbf{d}} \parallel \vec{l}$ приближенно дается Ур. (5.40). Для $\tilde{\mathbf{d}} \perp \vec{l}$ получаем малость $\sim \delta_F/\Delta_0$ расходящегося (при низкой энергии) слагаемого в куперовской петле, как и в случае спин-синглетной сверхпроводимости на фоне ВСП. Тогда температура сверхпроводящего перехода T_c^{SC} приближенно дается Ур. (5.62), будучи экспоненциально меньше, чем в случае $\tilde{\mathbf{d}} \parallel \vec{l}$. Для других взаимных ориентаций векторов $\tilde{\mathbf{d}}$ и \vec{l} , спиновые структуры левой и правой частей уравнения (5.64) не совпадают, что означает возможное смешивание синглетной и триплетной сверхпроводимости, аналогично модели в статье [314].

Приведенные выше оценки температуры сверхпроводящего перехода на фоне волны спиновой плотности находятся в согласии с экспериментальными наблюдениями в $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$, где сдвиг Найта и ЯМР указывают на спин-триплетную сверхпроводимость на фоне ВСП [276].

5.4.3 Верхнее критическое поле

Как мы показали выше в рамках нашей модели, температура перехода в спин-синглетную сверхпроводимость на фоне ВСП исчезающе мала. Следовательно, мы рассмотрим только триплетную сверхпроводимость при $\tilde{\mathbf{d}} \parallel \vec{l}$, что соответствует наивысшей критической температуре. Для триплетной сверхпроводимости спиновое (зеemanовское) влияние магнитного поля не обязательно ведет к разрушению куперовских пар и к подавлению сверхпроводимости, то есть отсутствует парамагнитный предел Клогстона [308]. Поэтому, верхнее критическое поле H_{c2} полностью определяется орбитальным движением электронов. В рассмотренном выше сценарии с бесцелевыми карманами, верхнее критическое поле H_{c2} на фоне ВСП при $\tilde{\mathbf{d}} \parallel \vec{l}$ примерно такое же, как и для сверхпроводимости на фоне ВЗП и было получено ранее в Ур. (5.48).

5.5 Сверхпроводимость на фоне солитонной фазы волн плотности

Как уже описывалось ранее, в состоянии с волной плотности (ВП) при неидеальном нестинге поверхности Ферми (ПФ), щель в электронном спектре покрывает не всю ПФ, так что металлическая проводимость сохраняется даже ниже температуры пайерлсовского перехода. При этом ВП и металлическое (или сверхпроводящее) состояния могут

существовать. В дополнение к макроскопическому пространственному разделению этих совершенно различных состояний [266], такое состояние с *частичной* ВП может иметь две различные микроскопические структуры: (1) пространственно однородную структуру с измененной поверхностью Ферми (см. разделы 4.4.1 и 5.2.2, или, например, статьи [267, 268]) и (2) пространственно неоднородную солитонную структуру (см. раздел 4.3, или, например, статьи [38, 37, 269]). Довольно часто на фоне таких волн плотности возникает сверхпроводимость [270, 232, 272] и обладает многими необычными свойствами, в том числе сильным увеличением верхнего критического магнитного поля [271, 105, 268, 269], анизотропной температурой сверхпроводящего перехода [272] и т.д.

В этом разделе мы продолжаем изучать необычные свойства сверхпроводимости на фоне волны плотности. Мы вычислим верхнее критическое поле H_{c2} в солитонном сценарии разделения ВП и сверхпроводимости и покажем, как расхождение H_{c2} при $P \rightarrow P_{c1}$ появляется на фоне солитонной фазы. В этом случае мы также объясним кривизну с загибом вверх на температурной зависимости верхнего критического поля H_{c2z} вдоль оси z , перпендикулярной проводящим слоям. Возможность объяснить этот загиб в сценарии открытых карманов и ограничения приближения слабой связи для описания сверхпроводимости на фоне ВП тоже будут кратко обсуждаться. Мы также объясним наблюдаемый гистерезис в зависимости температуры сверхпроводящего перехода $T_{cDW}^{SC}(P)$ на фоне ВП от давления в обоих сценариях.

Как и в предыдущих разделах этой главы, мы будем считать температуру сверхпроводящего перехода гораздо меньше, чем температуру перехода в ВП. Как уже упоминалось выше, это с хорошей точностью выполняется для большинства соединений. Например, в органических металлах $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ $T_c^{SDW} \approx 8.5\text{K} \gg T_c^{SC} \approx 1.1\text{K}$, и в $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$, $T_c^{CDW} \approx 8\text{K} \gg T_c^{SC} \approx 0.1\text{K}$. Поэтому масштабы энергии, связанные с ВП намного больше, чем связанные со сверхпроводимостью, и мы можем пренебречь обратным влиянием сверхпроводимости на ВП.

Микроскопическая структура состояния с неоднородной ВП в солитонной фазе изучалась в разделе 4.3. В этом разделе мы воспользуемся этим описанием и изучим некоторые свойства сверхпроводимости на фоне солитонной фазы ВП.

5.5.1 Температура перехода

Закон дисперсии квазичастиц в солитонной фазе дается Ур. (4.92)-(4.94) в разделе 4.3. Этот закон дисперсии сильно зависит от исходного $\varepsilon(\mathbf{k})$, и также от него зависит получающаяся плотность состояний. Важно, что на уровне Ферми плотность состояний в

солитонной фазе конечна и, в принципе, может даже превышать исходную, что приводит к конечной температуре сверхпроводящего перехода. С учетом перенормировки e - e взаимодействия, обсуждавшегося в разделе 5.2.4, температура сверхпроводящего перехода на фоне солитонной фазы ВП может оказаться выше, чем без ВП. Для вычисления температуры сверхпроводящего перехода на фоне солитонной фазы волны зарядовой плотности (вернее только ее приближенной связи с температурой сверхпроводящего перехода без ВП, поскольку нам не известно e - e взаимодействие) можно воспользоваться уравнениями из раздела 5.2.3, подставив в них другой закон дисперсии, заданный Ур. (4.92)-(4.94). Мы не будем здесь вычислять температуру сверхпроводящего перехода на фоне солитонной фазы ВЗП, поскольку она слишком сильно зависит от исходного закона дисперсии, который не всегда известен в мелких деталях. Намного проще взять эту температуру из опыта.

В случае волны спиновой плотности (ВСП), с солитонной структурой как и в случае однородной ВСП, происходит взаимодействие спиновой структуры параметров порядка ВСП и сверхпроводимости. Выписывая уравнения Горькова с учетом спиновой структуры параметров порядка, используя коммутационные соотношения матриц Паули, мы приходим к результату, аналогичному полученному в разделе 5.4: волна спиновой плотности подавляет спин-синглетное сверхпроводящее спаривание. То есть температура перехода в спин-синглетную сверхпроводимость на фоне солитонной фазы ВСП существенно подавлена (для зарядовой константы e - e взаимодействия в куперовском канале) по сравнению с тем, что было бы без ВСП. Спин-триплетное сверхпроводящее спаривание оказывается практически не подавленным волной спиновой плотности, когда вектора поляризации $\tilde{\mathbf{d}}$ и $\tilde{\mathbf{I}}$ спиновой структуры параметров порядка сверхпроводимости и ВСП параллельны друг другу [275].

5.5.2 Верхнее критическое поле сверхпроводимости на фоне солитонной фазы волны плотности

В функционале Гинзбурга-Ландау для сверхпроводимости, коэффициенты тензора масс $1/m_{ij}$ перед градиентным членом могут быть выражены через произведение $\langle v_i v_j \rangle$ электронных скоростей v_i , усредненное по поверхности Ферми [337] [см. Ур. (5.41)-(5.43) в разделе 5.3]. Используя этот результат и упрощенный закон дисперсии (4.92)-(4.94) в

солитонной зоне, легко получаем

$$\begin{aligned}\frac{1}{m_{yy}} &= \frac{14\zeta(3)(t'_b b)^2}{3\pi^2 T_c^{SC} \hbar^2}, \\ \frac{1}{m_{xx}} &= \frac{7\zeta(3) E_-^2 (\pi/2\kappa_0)^2}{24\pi^2 T_c^{SC} \hbar^2} = \frac{7\zeta(3) E_-^2}{24\pi^2 T_c^{SC} \hbar^2 n_s^2},\end{aligned}\quad (5.65)$$

и верхнее критическое поле $H_{c2}^z = (c/e\hbar)(T_c^{SC} - T)\sqrt{m_{xx}m_{yy}}$ вдоль оси z дается выражением

$$H_{c2}^z = C_{1s} \frac{T_c^{SC} (n_s \xi_{SDW}) c (T_c^{SC} - T)}{E_- e b v_F}, \quad (5.66)$$

где $\xi_{DW} = \hbar v_F / \pi \Delta_0$, $n_s \xi_{DW} \approx 1/\pi \ln(4\sqrt{2}\Delta_0/E_-)$, и числовая константа $C_{1s} = 12\pi^3/7\zeta(3) \approx 44.2$. Ур. (5.66) похоже на Ур. (5.48) в разделе 5.3, полученное для однородной ВП с бесщелевыми карманами. Вместо малого размера этих карманов $\delta = 2t'_b - \Delta_0$, входящего в Ур. (5.48), в Ур. (5.66) входит малая ширина солитонной зоны E_- . При $P \rightarrow P_{c1}$, обе эти величины стремятся к нулю: $\delta \rightarrow 0$ и $E_- \rightarrow 0$, и в обоих сценариях функции $\delta(P)$ и $E_-(P)$ зависят от исходного закона электронной дисперсии $t_\perp(\mathbf{k}_\perp)$. Подставляя Ур. (4.99) в Ур. (5.66), получаем что в солитонном сценарии сосуществования сверхпроводимости и ВП, наклон

$$dH_{c2}^z/dT \propto 1/\sqrt{P - P_{c1}}, \quad (5.67)$$

и верхнее критическое поле H_{c2} расходится при $P \rightarrow P_{c1}$, аналогично "кармашковому" сценарию в разделах 5.2-5.4. Эта расходимость согласуется с экспериментальными данными (см. Рис. 5.6, взятый из Рис. 2 в статье [271] и из Рис. 5 в статье [105]).

Физическая причина этой расходимости, как и в разделе 5.3 заключается в сильном изменении закона дисперсии квазичастиц в состоянии с волной плотности. Вблизи квантового фазового перехода при $P \rightarrow P_{c1}$, когда концентрация солитонных стенок n_s очень мала, солитонная зона согласно Ур. (4.94) и (4.90) становится экспоненциально узкой. Это приводит к уменьшению среднеквадратичной скорости на уровне Ферми (или коэффициента диффузии), что увеличивает верхнее критическое поле H_{c2} .

Проведем теперь количественное сравнение полученных результатов для верхнего критического поля с экспериментом. Для (TMTSF)₂PF₆ подстановка $E_- \sim \sqrt{\Delta_0 \delta}$ в Ур. (5.66) дает наклон

$$\frac{dH_{c2}^z}{dT} \approx \frac{7.8}{\ln(4\sqrt{2}\Delta_0/\delta)} \frac{T_c^{SC}}{\sqrt{\Delta_0 \delta}} \left[\frac{Tesla}{^\circ K} \right]. \quad (5.68)$$

и максимальный наклон $dH_{c2}^z/dT \approx 0.6 [Tesla/^\circ K]$ находится в разумном согласии с экспериментом (см. Рис. 5.6а или Рис. 2 в статье [271]). Вдали от $P = P_{c1}$, $E_- \approx \Delta_0$, и Ур.

(5.66) дает $dH_{c2}^z/dT \approx 0.25 [Tesla/^\circ K]$, что опять-таки находится в хорошем согласии с экспериментальными данными на Рис. 2 статьи [271] или на Рис. 5.6а. Для α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄, подстановка $E_- \approx \Delta_0$ в Ур. (5.66), используя соотношение БКШ $\Delta_0 = 1.76T_c^{CDW}$, дает $H_{c2}^z \approx 7.7 \text{ mTesla} \cdot (1 - T/T_c^{SC})$, или $dH_{c2}^z/dT \approx 77 [mTesla/^\circ K]$ в качественном согласии с экспериментом (см. Рис. 5.6b или Рис. 5 и 6 в статье [105]).

Кривизна линий $H_{c2}^z(T)$ на Рис. 5.6, направленная вверх и противоречащая обычной ситуации, может быть легко объяснена в случае солитонных стенок, где она аналогична $H_{c2}(T)$ в слоистых сверхпроводниках, когда магнитное поле параллельно проводящим слоям. Последний случай был рассмотрен в ряде теоретических статей (см., например, [342, 343, 344], или §16 в книге [338]). Одномерная сеть солитонных стенок может рассматриваться как одномерная джозефсоновская решетка, в которой проводящие слои толщиной ξ_{DW} разделены изолирующими слоями толщиной $s = 1/n_s$. При малом магнитном поле, эта решетка джозефсоновских контактов ведет себя как трехмерный сверхпроводник с верхним критическим полем $H_{c2}^i = e_{ijk} \Phi_0 / 2\pi \xi_j(T) \xi_k(T)$, где Φ_0 – квант магнитного потока, а $\xi_i(T)$ – длина когерентности сверхпроводимости в направлении i . Вблизи критической температуры $\xi_i \propto (T_{cSC} - T)^{-1/2}$. При высоких полях, верхнее критическое поле стремится к его значению (5.53) в тонких двумерных слоях толщиной $d_s \sim \xi_{DW} \ll \xi_{SC}$ [344]. В (TMTSF)₂PF₆, $\xi_{DW}/\xi_{SC} \approx 1/10$, и согласно Ур. (5.53), верхнее критическое поле H_{c2}^z на фоне ВП может увеличиться в $H_{c2}/H_{c2}^0 \lesssim 30$ раз по сравнению с верхним критическим полем H_{c2}^0 в объемном сверхпроводнике, то есть в отсутствие ВП с солитонной структурой.

Кроссовер от трехмерного к двумерному поведению H_{c2}^z возникает, когда ширина солитонной зоны становится мала: $E_- < \hbar^2/m_y \xi_{SC}^2$, где $\xi_{SC} \approx \hbar v_{y\text{max}}/\pi \Delta_{SC}(T)$ – это зависимость корреляционной длины от температуры внутри проводящего слоя, и $m_y \approx t'_b/v_{y\text{max}}^2$. Это дает кроссовер при $E_- \sim [\pi \Delta_{SC}(T)]^2/t'_b$. Поэтому, верхнее критическое поле увеличивается и ведет себя как в изолированном слое только при $P \rightarrow P_{c1}$ и только при низкой температуре, что приводит к необычной (направленной вверх) кривизне $H_{c2}^z(T)$ при $P \rightarrow P_{c1}$. Обратим внимание, что солитонная структура важна для необычной (направленной вверх) кривизны $H_{c2}^z(T)$ только для z-компоненты магнитного поля, поскольку она создает узкие проводящие слои параллельно оси z и магнитному полю. Если магнитное поле лежит в плоскости x-y, то оно уже параллельно проводящим молекулярным слоям и может иметь необычную кривизну вверх согласно модели Лоуренса-Дониака (Lawrence-Doniach) даже без солитонных стенок.

Точное описание сверхпроводящих свойств на фоне ВП в обоих рассмотренных

выше сценариях (солитонном и "кармашковом") должно выходить за рамки теории в приближении слабой связи, потому что новые энергии Ферми (δ_F в бесщелевых карманах на ПФ, частично покрытой щелью ВП, или ширина солитонной зоны E_-) сопоставимы с энергетической щелью сверхпроводимости при $P \rightarrow P_{c1}$ и намного меньше энергии Дебая. Этот факт, например, даже в сценарии открытых карманов может привести к необычной кривизне линии $H_{c2}^z(T)$, которая в эксперименте направлена вверх (см. Рис. 5.6) и соответствует положительной второй производной. Согласно Ур. (5.48)

$$H_{c2}^z \propto 1/\sqrt{\langle v_x^2 \rangle \langle v_y^2 \rangle} \propto 1/\delta_F. \quad (5.69)$$

Когда $\delta_F < T_c^{SC}$, малая величина δ_F размазана высокой температурой. Качественно (феноменологически), это размытие может быть учтено с помощью замены $\delta_F \rightarrow \sqrt{\delta_0^2 + \alpha T^2}$, $\alpha \sim 1$. При $P \rightarrow P_{c1}$ подставляя это и $\delta_0 \propto P - P_{c1}$ в Ур. (5.69), получаем

$$H_{c2}^z \propto 1/\sqrt{\beta(P - P_{c1})^2 + \alpha T^2}, \quad (5.70)$$

что дает нужную кривизну $H_{c2}^z(T)$ и хорошо описывает (с двумя подгоночными параметрами α и β) экспериментальные данные [271, 105] в органических металлах $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ и $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$. Эти вопросы требуют дальнейшего теоретического исследования.

5.6 Заключение и обсуждение

Сверхпроводимость (SC) может микроскопически сосуществовать с волной плотности (ВП), когда нестинг поверхности Ферми (ПФ) не идеальный, что реализуется в очень многих соединениях [270]. В этой главе мы показали, что теоретически возможны, по крайней мере, две различные структуры такого микроскопического сосуществования: (1) "разделение в импульсном пространстве", когда из-за неидеального нестинга щель ВП покрывает не всю ПФ, оставляя часть электронных состояний на уровне Ферми (см. разделы 5.2.2 и 4.4.1), что приводит к куперовской неустойчивости; и (2) "микроскопическое пространственное разделение" с неоднородной "солитонной" фазой волны плотности (см. раздел 4.3), при которой возникает проводящая солитонная зона заряженных квазичастиц на уровне Ферми. При этом температура сверхпроводящего перехода на фоне ВП в любой из этих двух структур может быть сравнима (а иногда и превышать) температуру сверхпроводящего перехода без ВП. В этой главе мы также изучили свойства сверхпроводящего состояния в каждом из этих двух

сценариев и показали, что они существенно отличаются от свойств сверхпроводимости без ВП. Главные различия заключаются в необычном поведении верхнего критического поля H_{c2} на фоне ВП, которое может в несколько раз превышать H_{c2} без ВП и имеет нестандартную зависимость от давления и температуры. Полученные результаты объясняют экспериментальные наблюдения в слоистых органических металлах $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ и $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$ (см. Рис. 5.6).

ВП имеет два основных воздействия на сверхпроводимость. Во-первых, она перенормирует e - e взаимодействие, которое влияет на температуру сверхпроводящего перехода и тип спаривания. Во-вторых, ВП сильно изменяет закон дисперсии квазичастиц, что влияет на плотность состояний, критическую температуру, тип сверхпроводящего спаривания, верхнее критическое поле и т.д. Первый эффект (перенормировка e - e взаимодействия) был подробно исследован во многих работах (см. обзорные статьи [317, 318] и ссылки в них). Было установлено, что перенормировка e - e взаимодействия из-за критических флуктуаций помогает необычной сверхпроводимости [345] (с ненулевым угловым моментом куперовской пары). Однако вид перенормированного e - e взаимодействия сильно зависит от голого (неперенормированного) e - e взаимодействия, которое обычно не известно с достаточной точностью. В этой главе мы сосредоточились на второй части проблемы, то есть на влиянии изменения закона дисперсии квазичастиц из-за волны плотности при неидеальном нестинге на свойства сверхпроводящего состояния.

В обоих сценариях микроскопического сосуществования сверхпроводимости и ВП мы показали, что закон дисперсии электронов сильно отличается от того, что был в нормальном металлическом состоянии, так что даже очень небольшие бесщелевые карманы ПФ могут создать достаточно высокую плотность состояний на уровне Ферми. Этот факт делает наши результаты очень непохожие на предыдущие теоретические подходы, где закон электронной дисперсии на не покрытых энергетической щелью ВП участках ПФ был взят таким же, как и в металлическом состоянии [305, 306, 307, 333, 334, 336]. Для исходного квазиодномерного закона дисперсии в Ур. (4.11) и (4.12), плотность состояний на уровне Ферми в состоянии с ВП с малыми бесщелевыми карманами ПФ оказалась такой же, как и в металлическом состоянии без ВП (см. Ур. (5.18) и Рис. 5.2). Поэтому, температура сверхпроводящего перехода T_{cDW}^{SC} на фоне ВП с такими карманами оказалась сравнимой с температурой сверхпроводящего перехода T_{c0}^{SC} в металлическом состоянии [см. Ур. (5.40) и Рис. 5.2.4], а квантовые критические флуктуации при $P \approx P_{c1}$ могут еще увеличить T_{cDW}^{SC} , сделав ее выше чем T_{c0}^{SC} . Аналогичный результат получен и в солитонном сценарии микроскопического сосуществования сверхпроводимости и ВП.

ВП значительно изменяет сверхпроводящие свойства. Верхнее критическое поле H_{c2} имеет необычную зависимость от давления [см. Ур. (5.51)] и может существенно превысить H_{c2} без ВП. Согласно Ур. (5.48) и (5.51), H_{c2} даже расходится при $P \rightarrow P_{c1}$; эта расходимость обрезается при $\delta_F \sim T_c^{SC}$.

Мы рассмотрели модель, когда сверхпроводимость возникала только из-за независящего от спина е-е взаимодействия в Ур. (5.1), в то время как волна плотности определялась и зарядовой, и спиновой константами взаимодействия. В этом случае волна спиновой плотности сильно подавляет спин-синглетную сверхпроводимость, а триплетная сверхпроводимость с определенной спиновой поляризацией ($\tilde{\mathbf{d}} \parallel \vec{l}$), параллельной поляризации ВСП, ведет себя аналогично синглетной сверхпроводимости на фоне волны зарядовой плотности. Это означает, что волна спиновой плотности способствует формированию триплетной сверхпроводимости по сравнению со спин-синглетной. Если оба типа спаривания возможны, система с ВСП будет выбрать триплетную сверхпроводимость, даже если она выбирала синглетную сверхпроводимость без ВСП. Однако еще раз подчеркнем, что этот результат верен только если сверхпроводимость возникает в основном из-за независящего от спина е-е взаимодействия. В купратах сверхпроводимость на фоне ВСП (из локализованных моментов) имеет спин-синглетное d-спаривание. Это с одной стороны подтверждает, что ВП (или хотя бы близость к неустойчивости в ВП) способствует необычной сверхпроводимости. С другой стороны это указывает, что в купратах сверхпроводимость возникает не только из-за зарядового е-е взаимодействия, как в Ур. (5.1), но и из-за е-е взаимодействия, содержащего спиновые операторы.

Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными наблюдениями в двух органических металлах $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ и $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$, где сверхпроводимость сосуществует с ВСП и ВЗП, соответственно. Даже триплетное сверхпроводящее спаривание в $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ на фоне ВСП было экспериментально подтверждено в работах [276].

Еще одна необычная особенность, наблюдающаяся в этих соединениях, заключается в гистерезисе на зависимости температуры сверхпроводящего перехода $T_c^{SC}(P)$ от давления. В солитонном сценарий этот гистерезис возможен из-за движения солитонных стенок при изменении давления P в целях достижения их оптимальной концентрации $n_s(P)$ как функции этого давления. Гистерезис в $T_c^{SC}(P)$ также может быть объяснен в сценарии однородной ВП с открытыми карманами на ПФ, если волновой вектор ВП \mathbf{Q}_N смещается при изменении давления $P > P_{c1}$, чтобы найти оптимальное значение при неидеальном

нестинге ПФ. Поскольку ВП пиннингуется несовершенствами кристалла (зацепляется за примеси и другие кристаллические дефекты), это смещение волнового вектора ВП имеет гистерезис, что приводит к гистерезису в размере бесщелевых карманов δ_F и в температуре сверхпроводящего перехода T_{SC} . Итак, полученные в этой главе результаты объясняют многие сверхпроводящие свойства на фоне волны плотности, наблюдающиеся в двух органических металлах $(TMTSF)_2PF_6$ и α -(BEDT-TTF) $_2$ KHg(SCN) $_4$ и в других соединениях.

Заключение

В диссертации представлен цикл исследований, опубликованный в 22 научных статьях, список которых приводится ниже в приложении. Из этих исследований можно сделать следующие выводы:

1. В сильно анизотропных слоистых квазидвумерных проводниках имеется ряд новых качественных особенностей магнитосопротивления, не описываемых стандартной теорией, развитой для трехмерных металлов. Например, возникает сильное продольное межслоевое магнитосопротивление $R_{zz}(B_z)$. В сильном магнитном поле B_z , когда расстояние между уровнями Ландау $\hbar\omega_c$ больше межслоевого интеграла перескока электронов t_z и уширения уровней $\Gamma_0 = \hbar/2\tau$, связанного с рассеянием на примесях, это магнитосопротивление имеет корневую зависимость $R_{zz}(B_z) \propto \sqrt{B_z}$. В обратном пределе слабого поля зависимость $R_{zz}(B_z)$ слабая, а в промежуточных магнитных полях может быть линейной. Это меняет и угловую зависимость магнитосопротивления.
2. Квантовые осцилляции продольного межслоевого магнитосопротивления в сильно анизотропных квазидвумерных металлах также имеют ряд качественных особенностей. Например, возникают медленные осцилляции магнитосопротивления и сдвиг фазы биений квантовых осцилляций магнитосопротивления относительно намагниченности. Эти новые эффекты отсутствуют в трехмерных теориях, считающих расстояние между уровнями Ландау $\hbar\omega_c$ много меньше всех зонных параметров, в том числе и межслоевого интеграла перескока электронов t_z . В чисто двумерном магнитосопротивлении они также не возникают, поскольку требуют конечного t_z .
3. В отличие от известных ранее квантовых осцилляций, частота медленных осцилляций магнитосопротивления имеет немонотонную угловую зависимость, а температурное затухание амплитуды медленных осцилляций определяется не температурным размытием функции распределения Ферми, а только зависящими от температуры механизмами рассеяния электронов. Поэтому медленные осцилляции заметны при существенно более высоких температурах, чем квантовые осцилляции, и удобны для экспериментальных наблюдений. Частота медленных осцилляций позволяет извлечь из эксперимента важный параметр зонной структуры электронов

- величину интеграла межслоевого перескока t_z . Угловая зависимость частоты медленных осцилляций позволяет определить импульс Ферми электронов в проводящей плоскости.

4. В рамках стандартной теории изучена область применимости некоторых широко используемых более ранних формул и получены новые результаты для угловой зависимости магнитосопротивления и площади сечения поверхности Ферми (ПФ) квазидвумерных металлов с анизотропией в проводящей плоскости и различной симметрией. Например, показано что Ур. (3.7) или (3.25) для зависимости углов Ямаджи от азимутального угла наклона магнитного поля хорошо работают для вытянутой ПФ в проводящей плоскости, но не применимы, если эта ПФ имеет тетрагональную или гексагональную симметрию. Разложение по гармоникам для угловой зависимости площади поперечного сечения ПФ до первого порядка по гофрировке ПФ в Ур. (3.33) не применимо даже в главном порядке для определения анизотропии ПФ в проводящей плоскости. Для этой цели получены новые формулы (3.44) и (3.48) для различных типов кристаллической симметрии.
5. Возможны дополнительные незонные ("некогерентные") механизмы межслоевой проводимости, например, межслоевой перенос электронов по резонансным примесям или другим локальным кристаллическим дефектам. Этот механизм проявляется в угловой зависимости межслоевого магнитосопротивления $R_{zz}(\mathbf{B})$: оно слабее зависит от поля B_{\parallel} вдоль слоев (и перпендикулярно току), но сильнее зависит от компоненты поля $B_z = B_{\perp}$ вдоль тока и перпендикулярной слоям.
6. Исследована микроскопическая структура и фазовая диаграмма волн зарядовой плотности (ВЗП) в сильном магнитном поле B , когда зеемановское расщепление больше щели ВЗП и волновой вектор ВЗП смещен (аналогично неоднородной ЛОФФ фазе сверхпроводимости). Такая ВЗП может иметь разные модуляции параметра порядка. С помощью разложения Гинзбурга-Ландау до членов четвертого порядка показано, что в сильном магнитном поле почти во всей области фазовой диаграммы (в координатах B - T) энергетически более выгодной оказывается ВЗП с двумя волновыми векторами и косинусоидальной модуляцией параметра порядка, непрерывно переходящей в солитонную структуру при понижении температуры.
7. Существует широкий класс закона дисперсии электронов, при котором возникает неоднородная (солитонная) фаза волны плотности (ВП). Измерение анизотропии

проводимости позволяет экспериментально отделить солитонную фазу от другой возможной микроскопической структуры ВП при неидеальном нестинге.

8. Исследовано изменение анизотропии проводимости при переходе в состояние с волной плотности (ВП) для различных микроскопических структур ВП. Показано, что оно может дать информацию о микроскопической структуре ВП, например, о зависимости щели ВП от импульса электронов. Эта информация особенно ценна, когда данные ARPES для этого соединения отсутствуют.
9. Перестройка поверхности Ферми (ПФ), вызванная волной плотности, влияет на различные эффекты в магнитосопротивлении. Кроме изменения частот магнитных квантовых осцилляций, эта перестройка ПФ может привести к другим интересным эффектам: к переходам Лифшица 2.5 рода, к локальному (в импульсном пространстве) увеличению эффективной массы электронов, измеряемой по магнитным квантовым осцилляциям, к магнитному пробую и дополнительному механизму рассеяния электронов проводимости.
10. При неидеальном нестинге поверхности Ферми возможны как минимум две структуры, при которых сверхпроводимость микроскопически (а не в виде макроскопических доменов) сосуществует с волной плотности: (1) когда щель ВП покрывает не всю ПФ, оставляя часть электронных состояний на уровне Ферми, что приводит к куперовской неустойчивости; и (2) неоднородная "солитонная фаза" ВП, при которой возникает проводящая солитонная зона заряженных квазичастиц на уровне Ферми. В каждом из этих двух сценариев температура сверхпроводящего перехода на фоне ВП может быть сравнима (а иногда и превышать) температуру сверхпроводящего перехода без ВП.
11. Исследованы свойства сверхпроводящего состояния на фоне ВП (в каждом из двух вышеперечисленных сценариев) и показано, что они существенно отличаются от свойств сверхпроводимости без ВП. Например, верхнее критическое поле H_{c2} на фоне ВП может в несколько раз превышать H_{c2} без ВП и имеет нестандартную зависимость от давления и температуры. Полученные результаты объясняют экспериментальные наблюдения в слоистых органических металлах $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ и $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$.
12. Взаимодействие спиновой структуры параметров порядка сверхпроводимости и волны спиновой плотности подавляет синглетную сверхпроводимость (и не

подавляет триплетную), если куперовское спаривание возникает в основном из-за независящего от спина (зарядового) электрон-электронного взаимодействия.

13. Детальное сравнение всех перечисленных выше теоретических результатов с экспериментом показало их применимость и пользу для описания электронной структуры реальных соединений. Полученные результаты впервые объяснили многие довольно общие экспериментальные наблюдения в сильно-анизотропных слоистых квазидвумерных проводниках, например, в органических металлах, таких как α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄, β -(BEDT-TTF)₂IBr₂, (TMTSF)₂PF₆ и др., в трителлуридах редкоземельных металлов и в других соединениях.

Приложения

А Приложения к главе 1

А.1 Вывод независимости от квантовых чисел электронной собственно-энергетической части в приближении без пересечения примесных линий

В этом разделе методом математической индукции будет показано, что в приближении без пересечения примесных линий (см. Рис. 1.1) в магнитном поле функция Грина электрона, усредненная по конфигурациям примесей, имеет вид Ур. (1.10):

$$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \varepsilon) = \sum_{n, k_y, k_z} \frac{\Psi_{n, k_y, k_z}^{0*}(\mathbf{r}_1) \Psi_{n, k_y, k_z}^0(\mathbf{r}_2)}{\varepsilon - \epsilon_{3D}(n, k_z) - \Sigma(\varepsilon)}, \quad (\text{A.1})$$

где неприводимая собственно-энергетическая часть $\Sigma(\varepsilon)$ не зависит от k_y и k_z .

В нулевом порядке (без примесей) эти условия выполняются согласно определению функции Грина. Предположим, что условие независимости $\Sigma(\varepsilon)$ от k_y и k_z выполнено для неприводимой собственно-энергетической части $\Sigma_j(\varepsilon)$, содержащей вклад диаграмм с примесными линиями от не более чем j различных примесей. Предположим также, что в этом же порядке, учитывающем не более j различных примесей в одной диаграмме, выполняется и Ур. (A.1):

$$G_j(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \varepsilon) = \sum_{n, k_y, k_z} \frac{\Psi_{n, k_y, k_z}^{0*}(\mathbf{r}_1) \Psi_{n, k_y, k_z}^0(\mathbf{r}_2)}{\varepsilon - \epsilon_{3D}(n, k_z) - \Sigma_j(\varepsilon)}. \quad (\text{A.2})$$

Тогда усредненная по положениям примесей функция Грина в совпадающих точках, $G_j(\varepsilon, r, r) = G_j(\varepsilon)$, зависит только от энергии, что проверяется интегрированием по k_y :

$$G_j(\varepsilon, r, r) = \sum_{n, k_y, k_z} \frac{\Psi_{n, k_y, k_z}^{0*}(r) \Psi_{n, k_y, k_z}^0(r)}{\varepsilon - \epsilon_{3D}(n, k_z) - \Sigma_j(\varepsilon)} = \sum_{n, k_z} \frac{g_{LL}/d}{\varepsilon - \epsilon_{3D}(n, k_z) - \Sigma_j(\varepsilon)}. \quad (\text{A.3})$$

Если теперь включить диаграммы с еще одной $j + 1$ -ой примесью в неприводимую собственно-энергетическую часть,² она останется не зависящей от k_y, k_z и будет зависеть только от энергии ε :

$$\Sigma_{j+1} = U n_i / [1 - U G_j(\varepsilon_n)].$$

²Заметим, что усреднение по положениям $j + 1$ -ой примеси проводится независимо от остальных j примесей.

$$\underline{G_{j+1}(r_1, r_2)} = \underline{G_j(r_1, r_2)} + \underline{G_j(r_1, r_\alpha)} \overset{\alpha, j+1}{\square} \underline{G_j(r_\alpha, r_2)} + \underline{G_j(r_1, r_\alpha)} \overset{\alpha, j+1}{\square} \underline{G_j(r_\alpha, r_\beta)} \overset{\beta, j+1}{\square} \underline{G_j(r_\beta, r_2)} + \dots$$

Рисунок 5.7: Диаграммное представление Ур. (A.4) для функции Грина $G_{j+1}(\varepsilon, r_1, r_2)$. Квадрат с исходящей (к примеси, изображенной крестом) пунктирной линией с номером $j+1$ означает полную амплитуду рассеяния на этой примеси, представленную на Рис. 5.8 и содержащую в себе электронную функцию Грина $G_j(\varepsilon, r, r)$. Символами α или β с номером $j+1$ изображены разные примеси, каждая из которых не совпадает ни с одной из j примесей, присутствующих в $G_j(\varepsilon, r, r')$.

Функция Грина $G_{j+1}(\varepsilon, r_1, r_2)$ также сохраняет вид Ур. (1.10) [совпадающий с Ур. (A.1)], в чем можно убедиться прямым вычислением диаграмм, изображенных на Рис. 5.7 и 5.8:

$$G_{j+1}(\varepsilon, r_1, r_2) = G_j(\varepsilon, r_1, r_2) + \int d^3r \frac{UG_j(r_1, r)G_j(r, r_2)}{1 - UG_j(\varepsilon, r, r)} \quad (\text{A.4})$$

$$+ \frac{\int d^3r \int d^3r' UG_j(r_1, r)G_j(r, r')G_j(r', r_2)}{[1 - UG_j(\varepsilon, r, r)][1 - UG_j(\varepsilon, r', r')]} + \dots$$

Второй член в этой сумме после подстановки Ур. (A.2) принимает вид

$$\int d^3r \frac{UG_j(r_1, r)G_j(r, r_2)}{1 - UG_j(\varepsilon, r, r)} = \frac{U}{1 - UG_j(\varepsilon)} \sum_{n, k_y, k_z} \frac{\Psi_{n, k_y, k_z}^0(r_1)}{\varepsilon - \varepsilon_{3D}(n, k_z) - \Sigma_j(\varepsilon)} \quad (\text{A.5})$$

$$\times \sum_{n', k'_y, k'_z} \frac{\Psi_{n', k'_y, k'_z}^{0*}(r_2)}{\varepsilon - \varepsilon_{3D}(n', k'_z) - \Sigma_j(\varepsilon)} \int d^3r \Psi_{n, k_y, k_z}^{0*}(r) \Psi_{n', k'_y, k'_z}^0(r).$$

Интегрирование по d^3r в последней строчке дает $n_i \delta(n - n') \delta(k_y - k'_y) \delta(k_z - k'_z)$. Аналогично проводятся интегрирования по d^3r, d^3r', d^3r'' etc. в третьем и последующих членах в Ур. (A.4). Функция $G_{j+1}(\varepsilon, r_1, r_2)$ в итоге принимает вид

$$G_j(\varepsilon, r_1, r_2) + \frac{Un_i}{1 - UG_j(\varepsilon)} \sum_{n, k_y, k_z} \frac{\Psi_{n, k_y, k_z}^0(r_1) \Psi_{n, k_y, k_z}^{0*}(r_2)}{[\varepsilon - \varepsilon_{3D}(n, k_z) - \Sigma_j(\varepsilon)]^2} + \dots$$

$$= \sum_{n, k_y, k_z} \frac{\Psi_{n, k_y, k_z}^0(r_1) \Psi_{n, k_y, k_z}^{0*}(r_2)}{\varepsilon - \varepsilon_{3D}(n, k_z) - \Sigma_j(\varepsilon)} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{Un_i / [1 - UG_j(\varepsilon)]}{\varepsilon - \varepsilon_{3D}(n, k_z) - \Sigma_j(\varepsilon)} \right)^i$$

$$= \sum_{n, k_y, k_z} \frac{\Psi_{n, k_y, k_z}^0(r_1) \Psi_{n, k_y, k_z}^{0*}(r_2)}{\varepsilon - \varepsilon_{3D}(n, k_z) - \Sigma_{j+1}(\varepsilon)}, \quad (\text{A.6})$$

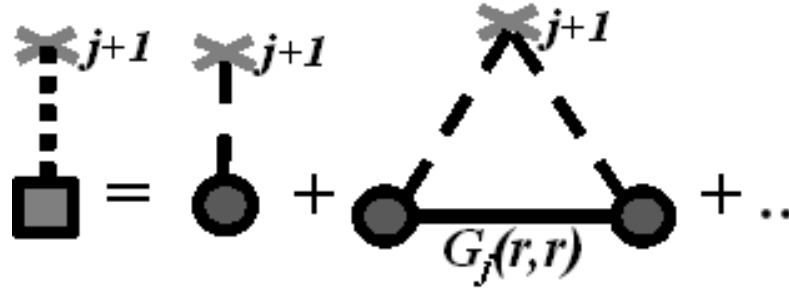


Рисунок 5.8: Диаграммное представление для полной амплитуды рассеяния на примеси с номером $j + 1$, изображенной квадратом с исходящей пунктирной линией на Рис. 5.7 и 5.8. Кругом с исходящей штриховой линией изображена амплитуда рассеяния первого порядка на примеси. Полная амплитуда, в отличие от амплитуды первого порядка, содержит в себе электронную функцию Грина $G_j(\varepsilon, r, r)$ в совпадающих точках, определяемых положением этой $j + 1$ -ой примеси. За исключением максимального числа j примесей в функции $G_j(\varepsilon, r, r)$, эта диаграмма совпадает с изображенной на Рис. 1.1.

где новая собственно-энергетическая часть

$$\Sigma_{j+1}(\varepsilon) = \Sigma_j(\varepsilon) + Un_i / [1 - UG_j(\varepsilon)]$$

зависит только от энергии ε . Функция Грина в Ур. (А.6) снова имеет вид Ур. (А.1). По методу математической индукции, это доказывает Ур. (А.2) для любого j , а значит и наше утверждение в Ур. (А.1).

При усреднении по примесям в Ур. (А.5) мы усредняли независимо функции Грина $G_j(\varepsilon, r_1, r_2)$, входящие в трех местах: $G_j(r_1, r)$, $G_j(r, r_2)$ и $G_j(\varepsilon, r, r)$. Это можно делать, поскольку эти три разные функции Грина могут содержать только рассеяние на разных примесях в рамках j -ого порядка и приближения без пересечения примесных линий. Действительно, присутствие одной и той же примеси в функциях Грина в числителе ($G_j(r_1, r)$ или $G_j(r, r_2)$) и в знаменателе $G_j(\varepsilon, r, r)$ в Ур. (А.5) давало бы диаграмму с пересечением примесных линий. А появление одной и той же примеси в обеих функциях Грина в числителе (но не в знаменателе) в первой строчке Ур. (А.5) давало бы следующий $j + 2$ -ой порядок по числу различных примесей в неприводимой собственно-энергетической части. Аналогичные рассуждения применимы и для последующих членов в Ур. (А.4).

А.2 Снятие вырождения уровней Ландау двумерных электронов точечными примесями

В этом разделе будет исследована плотность состояний и функция Грина двумерного электронного газа в сильном магнитном поле с учетом рассеяния на точечных примесях, равномерно распределенных по объему (в том числе и вдоль оси z , перпендикулярной слою). Будет показано, что учет электрон-примесного взаимодействия приводит к полному снятию вырождения уровней Ландау даже при малой объемной плотности точечных примесей. Вычислена плотность состояний в самосогласованном приближении, т.е. с учетом всех диаграмм без пересечений примесных линий. Будет показано, что электронная плотность состояний ρ определяется вкладом не полюса, а разреза одночастичной функции Грина. В широком интервале значений энергии электрона ω , отсчитанной от каждого уровня Ландау, плотность состояний $\rho(\omega)$ обратно пропорциональна $|\omega|$ и пропорциональна концентрации примесей. Результаты применимы для таких двумерных электронных систем, как инверсионные слои, гетероструктуры и электроны на поверхности жидкого гелия.

1. Двумерные электронные системы реализуются на границе раздела двух конденсированных сред. Типичными примерами таких систем являются электроны на поверхности жидкого гелия [346], электроны в инверсионных слоях и гетероструктурах [76]. В магнитном поле спектр двумерных электронов дискретен и бесконечно кратно вырожден. Интересен вопрос о снятии этого вырождения взаимодействием электронов с точечными примесями. Существует мнение, что при малой поверхностной плотности таких примесей n_s бесконечно кратное вырождение уровней Ландау снимается только частично [74]. А именно, если выполнено неравенство: $N < \frac{S}{2\pi l_H^2}$ где N – полное число примесей: $N = n_s S$, S – площадь доступная для электронов, а l_H – магнитная длина, то кратность вырождения уровня Ландау равна $\frac{S}{2\pi l_H^2} - N$. При этом N электронных состояний отщепляются от каждого уровня и образуют примесную зону. Изящное доказательство этого утверждения [74], основано на возможности так определить волновую функцию электронов на уровне Ландау, что она зануляется в точках расположения примесей. Если примеси точечные, то они не влияют на спектр $\frac{S}{2\pi l_H^2} - N$ электронных состояний. Однако, такой вывод нуждается в определении поверхностной плотности примесей n_s . Дело в том, что двумерные электронные системы, как правило, являются открытыми. Движение электронов по оси z , перпендикулярной проводящей плоскости, характеризуется волновой функцией $\varphi(z)$, ограниченной очень большим,

макроскопическим масштабом z_∞ , зависящим от геометрии измерительного прибора. Типичная зависимость φ от z имеет вид [4, 76]

$$\varphi^2(z) = \frac{1}{2z_0} z_*^2 e^{-z_*} \quad \text{если } 0 < z < z_\infty \quad (\text{A.7})$$

$$\varphi(z) = 0 \quad \text{если } z < 0, \quad z_* \equiv z/z_0$$

Для электрона доступна вся область $z > 0$, а не только $z \leq z_0$, поэтому даже при малой объемной плотности примесей n_{imp} , поверхностная их плотность $n_S = n_{imp} z_\infty$ очень велика и можно положить $n_S = \infty$. По этой причине бесконечно кратное вырождение уровней Ландау снимается взаимодействием электронов с точечными примесями полностью, а не частично. Ниже определена электронная плотность состояний ρ при малой концентрации примесей $C_0 \equiv n_{imp} 2\pi l_H^2 z_0 \ll 1$. Иначе говоря, предполагается, что примесей мало в поверхностном слое $z \leq z_0$, но много в области $z < z_\infty$: $C_\infty = C_0 \frac{z_\infty}{z_0} \gg 1$. Это обычно имеет место на опыте [346], [76]. Для электронов на поверхности жидкого гелия в роли точечных примесей выступают тяжелые атомы пара гелия.

2. Плотность состояний $\rho(E)$ связана с мнимой частью функции Грина электронов $G(r, r', E)$ соотношением $\rho(E) = \frac{-1}{\pi} \text{Im}G(E)$, где $G(E) = \int d^3r G(r, r, E)$ [332]. Поскольку электронная система однородна вдоль проводящей плоскости (x, y) , функция Грина $G(r, r, E)$ не зависит от координаты вдоль этой плоскости: $G(r, r, E) = G(z, E)$. Обычно расстояние между электронными уровнями вдоль оси z велико, и все электроны находятся на нижнем энергетическом уровне и имеют одну и ту же волновую функцию $\varphi(z)$. Поэтому $G(z, E) = G(E)\varphi^2(z)$. Магнитное поле H предполагается сильным, поэтому взаимодействие электронов с примесью $V(\mathbf{r})$ не перемешивает их волновые функции на разных уровнях Ландау. Следовательно, плотность состояний $\rho(E)$ зависит только от переменной $\omega \equiv E - \varepsilon_0 - (n + 1/2)\omega_c$, где ε_0 – энергия нижнего уровня квантования по оси z , а ω_c – циклотронная энергия. Мы будем рассматривать точечные примеси. Потенциал взаимодействия электрона с такими примесями дается выражением из Ур. (1.6):

$$V(\mathbf{r}) = u_0 \sum_i \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(z - z_i) \quad (\text{A.8})$$

Здесь x, y, z, x_i, y_i, z_i – координаты электрона и примесей. Длина рассеяния электрона на примеси

$$a = -\frac{m u_0}{2\pi \hbar^2}. \quad (\text{A.9})$$

Функция Грина $G(\omega)$, связана с затравочной функцией $G_0(\omega)$ чистой электронной

системы известным соотношением [332]

$$G(\omega) = \frac{1}{G_0^{-1}(\omega) - \Sigma(\omega)}, \quad G_0(\omega) = \frac{1}{\omega}. \quad (\text{A.10})$$

Функция $\Sigma(\omega)$ (A.10) определяется в хорошо разработанной крестовой технике [118, 332, 72, 73]:

$$\Sigma(\omega) = u_0 n_{imp} \int_0^{z_\infty} \frac{\varphi_0^2(z) dz}{1 - \frac{u_0}{2\pi l_H^2} \varphi_0^2(z) G(\omega)}. \quad (\text{A.11})$$

Это выражение (A.11) соответствует суммированию всех крестовых диаграмм без пересечений примесных линий [72], с последующим усреднением по положениям примесей. Соотношения (A.10), (A.11) верны только для точечных примесей (A.8). Удобно определить приведенную волновую функцию φ_* поперечного движения электрона соотношением

$$\varphi_0^2(z) = \frac{1}{z_0} \varphi_*^2(z_*), \quad z_* \equiv \frac{z}{z_0}, \quad \int \varphi_*^2(z_*) dz_* = 1, \quad (\text{A.12})$$

где z_0 – характерный масштаб функции $\varphi_0(z)$. Из (A.9), (A.11), (A.12) получаем

$$\Sigma(\omega) = -G^{-1}(\omega) C_0 J(\omega); \quad J(\omega) \equiv \int_0^{z_\infty/z_0} \frac{\varphi_*^2(z_*) dz_*}{\varphi_*^2(z_*) - 1/[\omega_0 G(\omega)]}, \quad (\text{A.13})$$

где $C_0 \equiv 2\pi l_H^2 z_0 n_{imp}$, $\omega_0 \equiv -(a/z_0)\omega_c$.

3. Рассмотрим сначала первый порядок по концентрации примесей. Для этого надо в формулах (A.11), (A.13) заменить точную функцию Грина G на затравочную функцию $G_0 = 1/\omega$. Это приближение соответствует суммированию всех крестовых диаграмм, отвечающих рассеянию электрона на одной примеси. Из (A.10), (A.13) видно, что функция Грина G формально имеет полюс при $\omega = 0$:

$$G = \frac{1}{\omega[1 + C_0 J(\omega)]}. \quad (\text{A.14})$$

Однако, как это следует из (A.13), при $\omega \rightarrow 0$ интеграл по z_* расходится, что приводит к малости вычета в этом полюсе, связанной с величиной параметра обрезания z_∞

$$\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\omega) = \delta(\omega) \frac{1}{1 + C_\infty}; \quad C_\infty = C_0 \frac{z_\infty}{z_0} \quad (\text{A.15})$$

Положив $z_\infty = \infty$, приходим к выводу о полном снятии бесконечно кратного вырождения уровней Ландау уже в первом порядке по концентрации примесей. Плотность состояний $\rho(\omega)$ определяется только особенностями величины $J(\omega)$ (A.13)

$$\rho(\omega) = \frac{-C_0 \text{Im}J(\omega)}{\pi\omega[(1 + C_0 \text{Re}J(\omega))^2 + C_0^2 \text{Im}^2 J(\omega)]} \quad (\text{A.16})$$

Рассмотрим, прежде всего, модельный случай, когда приведенная волновая функция φ_* имеет вид

$$\begin{aligned}\varphi_*^2(z_*) &= e^{-z_*} \quad \text{при } z_* > 0 \\ \varphi_*^2(z_*) &= 0 \quad \text{при } z_* < 0.\end{aligned}\tag{A.17}$$

Такая функция отвечает граничному условию при $z = 0$ для узкой и глубокой потенциальной ямы. Функция $J(\omega)$ (A.13) принимает вид

$$J(\omega) = \ln \frac{\omega - \omega_0}{\omega}.\tag{A.18}$$

Предполагая, что есть только один тип примесей с отрицательной длиной рассеяния a , что соответствует отталкиванию электрона от примеси, из (A.16), (A.18) получаем

$$\rho(\omega) = \frac{C_0}{\omega \left[\left(1 + C_0 \ln \frac{\omega_0 - \omega}{\omega} \right)^2 + C_0^2 \pi^2 \right]}.\tag{A.19}$$

Плотность состояний $\rho(\omega)$, в рассматриваемом случае определяется не полюсом, а разрезом функции Грина $G(\omega)$. Учитывая определение параметра ω_0 (A.13), получаем критерий слабости электрон-примесного взаимодействия $V(\mathbf{r})$ (A.9): $a \ll z_0$. Следовательно, если длина рассеяния электрона на примеси меньше характерного масштаба поперечного квантования по оси z , то применимо приближение одного уровня Ландау, а плотности состояний разных уровней не пересекаются. Из (A.19) следует, что в широкой области ω плотность состояний обратно пропорциональна ω

$$\rho(\omega) = \frac{C_0}{\omega} \quad \text{при } C_0 \ln \frac{\omega_0}{\omega} \ll 1\tag{A.20}$$

Функция $\rho(\omega)$ (A.19) интегрируема и, с точностью до членов пропорциональных квадрату концентрации примесей C_0 , имеет место равенство

$$\int \rho(\omega) d\omega \cong \int_0^{\omega_0} \frac{C_0 d\omega}{\omega [1 + C_0 \ln \frac{\omega_0 - \omega}{\omega}]^2} \cong 1.\tag{A.21}$$

Следовательно, при включении электрон-примесного взаимодействия, число электронных состояний не изменилось, хотя δ -образный пик затравочной плотности состояний $\rho_0(\omega)$ отсутствует у истинной плотности состояний $\rho(\omega)$. Это означает, что при любом малом значении параметра ω всегда найдется примесь с координатой $z_i = z_0 \ln \frac{\omega_0}{\omega} \gg z_0$, на которой будет снято вырождение уровней Ландау. От вида волновой функции $\varphi(z)$ этот вывод не зависит. Для физической функции $\varphi(z)$ (A.7) плотность состояний $\rho(\omega)$ дается

тем же выражением (A.19) при $\omega \ll \omega_0$, если не интересоваться величинами типа $\ln \ln \frac{\omega_0}{\omega}$. Важно только, что $\varphi(z) \sim e^{-z/z_0}$ при $z \gg z_0$. Более того, всегда существует широкая область ω , где $\rho(\omega)$ обратно пропорциональна ω . Например, для осцилляторной волновой функции: $\varphi_*(z_*) \sim e^{-z_*^2}$ из (A.16) получаем при $\omega \ll \omega_0$

$$\rho(\omega) = \frac{C_0}{2\omega(\ln \frac{\omega_0}{\omega})^{1/2}[1 + C_0(\ln \frac{\omega_0}{\omega})^{1/2}]^2}. \quad (\text{A.22})$$

Для случае сильного электрического поля, прижимающего электроны к границе раздела двух конденсированных сред: $\varphi_*^2(z_*) \sim e^{-z_*^{3/2}}$ и из (A.16) имеем при $\omega \ll \omega_0$

$$\rho(\omega) = \frac{2C_0}{3\omega(\ln \frac{\omega_0}{\omega})^{1/3}[1 + C_0(\ln \frac{\omega_0}{\omega})^{2/3}]^2}. \quad (\text{A.23})$$

Итак, для открытых электронных систем, учет электрон-примесного взаимодействия полностью снимает вырождение уровней Ландау. Плотность состояний $\rho(\omega)$ определяется выражениями (A.19)-(A.23). Обобщение на случай нескольких типов примесей тривиально. Например, аналогом (A.20) являются зависимости

$$\rho(\omega) = \frac{C_-}{\omega} \quad \text{при } \omega > 0 \quad (\text{A.24})$$

$$\rho(\omega) = \frac{C_+}{|\omega|} \quad \text{при } \omega < 0$$

где C_- – суммарная концентрация отталкивающих, а C_+ – притягивающих примесей.

4. Зависимость $\rho(\omega)$ (A.19) имеет место при

$$\omega_0 e^{-1/C_0} \ll \omega, \quad \omega_0 - \omega \gg e^{-1/C_0}. \quad (\text{A.25})$$

Вне этой области важны члены следующих порядков по концентрации примесей C_0 , поскольку они умножаются на большой логарифм $\ln[(\omega_0 - \omega)/\omega]$. Чтобы исследовать функцию Грина в более широкой области по ω рассмотрим самосогласованное приближение, представленного формулами (A.10), (A.11), (A.13). После подстановки (A.17) в (A.13) и (A.10) получаем уравнение на G :

$$G = \frac{1}{\omega}[1 - C_0 \ln(1 - \omega_0 G)]. \quad (\text{A.26})$$

При $\omega \ll \omega_0$, $\omega_0 G \gg 1$ уравнение (A.26) можно упростить:

$$G = \frac{-C_0}{\omega} [\ln(-\omega_0 G) - 1/C_0] = \frac{-C_0}{\omega} \ln \left(-\frac{e\omega_N G}{C_0} \right), \quad (\text{A.27})$$

где мы ввели новый масштаб энергии $\omega_N \equiv \omega_0 \exp(-1/C_0)C_0/e$. Введем новую функцию $y \equiv -\omega G/C_0$. Уравнение (A.27) принимает простой вид:

$$y = \ln(y \omega_N/\omega) + 1, \quad (\text{A.28})$$

из которого следует, что y зависит только от одной действительной переменной: $y = y(\omega/\omega_N)$. Выделим действительную и мнимую части этой функции: $y = A + iB$. Из (A.28) получаем систему двух уравнений на действительные функции A и B , которая сводится к виду:

$$\begin{aligned} A &= B/\tan B \\ e^{B/\tan B} \frac{\sin B}{B} &= \frac{\omega_N e}{\omega} \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Последнее уравнение определяет плотность состояний $\rho(\omega) = C_0 B/\pi\omega$. Нас интересует решение $B(\omega/\omega_N) \geq 0$. Функция $B(\omega/\omega_N)$ монотонно возрастает от нуля при $\omega = \omega_N$ до $B = \pi$ при $\omega/\omega_N \rightarrow \infty$. Вблизи $\omega = \omega_N$ функция $B \approx \sqrt{2(\omega - \omega_N)/(\omega_N)}$. При $\omega_N \ll \omega \ll \omega_0$ с точностью до дважды логарифмических членов по ω/ω_N функция $B = \pi[1 - 1/\ln(\omega/\omega_N)]$. Итак, при $\omega \ll \omega_0$ плотность состояний дается универсальной функцией от ω/ω_N , асимптотический вид которой при $C_0 \ll 1$ дается выражением:

$$\begin{aligned} \omega\rho(\omega)/C_0 &= \sqrt{2(\omega - \omega_N)/(\omega_N)}/\pi, \quad \text{при } \omega - \omega_N \ll \omega_N; \\ \omega\rho(\omega)/C_0 &= 1 - 1/\ln(\omega/\omega_N), \quad \text{при } \omega \gg \omega_N. \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Рассмотрим теперь область $|\omega - \omega_0| \ll \omega_0$, где в первом порядке по концентрации C_0 мы имели сингулярность в $ImG_0(\omega)$. Решение $G(\omega)$ самосогласованного уравнения (A.10),(A.11) не является сингулярным в этой области и монотонно спадает до нуля при $\omega = \omega_x \equiv \omega_0(1 + x_0)$, где x_0 является решением алгебраического уравнения $x_0 = C_0[\ln(1/C_0) + 1 + \ln(1 + x_0)]$. При $C_0 \ll 1$ получаем $x_0 \approx C_0[\ln(1/C_0) + 1 + C_0 \ln(1/C_0)]$. Вблизи $\omega = \omega_x$ из уравнения (A.26) проведя вычисления, аналогичные тем, что привели к (A.30), получаем

$$B(\omega) = \sqrt{2(\omega_x - \omega)[1/(\omega_0 C_0) - 1/\omega_x]}.$$

На Рис. 5.9 изображена приведенная плотность состояний $\omega\rho(\omega)/C_0 = B/\pi$ для трех различных концентраций примесей. При $\omega \ll \omega_0$ график выходит на универсальную кривую, которая смещается по оси абсцисс вместе со смещением ω_N . Полученное решение дает правильное поведение плотности состояний $\rho(\omega)$ пока она не обращается в ноль, т.е. на интервале $\omega_N < \omega < \omega_x$. Вне этого интервала имеются "хвосты" плотности состояний,

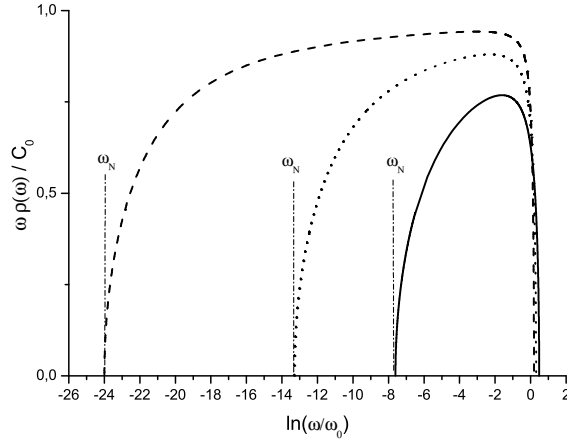


Рисунок 5.9: Приведенная плотность состояний $\omega\rho(\omega)/C_0$ в логарифмическом масштабе для трех различных значений концентрации примесей: $C_0 = 0.2$ (сплошная линия), $C_0 = 0.1$ (линия из точек) и $C_0 = 0.05$ (пунктирная линия). Для каждой кривой отмечено значение ω_N , вблизи которого зависимость $(\omega/C_0)\rho(\omega)$ является универсальной функцией от ω/ω_N .

которые экспоненциально малы и могут быть найдены только с учетом диаграмм с пересечением примесных линий [73].

В заключение еще раз подчеркнем, что предложенная нами физическая картина не согласуется с существующими в литературе представлениями. Некоторые точные результаты теории электрон-примесного взаимодействия для двумерных электронных систем приведены в [347, 75, 348]. Однако в этих работах рассматриваются двумерные точечные примеси, когда потенциал $V(r)$ (A.8) имеет вид Ур. (1.7):

$$V(r) = u_0\delta(x - x_i)\delta(y - y_i) \quad (\text{A.31})$$

Так как координата примеси по оси z не представлена, то $V(r)$ в Ур. (A.31) отвечает не точечной примеси, а δ -образной нити. Приведенные выше результаты предполагают трехмерность точечных примесей. Если "забыть" произвести усреднение по координате z_i , то мы перейдем в строго говоря нефизический предел δ -образных нитей.

А.3 Основное состояние двумерных электронов в неоднородном магнитном поле

В этом приложении приведено точное решение уравнения Шредингера для основного состояния двумерных паулевских электронов в неоднородном поперечном магнитном поле H для двух случаев. В первом - поле H зависит от одной переменной: $H = H(y)$, во втором - обладает аксиальной симметрией: $H = H(\rho)$, $\rho^2 = x^2 + y^2$. Найдены распределения плотности электронов: $n = n(y)$ и $n = n(\rho)$, отвечающие полностью заполненному нижнему уровню. Для квазиоднородных и знакопостоянных полей функции $n(y)$, $n(\rho)$ локально связаны с магнитным полем: $n(y) = H(y)/\phi_0$; $n(\rho) = H(\rho)/\phi_0$, где $\phi_0 = hc/|e|$ - квант магнитного потока. Рассмотрены периодические, сингулярные и ограниченные на плоскости x, y магнитные поля. Анализируются конечные электронные объекты в неоднородном магнитном поле.

1. Для спектра двумерных электронов в поперечном однородном магнитном поле H характерна высокая степень его вырождения. Каждый уровень $E_{n,\sigma}$ вырожден с кратностью $\frac{H}{\phi_0}S$, где $\phi_0 = \frac{hc}{|e|}$ квант магнитного потока, а S - площадь области доступной для электронов

$$E_{n,\sigma} = (n + \frac{1}{2} + \sigma)\hbar\omega_c; \quad \omega_c = \frac{H|e|}{Mc}. \quad (\text{A.32})$$

В уравнении (A.32) σ - проекция спина электронов на направление магнитного поля H : ($\sigma = \pm 1/2$); ω_c - циклотронная частота; e и M - заряд и масса электрона. В неоднородном поле $H = H(x, y)$ вырождение $E_{n,\sigma}$ снимается для всех уровней, кроме основного $E_{0,-1/2} = 0$, для которого спин электрона направлен против поля. Для поля $H(x, y)$ ограниченного на плоскости x, y в [349] точно определена степень вырождения основного состояния двумерных электронов через полный магнитный поток \bar{H}

$$\bar{H} = \int H(x, y) dx dy \equiv (N + \varepsilon)\phi_0. \quad (\text{A.33})$$

где N - целое число, а $0 < \varepsilon < 1$. При таком определении \bar{H} существует ровно N , связанных магнитным полем электронных состояний. Иначе говоря, степень вырождения основного состояния оказывается той же, что и в однородном поле с тем же потоком \bar{H} (A.33). Результат работы [1] существенно опирается на то, что электроны подчиняются линейному уравнению Дирака. Для случая дважды периодических магнитных полей основное состояние двумерных электронов исследовалось в [2]. В общей постановке задачи, которая характерна для работ [1,2], трудно определить наблюдаемые величины, например,

распределение плотности электронов $n(x, y)$, отвечающее полностью заполненному, насыщенному основному уровню $E_{0,-1/2} = 0$ в заданном неоднородном поле $H(x, y)$.

2. В этой работе нами рассмотрены два простейших типа неоднородных полей, для которых возможно определить функцию $n(x, y)$. Первое поле зависит только от одной переменной: $H = H(y)$, а второе обладает аксиальной симметрией: $H = H(\rho)$, где $\rho^2 = x^2 + y^2$. Для указанных полей точное решение задачи обладает поразительной простотой, что делает уместным сразу привести наши основные результаты. Для одномерного поля $H = H(y)$ волновые функции основного состояния $\psi_p(x, y)$ имеют вид (подробное обоснование см. ниже в разделе 4)

$$\psi_p(x, y) = e^{ipx} \psi_p(y) \quad \psi_p(y) = A_p \exp \left[py - \frac{2\pi\phi(y)}{\phi_0} \right]. \quad (\text{A.34})$$

В ур.(A.34): p - импульс свободного движения электрона по оси x , A_p - нормировочная постоянная, а $\phi(y)$ - потенциал поля $H(y)$

$$\phi''(y) = H(y). \quad (\text{A.35})$$

Для однородного поля $\phi(y) = Hy^2/2$ и (A.34) переходит в известное [93] выражение для волновых функций основного уровня Ландау. Распределение плотности электронов $n(y)$ выражается через нормированные функции $\psi_p(y)$ (A.34)

$$n(y) = \frac{1}{2\pi} \int \psi_p^2(y) dp \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^2(y) dy = 1. \quad (\text{A.36})$$

Область интегрирования по импульсу p в (A.36) неограничена ($-\infty < p < \infty$), если поток поля \bar{H} (A.33) неограничен ($\bar{H} = \infty$). В этом случае все функции ψ_p можно отнормировать. Если же \bar{H} имеет конечное значение, то конечна и область интегрирования по p в (A.36), что отвечает ограниченной на плоскости x, y электронной системе в неоднородном магнитном поле. Для физических приложений интересен пример знакопостоянного и квазиоднородного поля $H(y)$, когда магнитная длина $l_H(y)$ слабо зависит от y .

$$l_H^2(y) \equiv \frac{\hbar c}{|e|H(y)} \quad \frac{\partial l_H(y)}{\partial y} \ll 1. \quad (\text{A.37})$$

Если магнитная длина l_H мало меняется на расстояниях порядка её самой (A.37), то существует локальная связь плотности $n(y)$ и поля $H(y)$

$$n(y) = \frac{H(y)}{\phi_0} \quad \phi_0 = \frac{\hbar c}{|e|}. \quad (\text{A.38})$$

Для квазиоднородных полей (А.37) можно найти весь спектр электронов. Он дается выражением (А.32) с циклотронной частотой, зависящей от импульса p через уравнение $y_0 = y_0(p)$, где координата y_0 определена условием

$$p = \frac{|e|\hbar c}{\hbar c} \phi'(y_0) \quad \omega_c(y_0) = \frac{|e|\hbar c H(y_0)}{Mc}. \quad (\text{А.39})$$

Для периодического поля $H(y)$ все уровни Ландау (А.32), кроме основного, периодически зависят от импульса p , а (А.32), (А.35), (А.39) являются нелинейными уравнениями, определяющими эту зависимость. Ниже мы приведем несколько примеров полей $H(y)$, для которых можно отнормировать функции ψ_p (А.34) и найти плотность $n(y)$ (А.36).

3. Для аксиального поля $H = H(\rho)$ волновые функции основного состояния также связаны с потенциалом поля ϕ

$$\psi_m(\theta, \rho) = \frac{e^{-im\theta}}{\sqrt{2\pi}} R_m(\rho) \quad R_m = A_m \rho^m \exp\left(-\frac{2\pi\phi(\rho)}{\phi_0}\right). \quad (\text{А.40})$$

$$\phi''(\rho) + \frac{\phi'(\rho)}{\rho} = H(\rho),$$

где θ - азимутальный угол, m - магнитное квантовое число ($m > 0$), A_m - нормировочная постоянная. Распределение электронной плотности $n = n(\rho)$ дается выражением типа (А.36)

$$n(\rho) = \frac{1}{2\pi} \sum_m R_m^2(\rho) \quad \int_0^\infty R_m^2(\rho) \rho d\rho = 1. \quad (\text{А.41})$$

Для однородного поля: $\phi = H\rho^2/4$ и (А.40) определяет волновые функции основного состояния в калибровке Фока [93]. Для медленных и знакопостоянных полей $H(\rho)$ имеет место связь $n(\rho)$ и $H(\rho)$ типа (А.38)

$$n(\rho) = \frac{H(\rho)}{\phi_0}. \quad (\text{А.42})$$

Мы приведем примеры сингулярных полей, когда связь (11) не имеет места и рассмотрим конечные электронные системы с ограниченной суммой по m (А.41), что связано с конечностью потока \bar{H} (А.33). Если поток \bar{H} (А.33) равен целому числу, то плотность $n(\rho)$ (А.41) отвечает компактному электронному объекту с быстро спадающей асимптотикой: $n(\rho) \propto 1/\rho^4$ при $\rho \rightarrow \infty$. Если же к целочисленному потоку \bar{H} есть даже малый добавок ε (А.33), то характер асимптотики $n(\rho)$ сильно меняется

$$n(\rho) \propto \frac{\varepsilon}{\rho^{2+2\varepsilon}} \text{ при } \rho \rightarrow \infty. \quad (\text{А.43})$$

По принятой в атомной и ядерной физике терминологии, целочисленный поток \bar{H} отвечает магическому электронному заполнению.

4. Обоснование представления волновых функций основного состояния в виде (A.34),(A.40) основано на результатах оригинальной работы [349]. В уравнении Шредингера [93] орбитальный вклад, связанный со сдвигом оператора импульса электрона: $p \rightarrow p - \frac{e}{c}\vec{A}$, и спиновый вклад $\mu_e H \sigma / S$ ($S = 1/2$ - спин электронов) не являются независимыми. Электрон имеет магнитный момент $\mu_e = -\frac{|e|\hbar}{2Mc}$, а уравнение Шредингера есть нерелятивистский предел уравнения Дирака. Оба эффекта, спиновый и орбитальный, по своей сути эффекты релятивистские и их невозможно разделить. В уравнении

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (\text{A.44})$$

с гамильтонианом Паули [93, 351]

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}(\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 - \mu_e \frac{\sigma}{S} H. \quad (\text{A.45})$$

можно исключить "лишние" переменные: векторный потенциал \vec{A} и поле H , выбрав в качестве основной переменной потенциал поля $\phi(x, y)$. Для поперечного поля $H = H_z(x, y)$, [349],

$$A_x = -\frac{\partial}{\partial y}\phi(x, y); \quad A_y = \frac{\partial}{\partial x}\phi(x, y). \quad (\text{A.46})$$

Для одномерного поля $H = H(y)$, в калибровке Ландау ($A_x = -\phi'$; $A_y = 0$), подстановкой [93]

$$\psi(x, y) = e^{ipx}\psi_p(y). \quad (\text{A.47})$$

уравнение для $\psi_p(y)$ в (A.44),(A.45) приводится к виду

$$\psi_p'' + \frac{2M}{\hbar^2}(E + \mu_e \frac{\sigma}{S} H)\psi_p = (p - \frac{e}{c\hbar} A_x)^2 \psi_p \quad (\text{A.48})$$

Далее, если определить функцию χ выражением

$$\chi(y) = py - \frac{|e|}{\hbar c}\phi(y), \quad (\text{A.49})$$

то уравнение для ψ_p (17) не содержит явной зависимости от \vec{A} и H

$$\psi'' + \frac{2ME}{\hbar^2}\psi + \frac{\sigma}{S}\chi''\psi = (\chi')^2\psi \quad (\text{A.50})$$

В (19) естественно сделать подстановку

$$\psi_p(y) = \varphi(y)e^{\chi(y)} \quad (\text{A.51})$$

Функция $\varphi(y)$ определяется уравнением, содержащим только χ' и χ''

$$\varphi'' + 2\varphi'\chi' + \frac{2ME}{\hbar^2}\varphi + \varphi\chi'' \left(1 + \frac{\sigma}{S}\right) = 0 \quad (\text{A.52})$$

Следует отметить, что столь простые уравнения (A.50),(A.52), характерны только для гамильтониана Паули (A.45), где нет свободы в выборе мировых постоянных. Замена в Ур. (A.45) массы электрона M на эффективную массу M^* , а магнитного момента μ_e на μ_e^* , требует обоснования и не самоочевидно. Только для слабых полей H , когда движение электрона квазиклассично, имеет место (A.45) с перенормированными постоянными M и μ_e [5].

Два уравнения (A.50) для двух разных направлений спина: $\sigma = \pm 1/2$ не являются независимыми

$$\varphi''_{-1/2} + 2\varphi'_{-1/2}\chi' + \frac{2ME}{\hbar^2}\varphi_{-1/2} = 0 \quad (\text{A.53})$$

$$\varphi''_{1/2} + 2\varphi'_{1/2}\chi' + \frac{2ME}{\hbar^2}\varphi_{1/2} + 2\varphi_{1/2}\chi'' = 0 \quad (\text{A.54})$$

Из сравнения (A.53) и (A.54) видно, что если функция $\varphi_{-1/2}$ является решением (A.53) с энергией E , то функция $\varphi'_{-1/2} = \varphi_{1/2}$ есть решение (A.54) с той же энергией E . Согласно с общим утверждением работы [349], это означает, что в неоднородном поле $H(x, y)$ все уровни электрона, кроме основного, вырождены по спину также как и в случае однородного поля (A.32). Для основного же состояния $E = 0$; $\sigma = -1/2$ решение (A.53), удовлетворяющее правильным граничным условиям при $y \rightarrow \pm\infty$, сводится к константе, а из (A.49),(A.51) следует (A.34).

5. Для квазиоднородного поля $H(y)$ можно продвинуться дальше и решить уравнение (A.52) для φ , определив весь спектр электронов. Для медленного поля допустимо разложение функции χ' в (A.52) в ряд по степеням $y - y_0$, где точка y_0 определена условием

$$\chi'(y_0) = 0 \quad \text{или} \quad p = \frac{|e|\hbar}{\hbar}\phi'(y_0)$$

$$\chi'(y) = -\frac{z}{l_H(y_0)} \left(1 - z l'_H(y_0) + \dots\right) \quad (\text{A.55})$$

В (A.55) параметры z и $l_H(y_0)$ определены выражениями

$$z \equiv \frac{y - y_0}{l_H(y_0)} \quad l_H^2(y_0) \equiv \frac{\hbar c}{|e|H(y_0)} \quad (\text{A.56})$$

Пренебрегая в (A.55) производными поля $H(y)$: $l'_H(y_0) = 0$, из (A.52, A.55) приходим к уравнению для функции $\varphi = \varphi(z)$

$$\varphi'' - 2z\varphi' + 2\left(\frac{E}{\hbar\omega_c(y_0)} - \frac{1}{2} - \sigma\right)\varphi = 0 \quad (\text{A.57})$$

$$\omega_c(y_0) \equiv \frac{|e|H(y_0)}{Mc}$$

Решениями (А.57) являются полиномы Эрмита [93], а спектр электронов дается (А.32) с заменой $\omega_c \rightarrow \omega_c(y_0)$.

Для определения плотности $n(y)$ на основе (А.36) нет необходимости решать уравнение (А.55) для $y_0 = y_0(p)$. Для медленного поля нормированные функции основного состояния $\psi_p(y)$ имеют вид

$$\psi_p^2(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}l_H(y_0)} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{l_H^2(y_0)}}. \quad (\text{А.58})$$

Интегрирование по dp в (А.36) можно заменить интегрированием по dy_0 (А.55): $dp = dy_0/l_H^2(y_0)$, а медленную функцию $l_H(y_0)$ в (А.58) заменить на $l_H(y)$. При этом из (А.36), (А.58) следует связь $n(y)$ и $l_H^2(y)$

$$n(y) = \frac{1}{2\pi l_H^2(y)} = \frac{H(y)}{\phi_0}. \quad (\text{А.59})$$

6. Рассмотрим пример периодического поля

$$H(y) = H_0(1 + \lambda \cos k_0 y). \quad (\text{А.60})$$

В квазиоднородном пределе $k_0 l_0 \ll 1$, при $|\lambda| < 1$ в (А.60) из (А.55) следует уравнение для $y_0 = y_0(p)$

$$y_0 k_0 + \lambda \sin y_0 k_0 = p k_0 l_0^2 \quad l_0^2 \equiv \frac{\hbar c}{|e|H_0}. \quad (\text{А.61})$$

значение $\omega_c = \frac{|e|H_0}{Mc}(1 + \lambda \cos k_0 y_0)$ совместно с (А.61) определяет из (А.32) спектр электронов, а (А.58) нормированные функции $\psi_p(y)$. В другом пределе быстрого поля $k_0 l_0 \gg 1$ также можно отнормировать функции ψ_p и определить плотность $n(y)$.

$$\psi_p^2(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}l_0 I_0(2\gamma)} \exp\left[-\frac{(y - pl_0^2)^2}{l_0^2} + 2\gamma \cos k_0 y\right]. \quad (\text{А.62})$$

$$n(y) = \frac{H_0}{\phi_0 I_0(2\gamma)} e^{2\gamma \cos k_0 y}. \quad (\text{А.63})$$

В (А.62), (А.63) $I_0(2\gamma)$ - функция Бесселя

$$I_0(2\gamma) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\gamma^{2m}}{(m!)^2} \quad \gamma \equiv \frac{\lambda}{k_0^2 l_0^2}. \quad (\text{А.64})$$

Интересен предел $\gamma \gg 1$, когда в (А.60) осциллирующая часть поля больше его среднего значения: $\lambda \gg 1$. С учётом асимптотики функции $I_0(2\gamma)$ при $\gamma \gg 1$ из (А.63) получаем

$$n(y) = \frac{2H_0}{\phi_0} (\pi\gamma)^{1/2} e^{-4\gamma \sin^2(\frac{k_0 y}{2})}. \quad (\text{А.65})$$

Видно, что зависимость $n = n(y)$ отвечает узким δ -образным электронным нитям, расположенным с периодом $y = 2\pi/k_0$. Полное число электронов на периоде: $-\pi/k_0 < y < \pi/k_0$ при $\gamma \gg 1$ определяется узкой областью $k_0 y \ll 1$

$$n(y) = \frac{2H_0(\pi)^{1/2}}{\phi_0 k_0 l_1} e^{-y^2/l_1^2}. \quad (\text{A.66})$$

где l_1 магнитная длина поля $H_1 = \lambda H_0$ в (A.60): $l_1^2 = \frac{\hbar c}{|e|H_1}$. Из (A.66) имеем

$$\int_{-\pi/k_0}^{\pi/k_0} n(y) dy = \frac{2\pi}{k_0} \frac{H_0}{\phi_0}. \quad (\text{A.67})$$

Сравнение (A.59, A.67) показывает, что независимо от соотношения между k_0 и $1/l_0$ среднее значение плотности $n(y)$ определяется только величиной постоянного поля H_0 в (A.60). Осциллирующее же поле $\lambda H_0 = H_1$ определяет модуляцию плотности $n(y)$, которая может быть очень большой при $\lambda \rightarrow 1$ или $\gamma \gg 1$ (A.59),(A.65). Приведем полезные формулы для $n(y)$ и $\psi_p^2(y)$ при малом значении λ в (A.60)

$$\psi_p^2(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi} l_0} e^{-\frac{(y-pl_0^2)^2}{l_0^2}} \left(1 + \frac{2\lambda}{k_0^2 l_0^2} \cos k_0 y - \frac{2\lambda}{k_0^2 l_0^2} e^{-\frac{k_0^2 l_0^2}{4}} \cos(k_0 p l_0^2) \right). \quad (\text{A.68})$$

$$n(y) = \frac{H_0}{\phi_0} \left[1 + \frac{2\lambda \cos k_0 y}{k_0^2 l_0^2} \left(1 - e^{-\frac{k_0^2 l_0^2}{2}} \right) \right].$$

При $k_0 l_0 \ll 1$ (A.68) переходит в квазиоднородный предел, а при $k_0 l_0 \gg 1$ из (A.68) следует (A.62),(A.63).

7. В качестве примера поля, ограниченного на плоскости x, y , рассмотрим узкую одномерную магнитную яму.

$$H = H_0 \quad \text{при} \quad |y| < a; \quad H = 0 \quad \text{при} \quad |y| > a. \quad (\text{A.69})$$

Из (A.35) следует выражение для потенциала $\phi(y)$:

$$\phi = \frac{H_0 y^2}{2} \quad \text{при} \quad |y| < a; \quad \phi = H_0 a \left(|y| - \frac{a}{2} \right) \quad \text{при} \quad |y| > a. \quad (\text{A.70})$$

При $a \rightarrow 0$ из (A.69),(A.70) имеем

$$H = \bar{H} \delta(y); \quad \phi = |y| \bar{H} / 2; \quad \bar{H} = 2a H_0. \quad (\text{A.71})$$

а на основе (A.34) находим функции ψ_p

$$\psi_p^2(y) = \frac{p_0^2 - p^2}{p_0} e^{2py - 2|y|p_0} \quad p_0 \equiv \frac{a H_0 |e|}{c \hbar}. \quad (\text{A.72})$$

Нормированным функциям (А.72) отвечает интервал $|p| < p_0$. Далее, на основе (А.36), находим плотность $n(y)$

$$n(y) = \frac{e^{-2p_0|y|}}{2\pi y^2} \left(\operatorname{ch}(2p_0 y) - \frac{\operatorname{sh}(2p_0 y)}{2p_0 y} \right). \quad (\text{А.73})$$

Асимптотика $n(y)$ при больших y степенная: $n(y) \sim 1/y^2$, что не зависит от выбора H в виде δ -функции. В самом деле, рассмотрим другой пример магнитной ямы конечной ширины.

$$H(y) = \frac{\phi_0 p_0^2}{\pi} \frac{1}{\operatorname{ch}^2(2p_0 y)}; \quad \phi = \frac{\phi_0}{4\pi} \ln \operatorname{ch}(2p_0 y). \quad (\text{А.74})$$

Для $\psi_p^2(y)$ и $n(y)$ из (А.34),(А.36),(А.74) получаем

$$\psi_p^2(y) = \frac{2p_0}{\pi} \frac{e^{2py} \cos \frac{\pi p}{2p_0}}{\operatorname{ch}(2p_0 y)}; \quad n(y) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{y^2 + \left(\frac{\pi}{4p_0}\right)^2}. \quad (\text{А.75})$$

Также как и для δ -образной ямы область существования нормированных решений ограничена областью: $|p| < p_0$. Такие решения имеют место при сколь угодно слабом поле, когда $p_0 \rightarrow 0$. Проинтегрировав один раз уравнение (А.35), связывающее H с ϕ , находим связь граничного импульса p_0 с полным потоком поля на единицу длины магнитной ямы произвольной формы:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H(y) dy = \phi'(\infty) - \phi'(-\infty) = 2p_0 \frac{\hbar c}{|e|}. \quad (\text{А.76})$$

8. Специфика поля $H = H(\rho)$ проявляется в дискретности магнитного квантового числа m в (А.40),(А.41). Если при определении $n(\rho)$ на основе (А.41) можно заменить суммирование по m интегрированием, то нет большой разницы с рассмотренным выше случаем поля $H(y)$, для которого импульс p является непрерывной переменной. Рассмотрим сингулярные поля $H(\rho)$, для которых указанная дискретность m приводит к новым эффектам

$$H_\mu(\rho) = \frac{\mu^2 \phi_0}{4\pi \rho_0^\mu \rho^{2-\mu}} \quad \frac{|e|}{\hbar c} \phi(\rho) = \frac{1}{2} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\mu. \quad (\text{А.77})$$

Выражение (А.77) определяет магнитную длину ρ_0 в качестве масштаба. Параметр $\mu > 0$. Для однородного поля $\mu = 2$. На основе (А.40),(А.77) находим нормированные функции $R_m(\rho)$

$$R_m^2(\rho) = \frac{\mu X^{2m} \exp(-X^\mu)}{\rho_0^2 \Gamma\left(\frac{2m+2}{\mu}\right)} \quad X \equiv \frac{\rho}{\rho_0}. \quad (\text{А.78})$$

Для определения плотности $n(\rho)$ при $\rho = 0$ достаточно в (А.41) оставить один член с $m = 0$.

$$n(0) = \frac{\mu}{2\pi\rho_0^2\Gamma\left(\frac{2}{\mu}\right)}. \quad (\text{А.79})$$

Если же $\rho \gg \rho_0$ ($x \gg 1$), то сумму по m в (А.41) можно заменить интегралом, используя асимптотическое представление для гамма-функции при больших m в (А.78)

$$n(\rho) = \frac{\mu^2}{4\pi\rho_0^2} \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\mu-2} = \frac{H(\rho)}{\phi_0}. \quad (\text{А.80})$$

Связь плотности $n(\rho)$ поля $H(\rho)$ (А.80) имеет место при любом параметре $\mu > 0$ в (А.77) в пределе $\rho \gg \rho_0$ ($x \gg 1$). Интересно сравнить предельные значения для $n(\rho)$ (А.79), (А.80) с результатом точного суммирования по m в (А.41) для нескольких значений μ в (А.77). Для $\mu = 1$

$$n(\rho) = \frac{H(\rho)}{\phi_0} \left(1 - e^{-2X}\right); \quad H = \frac{\phi_0}{4\pi\rho\rho_0}. \quad (\text{А.81})$$

Для $\mu = 2/3$:

$$n(\rho) = \frac{H(\rho)}{\phi_0} \left[1 - 2e^{-3/2X^{2/3}} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}X^{2/3} - \frac{\pi}{3}\right)\right]; \quad H = \frac{\phi_0}{9\pi\rho_0^{2/3}\rho^{4/3}}.$$

Для $\mu = 1/2$:

$$n(\rho) = \frac{H(\rho)}{\phi_0} \left(1 - e^{-2X^{1/2}} - 2e^{-X^{1/2}} \sin X^{1/2}\right); \quad H = \frac{\phi_0}{16\pi\rho^{3/2}\rho_0^{1/2}}.$$

Выражения (А.77), (А.81) дают точное решение задач о связи плотности $n(\rho)$ и поля $H(\rho)$ для сингулярных полей (А.77).

9. Еще одним примером проявлений дискретности суммирования по m в (А.41) служит поле магнитного кольца

$$H(\rho) = \frac{\phi_0 q^2 Z^{q-1}}{\pi\rho_0^2(1+Z^q)^2}; \quad Z \equiv \frac{\rho^2}{\rho_0^2}. \quad (\text{А.82})$$

При большом параметре q (А.82) поле $H(\rho)$ имеет δ -образный максимум при $\rho = \rho_0$. Полный поток поля (А.82) пропорционален q

$$\bar{H} = \phi_0 q, \quad q = n + \varepsilon. \quad (\text{А.83})$$

Из q в (А.83) выделена целая часть n , а параметр $\varepsilon \in [0; 1)$. На основе (А.40), (А.41), (А.82) находим потенциал поля ϕ , функции $R_m(\rho)$ и плотность $n(\rho)$

$$\frac{2\pi\phi}{\phi_0} = \frac{1}{2} \ln(1 + Z^q)$$

$$R_m^2(\rho) = \frac{2qZ^m \sin\left[\frac{\pi}{q}(1+m)\right]}{\rho_0^2 \pi (1+Z^q)} \quad (\text{A.84})$$

$$n(\rho) = \frac{q}{\pi^2 \rho_0^2} \frac{\sin \frac{\pi}{q} + Z^n \left[\sin \frac{\pi}{q} (1 - \varepsilon) + Z \sin \frac{\pi \varepsilon}{q} \right]}{\left[\left(\cos \frac{\pi}{q} - Z \right)^2 + \sin^2 \frac{\pi}{q} \right] (1 + Z^q)}. \quad (\text{A.85})$$

Если параметр q в (A.82) велик ($q \gg \pi$), из (A.85) следует короткая формула для $n(\rho)$

$$n(\rho) = \frac{1}{\pi \rho_0^2} \frac{1 + Z^n (1 - \varepsilon) + \varepsilon Z^{n+1}}{\left[(1 - Z)^2 + \pi^2 / q^2 \right] (1 + Z^q)}. \quad (\text{A.86})$$

При целом значении $q = n$, когда $\varepsilon = 0$ в (A.83), плотность $n(\rho)$ имеет δ -образный максимум при $Z = 1$, т.е. при $\rho = \rho_0$

$$n(\rho) = \frac{1}{\pi \rho_0^2} \frac{1}{\left(1 - \rho^2 / \rho_0^2 \right)^2 + \pi^2 / q^2}. \quad (\text{A.87})$$

Формулы (A.82), (A.87) представляют точное решение задачи о связи плотности и поля для магнитного кольца.

A.4 Вывод Ур. 1.51 для межслоевой проводимости

В этом приложении приведем более подробный вывод Ур. (1.51). Подставляя Ур. (1.48) и выражение для скорости v_z из Ур. (1.47) в Ур. (1.50), мы получаем

$$\begin{aligned} \sigma_n &= \frac{e^2 \hbar g_{LL}}{2\pi} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} \frac{dk_z}{2\pi} v_z^2(k_z) [2\text{Im}G_R(n, k_z, \varepsilon)]^2 \\ &= \frac{e^2 g_{LL}}{\pi^2 \hbar} \int dk_z \left(\frac{2t_z d \sin(k_z d) \text{Im}\Sigma^R}{[\varepsilon - \varepsilon_{2D}(n) - 2t_z \cos(k_z d) - \text{Re}\Sigma^R]^2 + [\text{Im}\Sigma^R]^2} \right)^2 \end{aligned}$$

Вводя обозначения

$$a \equiv \frac{\varepsilon - \varepsilon_{2D}(n) - \text{Re}\Sigma^R}{2t_z} \equiv \frac{\Delta\varepsilon}{2t_z}; \quad b \equiv \frac{\text{Im}\Sigma^R}{2t_z}; \quad x \equiv \cos(k_z d)$$

и учитывая, что интеграл по dk_z в интервале $(-\pi/d, \pi/d)$ содержит удвоенный интеграл по dx в интервале $(-1, 1)$, получаем Ур. (1.51):

$$\begin{aligned} \sigma_n &= \frac{2e^2 g_{LL} d}{\pi^2 \hbar} \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} dx \left[\frac{b}{(a-x)^2 + b^2} \right]^2 = \frac{e^2 g_{LL} d}{\pi \hbar b} \text{Re} \left(\frac{1 - a^2 + iab}{\sqrt{1 - (a - ib)^2}} \right) \\ &= \frac{\sigma_0 \hbar \omega_c \Gamma_0}{2\pi t_z^2 \text{Im}\Sigma^R} \text{Re} \frac{4t_z^2 - (\Delta\varepsilon)^2 + i \Delta\varepsilon |\text{Im}\Sigma_n^R(\varepsilon)|}{\sqrt{4t_z^2 - (\Delta\varepsilon - i |\text{Im}\Sigma_n^R(\varepsilon)|)^2}}. \end{aligned}$$

Б Приложения к главе 2

Б.1 Влиянии осцилляций химического потенциала на эффект де Гааза - ван Альфена в сильно-анизотропных квазидвумерных металлах

Условие того, что сохраняется концентрация электронов N , записывается в виде:

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega(\mu, B, T)}{\partial \mu} \right)_{T, B} = \int_0^\infty \frac{\rho(E, B)}{1 + \exp\left(\frac{E-\mu}{T}\right)} dE = const$$

Это есть уравнение на химический потенциал μ как функцию магнитного поля B . Выделяя осциллирующую часть и подставляя

$$N = \int_0^\infty \frac{\rho_0(E, B)}{1 + \exp\left(\frac{E-\varepsilon_F}{T}\right)} dE$$

(ε_F есть энергия Ферми при нулевом магнитном поле) получаем

$$\int_0^\infty \left(\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E-\varepsilon_F}{T}\right)} - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E-\mu}{T}\right)} \right) \rho_0(E, B) dE = \int_0^\infty \frac{\tilde{\rho}(E, B)}{1 + \exp\left(\frac{E-\mu}{T}\right)} dE \quad (\text{Б.1})$$

Кроме квази-двумерных (цилиндрических) участков поверхности Ферми, в металле могут существовать также другие, например, квази-одномерные участки ПФ, которые дают постоянный (не осциллирующий) вклад в плотность электронных состояний на уровне Ферми, поскольку спектр таких состояний не описывается уровнями Ландау. Такие состояния играют роль электронного резервуара, подавляющего амплитуду квантовых осцилляций химического потенциала μ . Отношение $n_R(E)$ плотность состояний такого резервуара к исходной (без магнитного поля) плотности квазидвумерных $\nu_{2D} = 2g_{LL}/\hbar\omega_c$ состояний меняется на масштабах энергии Ферми, что много больше температуры T или $|\mu - \varepsilon_F| < \hbar\omega_c/2$ (мы рассматриваем случай когда заполнено много уровней Ландау). Поэтому $n_R(E) \approx n_R(\varepsilon_F) = const \equiv n_R$. Левая часть уравнения (Б.1) теперь упрощается и после подстановки (2.7) мы получаем уравнение на осциллирующую часть $\tilde{\mu}(B)$ химического потенциала:

$$\tilde{\mu}(B) \equiv \mu(B) - \varepsilon_F = \frac{\hbar\omega_c}{\pi(1 + n_R(\varepsilon_F))} \times \quad (\text{Б.2})$$

$$\times \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} \sin\left(\frac{2\pi l(\varepsilon_F + \tilde{\mu}(B))}{\hbar\omega_c}\right) \cos\left(2\pi l \frac{\mu_e H}{\hbar\omega_c}\right) J_0\left(\pi l \frac{W}{\hbar\omega_c}\right) R_D(l) R_T(l)$$

Это нелинейное уравнение на $\tilde{\mu}(B)$ не может быть решено аналитически без каких-либо приближений. Оно определяет положение химического потенциала как функцию магнитного поля при произвольных параметрах (предполагается только, что $\epsilon_F \gg T, \hbar\omega_c$). В пределе слабых осцилляций химического потенциала, $\tilde{\mu}(B) \ll \hbar\omega_c$, в правой части Ур. (Б.2), то есть во второй его строчке, можно положить $\tilde{\mu}(B) = 0$.

Намагниченность при постоянной электронной плотности $N = const$ определяется выражением

$$M = -\frac{d(\Omega + N\mu)}{dB} \Big|_{N=const} = -\frac{\partial\Omega}{\partial B} \Big|_{\mu, N=const} - \left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} \Big|_{N, B=const} + N \right) \frac{d\mu}{dB} \Big|_{N=const} = -\frac{\partial\Omega}{\partial B} \Big|_{\mu, N=const}$$

В результате получаем осциллирующую часть намагниченности, совпадающую с формулой (2.11), где химический потенциал $\mu = \mu(B)$ определяется из уравнения (Б.2) и содержит зависимость намагниченности от плотности электронного резервуара. Формулы (Б.2) и (2.11) описывают осцилляции намагниченности при произвольных параметрах. Они могут быть использованы для несложного численного расчета эффекта дГВА. Единственное приближение, сделанное в этих формулах, есть закон Дингла. Этот закон был получен только для примесного рассеяния в трехмерных металлах (когда $t_z \gg T_D, \hbar\omega_c$). Он определяет гармонический состав осцилляций плотности состояний. Если известна форма уровней Ландау в данной системе, то фактор Дингла можно заменить любой другой функцией, лучше описывающей процессы рассеяния электронов в данной системе.

Заметим, что из формул (Б.2) и (2.11) следует, что в пределе $t_z/\mu \ll 1$ осциллирующие части намагниченности и химического потенциала связаны простым соотношением

$$\tilde{M}(B) = \frac{\epsilon_F}{B} \frac{2g}{\hbar\omega_c} (1 + n_R) \tilde{\mu}(B)$$

В работах [130] и [131] это соотношение было получено при нулевом ворпинге, когда осцилляции хим. потенциала особенно сильные.

Нелинейное уравнение (Б.2) на $\tilde{\mu}(B)$ может быть аналитически разрешено только в некоторых приближениях. Мы проделаем это для иллюстрации влияния осцилляций химического потенциала на зависимость амплитуд различных гармоник намагниченности от температуры, температуры Дингла и плотности электронного резервуара. Для начала мы рассмотрим чисто двумерный случай при нулевой температуре, когда осцилляции химического потенциала могут быть сильными и существенно влияющими на эффект дГВА. Также, для простоты, будем считать, что разные компоненты спина вносят вклад

независимо и могут быть исследованы по отдельности, что приближенно выполнено когда отсутствует рассеяние с переворотом спина. Тогда сумма в правой части уравнения (Б.2) может быть вычислена, и мы получаем уравнение

$$\frac{x}{2} = \frac{1}{(1 + n_R)} \arctan \left(\frac{\sin(y + x)}{\cos(y + x) + e^b} \right) \quad (\text{Б.3})$$

где $x \equiv 2\pi\tilde{\mu}(B)/\hbar\omega_c$, $y \equiv 2\pi\varepsilon_F/\hbar\omega_c$ и $b \equiv 2\pi\Gamma/\hbar\omega_c$. При очень большом электронном резервуаре $n_R = \infty$, $x = 0$, и мы имеем предел фиксированного химического потенциала. Намагниченность в этом пределе дается формулой [129]

$$\tilde{M}(B) = \frac{2g\varepsilon_F}{\pi B} \arctan \left(\frac{\sin(y)}{e^b + \cos(y)} \right). \quad (\text{Б.4})$$

Температурная зависимость амплитуд гармоник дается формулой Л-К в Ур. (2.3).

Уравнение (Б.3) можно решить аналитически также при $n_R = 0$ и $n_R = 1$. В отсутствие электронного резервуара $n_R = 0$ решение этого уравнения имеет вид

$$\frac{x}{2} = \pi \frac{\tilde{\mu}(B)}{\hbar\omega_c} = \arctan \left(\frac{\sin(y)}{e^b - \cos(y)} \right)$$

Оно определяет осцилляции химического потенциала. Намагниченность при этом дается выражением

$$\tilde{M}(B) = \frac{2g\varepsilon_F}{\pi B} \arctan \left(\frac{\sin(y)}{e^b - \cos(y)} \right) \quad (\text{Б.5})$$

Оно совпадает с (Б.4) после сдвига фазы $y \rightarrow y + \pi$ и изменения знака $\tilde{M} \rightarrow -\tilde{M}$. Это означает, что закон затухания гармоник

$$A_l \sim (1/l) \cdot \exp(-l \cdot b) \quad (\text{Б.6})$$

не изменился, а только знак всех четных гармоник поменялся на противоположный. Эта симметрия между пределами фиксированного химического потенциала $\mu = \text{const}$ и постоянного числа частиц $N = \text{const}$ может нарушаться, если закон затухания гармоник будет не экспоненциальным. Конечная температура или плотность электронного резервуара также нарушают эту симметрию.

Рассмотрим теперь промежуточный случай $n_R = 1$. Уравнение (Б.3) принимает вид

$$\frac{\sin x}{\cos x} = \frac{\sin(y + x)}{\cos(y + x) + e^b}$$

Его решением является

$$x = \arcsin(e^{-b} \sin y),$$

а намагниченность принимает вид

$$\tilde{M}(y) = \frac{g \varepsilon_F}{\pi B} \arcsin(e^{-b} \sin y) \quad (\text{Б.7})$$

Чтобы ответить на вопрос как изменился закон затухания гармоник, надо вычислить амплитуды этих гармоник. Амплитуда первой гармоники имеет вид

$$A_1(b) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \arcsin(e^{-b} \sin y) \sin y dy$$

После интегрирования по частям имеем

$$A_1(b) = \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{\cos^2 y e^{-b} dy}{\sqrt{1 - e^{-2b} \sin^2 y}}$$

Это есть суперпозиция двух эллиптических интегралов:

$$A_1(b) = \frac{4}{\pi} [e^b E(e^{-b}) - 2 \operatorname{sh} b K(e^{-b})] \quad (\text{Б.8})$$

При $b \gg 1$ отклонения $A_1(b)$ от формулы (Б.6) малы:

$$A_1(b) = e^{-b} + e^{-3b}/8 + ..$$

В противоположном пределе $b \ll 1$ получаем

$$A_1(b) = \frac{4}{\pi} \left\{ 1 - b \left(\ln \frac{4}{\sqrt{2b}} - \frac{1}{2} \right) + O(b^2) \right\} \quad (\text{Б.9})$$

что существенно отличается от формулы (Б.6) при фиксированном химическом потенциале $A_1(b) = \exp(-b) \approx 1 - b$. Например, значение $A_1(0)$ в $4/\pi$ раз больше чем в формуле (Б.6).

Амплитуды следующих гармоник проявляют намного более сильные отклонения от формулы (Б.6). Все четные гармоники исчезают совсем поскольку выражение (Б.7) обладает симметрией $\tilde{M}(\pi - y) = \tilde{M}(y)$ и $\tilde{M}(-y) = \tilde{M}(y)$.

Амплитуда третьей гармоники также вычисляется аналогично первой. При $b \gg 1$, $e^{-b} \ll 1$,

$$A_3(b) = -e^{-3b}/12 + O(e^{-5b})$$

Это сильно отличается от случаев $n_R = 0$ или $n_R = \infty$ где мы имели $A_3(b) = e^{-3b}/3$. Это неудивительно, поскольку в симметричном случае $n_R = 1$ осцилляции намного более гладкие и синусоидальные. Следовательно, высшие гармоники должны быть слабее по амплитуде. При $b = 0$

$$A_3(0) = \frac{4}{3\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{\cos 3y \cos y dy}{\cos y} = -\frac{4}{9\pi} \quad (\text{Б.10})$$

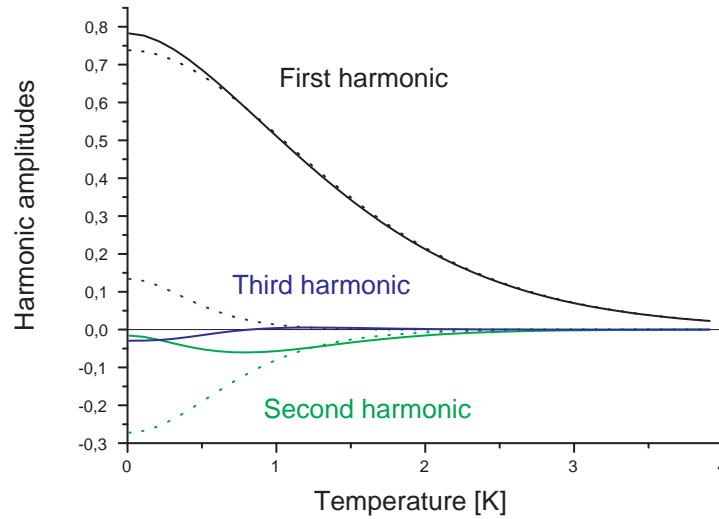


Рисунок 5.10: Температурная зависимость амплитуд первых трех гармоник осцилляций намагниченности. Сплошные линии есть результат численного расчета по формулам (Б.2) и (2.11) при $n_R = 1$, $m^* = 2m_0$, $T_D = 0.2K$ и $W = 1K$ (см. текст) Пунктирные линии есть предсказание формулы Л-К при тех же параметрах. Видны слабое отличие для первой гармоники и очень сильные отличия для второй и третьей гармоник.

что в ~ 2.35 раз меньше чем при фиксированном химическом потенциале $A_3(0) = 1/3$ и имеет другой знак.

Таким образом, в симметричном случае $n_R = 1$ амплитуда первой гармоники несколько увеличивается по сравнению со случаями нулевого или бесконечного резервуара, в то время как амплитуды других гармоник сильно уменьшаются. Эти отличия уменьшаются по мере увеличения t_z . Данный анализ также показывает, что отношения амплитуд разных гармоник могут дать количественную оценку плотности электронного резервуара в почти двумерном пределе. Это может быть важно, например, для определения зонной структуры органических металлов.

Чтобы получить правильную температурную зависимость амплитуд гармоник и рассмотреть произвольные t_z и плотность электронного резервуара, можно провести численный расчет намагниченности по формулам (Б.2) и (2.11). Это может быть сделано при любых параметрах, имеющихся в эксперименте. Результат такого численного расчета для температурной зависимости первых трех гармоник представлен на Рис. 5.10 при следующих параметрах, близких к реальным экспериментам на α -(BEDT –

$TTF)_2KHg(SCN)_4$: плотность электронного резервуара $n_R = 1$, частота осцилляций дГВА $F = 700T$, эффективная электронная масса $m^* = 2m_0$, температура Дингла $T_D = \Gamma_0/\pi = 0.2K$ и ширина зоны $W \equiv 4t_z = 1K$. Видны сильные отклонения от обычной формулы Л-К, которая представлена на рисунке пунктирными линиями. Полученное значение амплитуды первой гармоники при $T \rightarrow 0$ приблизительно в 1.1 раза больше, чем предсказание формулы Л-К. Если также положить $T_D \rightarrow 0$ и $t_z \rightarrow 0$, этот коэффициент становится $4/\pi = 1.27$ в согласии с аналитическим результатом (Б.9). Амплитуда второй гармоники близка к нулю при $T = 0$. Амплитуда третьей гармоники меняет знак при $T \approx 0.8K$ и очень сильно отклоняется от формулы Л-К. При $T = 0$ и $t_z = 0$ ее значение также совпадает с аналитическим результатом (Б.10).

Таким образом, в данном разделе было показано аналитически и численно, что осцилляции химического потенциала существенно сказываются на температурной зависимости амплитуд различных гармоник осцилляций намагниченности в квазидвумерных соединениях. Поэтому надежное определение эффективной массы электрона по эффекту дГВА должно принимать их во внимание. Это можно сделать простым численным расчетом по формулам (Б.2) и (2.11). Через осцилляции химического потенциала намагниченность зависит от плотности электронного резервуара. Этот факт может быть использован для количественной оценки плотности электронных состояний на открытых листах поверхности Ферми в органических металлах.

Б.2 Преобразование суммы по уровням Ландау в сумму по гармоникам

Чтобы преобразовать сумму по УЛ в сумму по гармоникам, мы применим формулу суммирования Пуассона [155]

$$\sum_{n=n_0}^{\infty} f(n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_a^{\infty} e^{2\pi i k n} f(n) dn \quad (\text{Б.11})$$

где $a \in (n_0 - 1; n_0)$. Эта формула верна для произвольной функции $f(n)$. Скорость электронов определяется из закона дисперсии электронов в Ур. (2.16) как

$$\begin{aligned} v_z(\epsilon, n) &\equiv \frac{\partial \epsilon(n, k_z)}{\hbar \partial k_z} = -\frac{2td}{\hbar} \sin(k_z d) = \\ &= \frac{d}{\hbar} \sqrt{4t^2 - (\epsilon - \hbar \omega_c (n + 1/2))^2}. \end{aligned} \quad (\text{Б.12})$$

Сумма в Ур. (2.19) преобразуется в

$$\begin{aligned}
\sum_n |v_z(\epsilon, n)| &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{\hbar} \sqrt{4t^2 - \left(\epsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right)^2} = \\
&= \frac{d}{\hbar} \hbar\omega_c \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dn e^{2\pi i k (n - \frac{1}{2})} \sqrt{\left(\frac{2t}{\hbar\omega_c} \right)^2 - \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} - n \right)^2} \\
&= \frac{d}{\hbar} \hbar\omega_c \sum_{k=-\infty}^{\infty} (-1)^k \exp\left(\frac{2\pi i k \epsilon}{\hbar\omega_c} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{2\pi i k x} \sqrt{\left(\frac{2t}{\hbar\omega_c} \right)^2 - x^2} \\
&= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\hbar} \frac{(-1)^k}{k} \exp\left(\frac{2\pi i k \epsilon}{\hbar\omega_c} \right) J_1\left(\frac{4\pi k t}{\hbar\omega_c} \right) \tag{Б.13}
\end{aligned}$$

В этой формуле для раскрытия неопределенности $0/0$ для нулевой гармоники $k = 0$ следует использовать разложение $J_1(kx)/k = x/2$.

Б.3 Отсутствие медленных осцилляций в намагниченности

Первая гармоника осциллирующей части намагниченности дается формулой (см. Ур. (2.11) или Ур. (6) в работе [145])

$$\tilde{M}(B) = \frac{2N_{LL}\epsilon_F}{\pi B} \sin\left(\frac{2\pi(\epsilon_F + \tilde{\mu}(B))}{\hbar\omega_c} \right) J_0\left(\frac{4\pi t}{\hbar\omega_c} \right) R_T R_S R_D(\epsilon_F), \tag{Б.14}$$

где первая гармоника осциллирующей части химического потенциала (см. Ур. (Б.2) или Ур. (5) в работе [145])

$$\tilde{\mu}(B) = \frac{\hbar\omega_c}{\pi(1 + n_R(\epsilon_F))} \times \sin\left(\frac{2\pi(\epsilon_F + \tilde{\mu}(B))}{\hbar\omega_c} \right) J_0\left(\frac{4\pi t}{\hbar\omega_c} \right) R_T R_S R_D. \tag{Б.15}$$

Произведение осцилляций намагниченности в Ур. (Б.14) и осциллирующего множителя Дингла (2.23) не приводит к медленным осцилляциям в силу Ур. (2.31), а также поскольку произведения вида

$$\begin{aligned}
&\propto \sin\left(\frac{2\pi\epsilon_F}{\hbar\omega_c} \right) J_0\left(\frac{4\pi t}{\hbar\omega_c} \right) \times \cos\left(\frac{2\pi\epsilon_F}{\hbar\omega_c} \right) J_0\left(\frac{4\pi t}{\hbar\omega_c} \right) \\
&= \frac{1}{2} \sin\left(\frac{4\pi\epsilon_F}{\hbar\omega_c} \right) J_0^2\left(\frac{4\pi t}{\hbar\omega_c} \right)
\end{aligned}$$

дают вклад во вторую гармонику но не в медленные осцилляции.

Перемешивание осцилляций намагниченности и химического потенциала в Ур. (Б.14) и (Б.2) дают член

$$\propto \sin\left(\frac{2\pi(\epsilon_F + \tilde{\mu}(B))}{\hbar\omega_c} \right) - \sin\left(\frac{2\pi\epsilon_F}{\hbar\omega_c} \right)$$

$$= \sin\left(\frac{2\pi\varepsilon_F}{\hbar\omega_c}\right) \left[\cos\left(\frac{2\pi\tilde{\mu}(B)}{\hbar\omega_c}\right) - 1 \right] + \cos\left(\frac{2\pi\varepsilon_F}{\hbar\omega_c}\right) \sin\left(\frac{2\pi\varepsilon_F}{\hbar\omega_c}\right) J_0\left(\frac{4\pi t}{\hbar\omega_c}\right) \frac{2R_T R_D}{1+n_R},$$

который также приводит ко второй гармонике, но не к медленным осцилляциям.

В Приложения к главе 3

В.1 Соотношение между разложениями по гармоникам геометрии поверхности Ферми и закона дисперсии

Импульс Ферми удовлетворяет уравнению

$$\varepsilon [k_F(\phi, k_z), \phi, k_z] = E_F, \quad (\text{B.1})$$

где $E_F = \varepsilon(k_F)$ – энергия Ферми. Коэффициенты $\epsilon_{\mu\nu}$ в Ур. (3.1) связаны с коэффициентами $k_{\mu\nu}$ в параметризации ПФ в Ур. (3.3) уравнением

$$\sum_{\nu \geq 0, \mu = \text{even}} \epsilon_{\mu\nu} [k_F(\phi, k_z)] \cos(\nu k_z c^*) \cos(\mu\phi + \phi_{\mu\nu}) = E_F. \quad (\text{B.2})$$

Это нелинейное уравнение на $k_{\mu\nu}$ может быть решено методом итераций, предполагающим коэффициенты гофрировки $\epsilon_{\mu\nu}/\epsilon_{00}$ малыми и быстро спадающими с увеличением μ и ν . В первом порядке по этим коэффициентам, каждый член $k_{\mu\nu}$ в ряде (3.3) происходит только из-за члена $\epsilon_{\mu\nu}$ в Ур. (3.1) с теми же самыми индексами μ, ν :

$$k_{\mu\nu}^{(1)} = -\epsilon_{\mu\nu}(k_F) / \epsilon'_{00}(k_F). \quad (\text{B.3})$$

Во втором порядке по $\epsilon_{\mu\nu}$, коэффициенты $k_{\mu\nu}$ происходят также от бесконечного числа комбинаций членов $\epsilon_{\mu'\nu'}$ и $\epsilon_{\mu''\nu''}$ в законе дисперсии (3.1), таких что $\mu = \mu' \pm \mu''$ и $\nu = \nu' \pm \nu''$.

Возьмем закон дисперсии в Ур. (3.4) и предположим, что зависимость энергии от k_z слабая, то есть что межслоевой интеграл перескока $t_c \ll E_F$. Решение уравнения

$$\varepsilon(k, \phi) = E_F + 2t_c \cos(k_z c^*),$$

в первом порядке по $t_c = t_c(\phi)$ дает следующую форму ПФ :

$$k_F(\phi, k_z) = k_0(\phi) + k_1(\phi) \cos(k_z c^*), \quad (\text{B.4})$$

где $k_0(\phi)$ удовлетворяет уравнению

$$\varepsilon[k_0(\phi), \phi] = E_F \quad (\text{B.5})$$

и

$$k_1(\phi) = 2t_c(\phi) / [\partial \varepsilon(k, \phi) / \partial k] |_{k=k_0(\phi)}. \quad (\text{B.6})$$

Частная производная $(\partial\varepsilon/\partial k)|_{k=k_0(\phi)}$ есть проекция скорости Ферми в какой-то точке ПФ на линию, соединяющую эту точку на ПФ и начало координат $\mathbf{k} = 0$ в плоскости x, y . Она зависит от закона дисперсии и от азимутального угла ϕ .

Для достаточно общего вида закона дисперсии:

$$\varepsilon(k, \phi) = k^\alpha g(\phi), \quad (\text{B.7})$$

где $g(\phi)$ произвольная функция и α – произвольное число, производная

$$[\partial\varepsilon(k, \phi)/\partial k]|_{k=k_0(\phi)} = E_F/k_0(\phi). \quad (\text{B.8})$$

”Суперэллиптический” закон дисперсии, описываемый уравнением

$$\varepsilon(k_x, k_y) = (k_x/k_1)^\alpha + (k_y/k_2)^\alpha, \quad (\text{B.9})$$

и включающий линейную и квадратичную дисперсии, есть лишь частный случай дисперсии в Ур. (B.7). Учитывая соотношение (B.8), Ур. (B.4) упрощается:

$$k_F(\phi, k_z) = k_0(\phi) \left[1 + \frac{2t_c(\phi)}{E_F} \cos(k_z c^*) \right]. \quad (\text{B.10})$$

Список публикаций

1. P.D. Grigoriev, "Weakly incoherent regime of interlayer conductivity in magnetic field", Phys. Rev. B **83**, 245129 (2011).
2. P.D. Grigoriev, "Monotonic growth of interlayer magnetoresistance in strong magnetic field in very anisotropic layered metals", Письма в ЖЭТФ **94**, 48 (2011) [JETP Lett. **94**, 47 (2011)].
3. A.D. Grigoriev and P.D. Grigoriev, "Crossover from the weak to strong-field behavior of the longitudinal interlayer magnetoresistance in quasi-two-dimensional conductors", Физика низких температур **40** (4), 472 (2014) [Low Temp. Phys., **40**(4), 367 (2014)];
4. P.D. Grigoriev, "Longitudinal interlayer magnetoresistance in quasi-two-dimensional metals", Phys. Rev. B **88**, 054415 (2013).
5. P.D. Grigoriev, M.V. Kartsovnik, W. Biberacher, "Magnetic-field-induced dimensional crossover in the organic metal α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄", Phys. Rev. B **86**, 165125 (2012).
6. А.М. Дюгаев, П.Д. Григорьев, Ю.Н. Овчинников, "Снятие вырождения уровней Ландау двумерных электронов точечными примесями", Письма в ЖЭТФ, **78**, 180 (2003) [JETP Lett. **78**, 148 (2003)].
7. А.М. Dyugaev and P.D. Grigoriev, "The Ground State of Two-Dimensional Electrons in a Nonuniform Magnetic Field", ЖЭТФ, **129**, 79-85 (2006) [JETP **102**, 69 (2006)].
8. P.D. Grigoriev, "Theory of the Shubnikov-de Haas effect in quasi-two-dimensional metals", Phys. Rev. B **67**, 144401 (2003).
9. P.D. Grigoriev, M.V. Kartsovnik, W. Biberacher, N.D. Kushch, P. Wyder, "Anomalous beating phase of the oscillating interlayer magnetoresistance in layered metals", Phys. Rev. B **65**, 60403(R) (2002).
10. M.V. Kartsovnik, P.D. Grigoriev, W. Biberacher, N.D. Kushch, P. Wyder, "Slow oscillations of magnetoresistance in quasi-two-dimensional metals", Phys. Rev. Lett. **89**, 126802 (2002).

11. P.D. Grigoriev, "The influence of the chemical potential oscillations on the de Haas - van Alphen effect in quasi-two-dimensional compounds", *ЖЭТФ*, **119**(6), 1257 (2001) [*JETP*, **92**(6), 1090 (2001)].
12. P.D. Grigoriev, "Angular dependence of the Fermi surface cross-section area and magnetoresistance in quasi-two-dimensional metals", *Phys. Rev. B* **81**, 205122 (2010).
13. M. V. Kartsovnik, P. D. Grigoriev, W. Biberacher, and N. D. Kushch, "Magnetic field induced coherence-incoherence crossover in the interlayer conductivity of a layered organic metal", *Phys. Rev. B* **79**, 165120 (2009).
14. P.D. Grigoriev and D.S. Lyubshin, "Phase diagram and structure of the charge-density-wave state in a high magnetic field in quasi-one-dimensional materials: A mean-field approach", *Phys. Rev. B* **72**, 195106 (2005).
15. L.P. Gor'kov, P.D. Grigoriev, "Soliton phase near antiferromagnetic quantum critical point in Q1D conductors", *Europhysics Letters* **71**, 425 (2005).
16. A.A. Sinchenko, P.D. Grigoriev, P. Lejay, P. Monceau, "Spontaneous Breaking of Isotropy Observed in the Electronic Transport of Rare-Earth Tritellurides", *Phys. Rev. Lett.* **112**, 036601 (2014).
17. P.D. Grigoriev, S.S. Kostenko, "Conductivity anisotropy helps to reveal the microscopic structure of a density wave at imperfect nesting", *Physica B* **460**, 26 (2015); doi:10.1016/j.physb.2014.11.033.
18. L.P. Gor'kov, P.D. Grigoriev, "Antiferromagnetism and hot spots in CeIn₃", *Phys. Rev. B* **73**, 060401(R) (2006).
19. M.V. Kartsovnik, V.N. Zverev, D.Andres, W.Biberacher, T.Helm, P.D. Grigoriev, R.Ramazashvili, N.D. Kushch, H.Muller, "Magnetic quantum oscillations in the charge-density-wave state of the organic metals α (BEDT-TTF)₂MHg(SCN)₄ with M = K and Tl", *Физика низких температур* **40**(4), 484 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**(4), 377 (2014)].
20. L.P. Gor'kov, P.D. Grigoriev, "Nature of superconducting state in the new phase in (TMTSF)₂PF₆ under pressure", *Phys. Rev. B* **75**, 020507 (2007).
21. P.D. Grigoriev, "Properties of superconductivity on the density wave background with small ungapped Fermi surface pockets", *Phys. Rev. B* **77**, 224508 (2008).

22. P.D. Grigoriev, "Superconductivity on the density wave background with soliton-wall structure", *Physica B* **404**(3-4), 513 (2009); doi:10.1016/j.physb.2008.11.056.

Литература

- [1] А.А. Abrikosov, *Fundamentals of the theory of metals*, North-Holland, 1988.
- [2] Лифшиц И.М., Азбель М.Я., Каганов М.И., "Электронная теория металлов", М. Наука 1973.
- [3] J.M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge Univ. Press 1972. (Перевод книги: Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, 2-е издание, М.: Мир, 1974).
- [4] Shoenberg D. "Magnetic oscillations in metals", Cambridge University Press 1984.
- [5] Andrea Damascelli, Zahid Hussain, and Zhi-Xun Shen, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003) [arXiv:cond-mat/0208504]; A. A. Kordyuk, *Low Temp. Phys.* **40**, 286 (2014) [arXiv:1406.2948].
- [6] M. V. Kartsovnik, *Chem. Rev.* **104**, 5737 (2004).
- [7] M. V. Kartsovnik and V. G. Peschansky, *Low Temp. Phys.* **31**, 185 (2005) [*Fiz. Nizk. Temp.* **31**, 249 (2005)].
- [8] J. Wosnitzer, *Fermi Surfaces of Low-Dimensional Organic Metals and Superconductors* (Springer-Verlag, Berlin, 1996);
- [9] M.V. Kartsovnik and V.N. Laukhin, *J. Phys. I France* **6**, 1753 (1996);
- [10] T. Ishiguro, K. Yamaji and G. Saito, *Organic Superconductors*, 2nd Edition, Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- [11] J. Singleton, *Rep. Prog. Phys.* **63**, 1111 (2000).
- [12] J. S. Brooks, V. Williams, E. Choi, D. Graf, M. Tokumoto, S. Uji, F. Zuo, J. Wosnitzer, J. A. Schlueter, H. Davis, R. W. Winter, G. L. Gard and K. Storr, *New Journal of Physics* **8**, 255 (2006).
- [13] "The Physics of Organic Superconductors and Conductors", ed. by A. G. Lebed (Springer Series in Materials Science, V. 110; Springer Verlag Berlin Heidelberg 2008).
- [14] N. E. Hussey, M. Abdel-Jawad, A. Carrington, A. P. Mackenzie and L. Balicas, *Nature* **425**, 814 (2003).

- [15] M. Abdel-Jawad, M. P. Kennett, L. Balicas, A. Carrington, A. P. Mackenzie, R. H. McKenzie & N. E. Hussey, *Nature Phys.* **2**, 821 (2006).
- [16] Nicolas Doiron-Leyraud, Cyril Proust, David LeBoeuf, Julien Levallois, Jean-Baptiste Bonnemaïson, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, Louis Taillefer, *Nature* **447**, 565 (2007).
- [17] M. Abdel-Jawad, J. G. Analytis, L. Balicas, A. Carrington, J. P. H. Charmant, M. M. J. French, and N. E. Hussey, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 107002 (2007).
- [18] Malcolm P. Kennett and Ross H. McKenzie, *Phys. Rev. B* **76**, 054515 (2007).
- [19] B. Vignolle, A. Carrington, R. A. Cooper, M. M. J. French, A. P. Mackenzie, C. Jaudet, D. Vignolles, Cyril Proust & N. E. Hussey, *Nature* **455**, 952 (2008).
- [20] T. Helm, M.V. Kartsovnik, M. Bartkowiak, N. Bittner, M. Lambacher, A. Erb, J. Wosnitza, and R. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 157002 (2009).
- [21] T. Helm, M.V. Kartsovnik, I. Sheikin, M. Bartkowiak, F. Wolff-Fabris, N. Bittner, W. Biberacher, M. Lambacher, A. Erb, J. Wosnitza, and R. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 247002 (2010).
- [22] Taichi Terashima, Nobuyuki Kurita, Megumi Tomita, Kunihiro Kihou, Chul-Ho Lee, Yasuhide Tomioka, Toshimitsu Ito, Akira Iyo, Hiroshi Eisaki, Tian Liang, Masamichi Nakajima, Shigeyuki Ishida, Shin-ichi Uchida, Hisatomo Harima, and Shinya Uji, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 176402 (2011).
- [23] D. Graf, R. Stillwell, T. P. Murphy, J.-H. Park, E. C. Palm, P. Schlottmann, R. D. McDonald, J. G. Analytis, I. R. Fisher, and S. W. Tozer, *Phys. Rev. B.* **85**, 134503 (2012).
- [24] R. Yagi, Y. Iye, T. Osada, S. Kagoshima, *J. Phys. Soc. Jpn.* **59**, 3069 (1990).
- [25] K. Yamaji, *J. Phys. Soc. Jpn.* **58**, 1520 (1989).
- [26] M.V. Kartsovnik, P.A. Kononovich, V.N. Laukhin and I.F. Schegolev, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **48**, 498 (1988) [*Sov. Phys. JETP Lett.* **48**, 541 (1988)].
- [27] М.П. Шаскопольская, *Кристаллография*, Москва, Изд. "Высшая школа", 1984.
- [28] Yasunari Kurihara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 975 (1992).

- [29] G. Mahan "Many-Particle Physics", 2nd ed., Plenum Press, New York, 1990.
- [30] M. Kuraguchi et al., *Synth. Met.* 133-134, 113 (2003).
- [31] M.V. Kartsovnik, P.D. Grigoriev, W. Biberacher, N.D. Kushch, P. Wyder, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 126802 (2002).
- [32] P.D. Grigoriev, *Phys. Rev. B* **67**, 144401 (2003).
- [33] P.D. Grigoriev, M.V. Kartsovnik, W. Biberacher, N.D. Kushch, P. Wyder, *Phys. Rev. B* **65**, 60403(R) (2002).
- [34] G. Grüner, *Density waves in Solids* Perseus Publishing; 1st edition (January 15, 2000).
- [35] P. Monceau, *Electronic Properties of Inorganic Quasi One-Dimensional Compounds*, D. Reidel Pub. Co.; (April 2002).
- [36] P. Monceau, *Advances in Physics* **61**, 325 (2012).
- [37] W.P. Su and J. R. Schrieffer, *Physics in One Dimension/* Ed. by J. Bernasconi and T. Schneider, Springer series in Solid State Sciences, Berlin, Heidelberg and New York: Springer, 1981.
- [38] S.A. Brazovskij and N.N. Kirova, *Sov. Sci. Rev. A Phys.*, volume **5**, p. 99 (1984)
- [39] Ненулевое продольное магнитосопротивление может возникнуть в металлах в τ -приближении в некоторых специальных случаях при определенных поверхности Ферми и наклоне магнитного поля, когда появляются сингулярные электронные траектории [100].
- [40] A. I. Coldea, A. F. Bangura, J. Singleton, A. Ardavan, A. Akutsu-Sato, H. Akutsu, S. S. Turner, and P. Day, *Phys. Rev. B* **69**, 085112 (2004).
- [41] R.B. Lyubovskii, S.I. Pesotskii, A. Gilevskii and R.N. Lyubovskaya, *JETP* **80**, 946 (1995) [*Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **107**, 1698 (1995)].
- [42] F. Zuo, X. Su, P. Zhang, J. S. Brooks, J. Wosnitza, J. A. Schlueter, Jack M. Williams, P. G. Nixon, R. W. Winter, and G. L. Gard, *Phys. Rev. B* **60**, 6296 (1999).
- [43] W. Kang, Y. J. Jo, D. Y. Noh, K. I. Son, and Ok-Hee Chung, *Phys. Rev. B* **80**, 155102 (2009); W. Kang, private communication.

- [44] J. Hagel, J. Wosnitza, C. Pfeleiderer, J. A. Schlueter, J. Mohtasham, and G. L. Gard, Phys. Rev. B **68**, 104504 (2003).
- [45] J. Wosnitza, Journal of Low Temperature Physics 146, 641 (2007).
- [46] M. V. Kartsovnik, P. D. Grigoriev, W. Biberacher, and N. D. Kushch, Phys. Rev. B **79**, 165120 (2009).
- [47] J. Wosnitza, J. Hagel, J. S. Qualls, J. S. Brooks, E. Balthes, D. Schweitzer, J. A. Schlueter, U. Geiser, J. Mohtasham, R. W. Winter, et al., Phys. Rev. B 65, 180506(R) (2002).
- [48] P. D. Grigoriev, M. V. Kartsovnik, W. Biberacher, Phys. Rev. B **86**, 165125 (2012).
- [49] A. A. Abrikosov, Physica C **317-318**, 154 (1999).
- [50] V. M. Gvozdkov, Phys. Rev. B **76**, 235125 (2007).
- [51] M. V. Kartsovnik, D. Andres, S. V. Simonov, W. Biberacher, I. Sheikin, N. D. Kushch, and H. Müller, Phys. Rev. Lett. **96**, 166601 (2006).
- [52] D. B. Gutman and D. L. Maslov, Phys. Rev. Lett. **99**, 196602 (2007) ; Phys. Rev. B **77**, 035115 (2008).
- [53] L. A. Falkovsky, Phys. Rev. B **75**, 033409 (2007).
- [54] Urban Lundin and Ross H. McKenzie, Phys. Rev. B **68**, 081101(R) (2003).
- [55] A. F. Ho and A. J. Schofield, Phys. Rev. B 71, 045101 (2005).
- [56] R. H. McKenzie and P. Moses, Phys. Rev. Lett. **81**, 4492 (1998).
- [57] P. Moses and R. H. McKenzie, Phys. Rev. B **60**, 7998 (1999).
- [58] N. Kumar and A. M. Jayannavar, Phys. Rev. B **45**, 5001 (1992).
- [59] N. Harrison, R. Bogaerts, P. H. P. Reinders, J. Singleton, S. J. Blundell, and F. Herlach, Phys. Rev. B **54**, 9977 (1996).
- [60] P. D. Grigoriev, Phys. Rev. B **83**, 245129 (2011).
- [61] P. D. Grigoriev, JETP Lett. **94**, 47 (2011).
- [62] P. D. Grigoriev, Fiz. Nizk. Temp. **37**, 930 (2011) [Low Temp. Phys. **37**, 738 (2011)].

- [63] T. Osada, K. Kabayashi and E. Ohmichi, *Synth. Met.* **135-136**, 653 (2003).
- [64] T. Valla, P.D. Johnson, Z. Yusof, B.Wells, Q. Li, S.M. Loureiro, R.J. Cava, M. Mikami, Y. Mori, M. Yoshimura, and T. Sasaki, *Nature London* **417**, 627 (2002).
- [65] J.G. Analytis, A. Ardavan, S.J. Blundell, R.L. Owen, E.F. Garman, C. Jeynes, and B.J. Powell, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 177002 (2006).
- [66] V.N. Zverev, A.I. Manakov, S.S. Khasanov, R.P. Shibaeva, N.D. Kushch, A.V. Kazakova, L.I. Buravov, E.B. Yagubskii, and E. Canadell, *Phys. Rev. B* **74**, 104504 (2006).
- [67] Кроссовер от когерентного к некогерентному межслоевому переносу, вызываемый повышением температуры и возможно наблюдаемый в органических металлах в виде немонотонной температурной зависимости $R_{zz}(T)$, активно обсуждается по настоящее время, например в J. Singleton, P.A. Goddard, A. Ardavan, A.I. Coldea, S.J. Blundell, R.D. McDonald, S. Tozer, and J.A. Schlueter, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 027004 (2007).
- [68] T. Champel and V. P. Mineev, *Phys. Rev. B* **66**, 195111 (2002).
- [69] V. M. Gvozdkov, *Phys. Rev. B* **70**, 085113 (2004).
- [70] T. Champel and V. P. Mineev, *Phys. Rev. B* **74**, 247101 (2006).
- [71] Tsunea Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **36**, 959 (1974).
- [72] Tsunea Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **36**, 1521 (1974).
- [73] Tsunea Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **37**, 622 (1974).
- [74] E.M. Baskin, L.N. Magarill, and M.V. Entin, *Sov. Phys. JETP* **48**, 365 (1978) [E.M. Баскин, Л.Н. Магарилл, М.В. Энтин. *ЖЭТФ* **75**, 723 (1978)].
- [75] E. Brezin, D.I. Gross, C. Itzykson. *Nucl. Phys. B* **235**, 24 (1984).
- [76] *The Quantum Hall Effect*, Ed. by R. Prange and S. M. Girvin (Springer, New York), 1987; Перевод книги: Квантовый эффект Холла. Под ред. Р. Пренджа, С. Гирвина. М.: Мир, (1989).
- [77] B. Huckestein, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 357 (1995).
- [78] A.M. Dyugaev, P.D. Grigor'ev, Yu.N. Ovchinnikov, *JETP Letters* **78**, 148 (2003).

- [79] I.S. Burmistrov, M.A. Skvortsov, JETP Lett. **78**, 156 (2003).
- [80] M. E. Raikh and T. V. Shahbazyan, Phys. Rev. B **47**, 1522 (1993).
- [81] K. B. Efetov and V. G. Marikhin, Phys. Rev. B **40**, 12126 (1989).
- [82] I.V. Kukushkin, S.V. Meshkov and V.B. Timofeev, Sov. Phys. Usp. **31**, 511 (1988).
- [83] A.D.Mirlin, E.Altshuler, P.Wölfle, Annalen der Physik **5**, 281 (1996).
- [84] I. A. Dmitriev, A. D. Mirlin, D. G. Polyakov, and M. A. Zudov, Rev. Mod. Phys. **84**, 1709 (2012).
- [85] M. M. Fogler, A. Yu. Dobin, V. I. Perel, and B. I. Shklovskii, Phys. Rev. B **56**, 6823 (1997).
- [86] Пренебрегаемые диаграммы с пересечением примесных линий в двумерном электронном газе в сильном поле приводят к экспоненциально малым хвостам плотности состояний.[73, 75, 81] В трехмерном электронном газе эти диаграммы малы по параметру $n_i/n_e \ll 1$, где n_i и n_e – объемные концентрации примесей и электронов соответственно.
- [87] Bodo Huckestein, Rev. Mod. Phys. **67**, 357 (1995).
- [88] L.S. Levitov, A.V. Shytov, JETP Lett. **66**, 214 (1997).
- [89] Feigelman, A.S. Ioselevich, JETP Lett. **88**, 767 (2008).
- [90] S.V. Iordanski and D.S. Lyubshin, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 405601 (2009); S.V. Iordanski, Письма в ЖЭТФ **99**, 606 (2014).
- [91] P.D. Grigoriev, Physica B **407**, 1932 (2012).
- [92] J.Wosnitza, S.Wanka, J.Hagel, E.Balthes, N.Harrison, J. A.Schlueter, A. M.Kini, U.Geiser, J.Mohtasham, R.W. Winter, G. L. Gard, Phys. Rev. B **61**, 7383 (2000).
- [93] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, Course of Theoretical Physics, Vol. 3: Quantum Mechanics, 3rd ed., Pergamon Press, Oxford, 1977; Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. М.: Наука, (1974).

- [94] Пространственная неоднородность плотности электронов и распределения примесей в z -направлении из-за слоистой кристаллической структуры также приводят к некоторым поправкам к электронной собственно-энергетической части. Однако, это эквивалентно некоторому дополнительному интегрированию по силе примесного потенциала,[78, 79] и в самосогласованном борновском приближении приводит лишь к перенормировке Γ_0 .
- [95] Положения примесей вдоль проводящих слоев в рассматриваемой модели не коррелируют, что может накладывать некоторое ограничение на концентрацию примесей, $n_i < 1/R^3$, где R – радиус действия потенциала примеси. Для короткодействующих примесей с $R \sim 1/k_F$ это условие очень мягкой и эквивалентно условию металлической проводимости вдоль слоев.
- [96] Корневая зависимость поперечного магнитосопротивления $R_{xx} \propto \sqrt{B_z}$ была получена для графена.[53] Однако, это поперечное магнитосопротивление слабее стандартной зависимости для квадратичного закона дисперсии [1] $R_{xx} \propto B_z^2$, в то время как эта теория не предсказывает никакого продольного магнитосопротивления.
- [97] Магнитные квантовые осцилляции химического потенциала μ , изучаемые в приложении Б.1, в природных (молекулярных) слоистых металлах обычно не существенны, поскольку подавлены магнитострикцией, как было впервые показано в работе [140].
- [98] Вершинными поправками можно пренебречь, поскольку рассматривается рассеяние только на короткодействующих (точечных) примесях. В обычных трехмерных металлах вершинные поправки приводят к разнице между транспортным и обычным временем свободного пробега, которые совпадают для рассеяния на точечных примесях.
- [99] P.D. Grigoriev, M.V. Kartsovnik, W. Biberacher, P. Wyder, arXiv:cond-mat/0108352 (unpublished); P.D. Grigoriev, Ph.D. thesis Univ. Konstanz (2002).
- [100] A.Y. Mal'tsev, JETP **85**, 934 (1997) [Zh. Exp. Teor. Fiz. **112**, 1710 (1997)].
- [101] Here we don't consider magnetic-field-induced density wave transitions observed in quasi-one-dimensional organic metals.[102, 103]

- [102] L.P.Gor'kov and A.G. Lebed, J. Phys. (Paris) **45**, L433 (1984).
- [103] P.M. Chaikin, Phys. Rev. B **31**, 4770 (1985).
- [104] D. Andres, M.V. Kartsovnik, W. Biberacher, H. Weiss, E. Balthes, H. Müller, and N.D. Kushch, Phys. Rev. B **64**, 161104(R)(2001).
- [105] D. Andres, M.V. Kartsovnik, W. Biberacher, K. Neumaier, E. Schuberth, and H. Müller, Phys. Rev. B **72**, 174513 (2005).
- [106] M.V. Kartsovnik in: *The Physics of Organic Superconductors and Conductors* Ed. by A.G. Lebed, Springer Series in Materials Science, Vol. 110 (Springer, Berlin Heidelberg 2008), P.185.
- [107] D. Andres, M.V. Kartsovnik, W. Biberacher, K. Neumaier, I. Sheikin, H. Müller, and N.D. Kushch, Fiz. Nizk. Temp. **37**, 959 (2011) [Low Temp. Phys. **37**, 762 (2011)].
- [108] N. Hanasaki, S. Kagoshima, T. Hasegawa, T. Osada, and N. Miura, Phys. Rev. B **57**, 1336 (1998).
- [109] V.G. Peschansky and M.V. Kartsovnik, Phys. Rev. B **60**, 11207 (1999).
- [110] T. Osada, S. Kagoshima, and N. Miura, Phys. Rev. B **46**, 1812 (1992).
- [111] A.G. Lebed and M.J. Naughton, Phys. Rev. Lett. **91**, 187003 (2003); Si Wu and A.G. Lebed, Phys. Rev. B **82**, 075123 (2010).
- [112] R. Rousseau, M.-L. Doublet, E. Canadell, R.P. Shibaeva, S.S. Khasanov, L.P. Rozenberg, N.D. Kushch, and E.B. Yagubskii, J. Phys. I (France) **6**, 1527 (1996).
- [113] M.V. Kartsovnik, D. Andres, W. Biberacher, and H. Müller, Physica B **404**, 357 (2009).
- [114] L. D. Landau Z. Phys. **64**, 629 (1930).
- [115] W.J. de Haas, P.M. van Alphen – Leiden Commun. A, v. 212, p. 215 (1930) ; Proc. Amsterdam Acad. Sci., v. 33, p. 1106 (1930)
- [116] L.M.Lifshitz and A.M.Kosevich, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **29**, 730 (1956).
- [117] R.B. Dingle, Proc. Roy. Soc. **A211**, 517 (1952).

- [118] Yu. A. Bychkov, Zh. Exp. Theor. Phys. **39**, 1401 (1960), [Sov. Phys. JETP **12**, 977 (1961)].
- [119] L.W. Schubnikov, W.J. de Haas, Proc. Netherlands Roy. Acad. Sci. **33**, 130 & 163 (1930).
- [120] E.N. Adams, T.D. Holstein, J. Phys. a. Chem. Solids, v. 10, p. 254 (1959); A.A. Abrikosov, Zh. Ex. Teor. Fiz. **56**, p. 1391 (1969)
- [121] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Физическая Кинетика (10-й том курса теоретической физики), Москва, 2002
- [122] T.Ando and Y.Uemura, Journal of the Physical Society of Japan **36**, p. 959 (1974)
- [123] K.B.Efetov, V.G.Marikhin, Phys. Rev. B **40**, p. 12126 (1989) and references therein
- [124] T.Maniv, I.Vagner, Phys. Rev. B **38**, 6301 (1988)
- [125] X.C. Xie, Q.P. Li and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **42**, 7132 (1990)
- [126] J. Wosnitzer, G.W. Crabtree, H.H. Wang et al., Phys. Rev. Lett. **67**, 263 (1991)
- [127] S. Hill, Phys. Rev. B **55**, 4931 (1997)
- [128] N. Harrison, R. Bogaerts, J. Singleton et al., Phys. Rev. B **54**, 9977 (1996)
- [129] T. Champel, V.P. Mineev, Philosophical Magazine B **81**(1), 55 (2001)
- [130] M.A. Itskovsky, T. Maniv, I.D. Vagner, Phys. Rev. B **61**, 14616 (2000)
- [131] P. Grigoriev, I. Vagner, cond-mat /0009409
- [132] P.D.Grigoriev, I.D.Vagner, "The de Haas - van Alphen effect in quasi-two-dimensional materials", Письма в ЖЭТФ, **69** (2), 139, (1999).
- [133] В.И. Нижанковский, Б.К. Медведев, В.Г. Мокеров, Письма в ЖЭТФ **47**, 343 (1988) [JETP Lett. **47**, 410 (1988)].
- [134] *Magnetization Measurements on Low-Dimensional Electron Systems in High-Mobility Gaas and Sige Heterostructures*, Dissertation of Marc Wilde, University of Hamburg, 2004; ISBN: 3865373976 / ISBN-13: 9783865373977.

- [135] A. D. Caplin and D. Shoenberg, Phys. Lett. **18**, 238 (1965); W. S. Whitten and A. Piccini, Phys. Lett. **20**, 248 (1966); E. Balthes, P. Wyder and D. Schweitzer, Solid State Communications **124**, 141 (2002).
- [136] B. G. Lazarev, E. A. Kaner, and L. V. Chebotarev, Fiz. Nizk, Temp. 3, 808 (1977) [Sov. J. Low Temp. Phys. **3**, 394 (1977)].
- [137] B.L. Altshuler and A.G. Aronov "Electron-Electron Interaction In Disordered Conductors глава 1 в сборнике "Electron-Electron Interactions in Disordered Systems Ed. by A.L. Efros and M. Pollak, Amsterdam: North-Holland (1985); ISBN: 978-0-444-86916-6.
- [138] A.S. Alexandrov and A.M. Bratkovsky, Phys. Rev. Lett. **76**, 1308 (1996); Phys. Lett. A **234**, 53 (1997); Phys. Rev. B **63**, 033105 (2001); M. Nakano, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 910 (1997); M. A. Itskovsky, T. Maniv, and I. D. Vagner, Phys. Rev. B **61**, 14616 (2000); Masahiro Nakano, Phys. Rev. B **62**, 45 (2000); Thierry Champel, Phys. Rev. B **65**, 153403 (2002); M. A. Itskovsky, Phys. Rev. B **68**, 054423 (2003); V. M. Gvozdkov, A. G. M. Jansen, D. A. Pesin, I. D. Vagner, and P. Wyder, Phys. Rev. B **68**, 155107 (2003); V. M. Gvozdkov, A. G. M. Jansen, D. A. Pesin, I. D. Vagner, and P. Wyder, Phys. Rev. B **70**, 245114 (2004); Jean-Yves Fortin, E. Perez, and A. Audouard, Phys. Rev. B **71**, 155101 (2005); A. S. Alexandrov and V. V. Kabanov, Phys. Rev. B **76**, 233101 (2007); I. O. Thomas, V. V. Kabanov, and A. S. Alexandrov, Phys. Rev. B **77**, 075434 (2008).
- [139] P. Grigoriev, JETP **92**, 1090 (2001); T. Champel, Phys. Rev. B **64**, 054407 (2001).
- [140] N.E.Alekseevskii and V.I.Nizhanovskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **61**, 1051 (1985) [JETP **88**, 1771 (1985)].
- [141] A.E. Datars and J.E. Sipe, Phys. Rev. B **51**, 4312 (1995); V.M. Gvozdkov, Fiz. Nizk. Temp. **27**, 956 (2001) [Sov. J. Low Temp. Phys. **27**, 704 (2001)].
- [142] N.S. Averkiev, L.E. Golub, S.A. Tarasenko and M. Willander, J. of Phys. Cond. Matter **13**, 2517 (2001).
- [143] K.Jauregui, V.I.Marchenko, I.D.Vagner, Phys. Rev. B **41**, Rapid Comm., 12922 (1990)
- [144] V.M. Gvozdkov, Fiz. Tverd. Tela **26**, p. 2574 (1984) [Sov. Phys. Solid State **26** (9), p. 1560 (1984)]; K. Jauregui, V.I. Marchenko, I.D. Vagner, Phys. Rev. B **41**, 12922 (1990); M.A. Itskovsky, T. Maniv and I.D. Vagner, Phys. Rev. B **61**, 14616 (2000); P. Grigoriev and I. Vagner, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz., **69**, 139 (1999) [JETP Letters **69**, 156 (1999)];

- T. Champel and V.P. Mineev, *Phil. Magazine B* **81**, 55 (2001); T. Champel, *Phys. Rev. B* **64**, 54407 (2001).
- [145] P. Grigoriev, *JETP* **92**, 1090 (2001) [*Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **119**(6), 1257 (2001)].
- [146] A.P. Mackenzie, S.R. Julian, A.J. Diver et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3786 (1996); C. Bergemann, S.R. Julian, A.P. Mackenzie, S. NishiZaki and Y. Maeno, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2662 (2000).
- [147] J. Wosnitzer, G.W. Crabtree, K.D. Carlson, H.H. Wang and J.M. Williams, *Physica B* **194-196**, 2007 (1994); J. Wosnitzer, G. Goll, D. Beckmann, S. Wanka, D. Schweitzer and W. Strunz, *J. Phys. I France* **6**, 1597 (1996).
- [148] H. Weiss, M. V. Kartsovnik, W. Biberacher, E. Balthes, A.G.M. Jansen, and N.D. Kushch, *Phys. Rev. B* **60**, R16259 (1999).
- [149] M.Schiller, W.Schmidt, E.Balthes et al., *Europhys. Lett.* **51**, 82 (2000).
- [150] M. Kartsovnik, V. Laukhin, V. Nizhankovskii and A. Ignat'ev, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **47**, 302 (1988) [*Sov. Phys. JETP Lett.* **47**, 363 (1988)]; M. Kartsovnik, P. Kononovich, V. Laukhin and I. Schegolev, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **48**, 498 (1988) [*Sov. Phys. JETP Lett.* **48**, 541 (1988)]; M. Kartsovnik, P. Kononovich, V. Laukhin, S. Pesotskii and I.F.Schegolev, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **49**, 453 (1989) [*Sov. Phys. JETP Lett.* **49**, 519 (1989)]; M. Kartsovnik, V. Laukhin and S. Pesotskii, *Fiz. Nizk. Temp.* **18**, 22 (1992) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **18** 13 (1992)].
- [151] T. Terashima, S. Uji, H. Aoki, M. Tamura, M. Kinoshita and M. Tokumoto, *Solid State Commun.* **91**, 595 (1994); E. Ohmichi, H. Ito, T. Ishiguro, G. Saito and T. Komatsu, *Phys. Rev. B* **57**, 7481 (1998).
- [152] B. Narymbetov, N. Kushch, L. Zorina et al., *Eur. Phys. J. B* **5**, 179 (1998); T. Togonidze, M. Kartsovnik, J. Perenboom, N. Kushch and H. Kobayashi, *Physica B* **294-295** 435 (2001).
- [153] L. Balicas, J. Brooks, K. Storr, D. Graf, S. Uji, H. Shinagawa, E. Ojima, H. Fujiwara, H. Kobayashi, A. Kobayashi and M. Tokumoto, *cond-mat/0008287* (2000).
- [154] G. Mahan "Many-Particle Physics", 2nd ed., Plenum Press, New York, 1990, (§7.1).

- [155] "Standard Mathematical Tables and Formulae", CRC Press, (1996) (or another similar book).
- [156] В реальных слоистых соединениях распределение примесей может иметь периодические модуляции в направлении, перпендикулярном слою и с периодом, равным межслоевому расстоянию. Однако, в борновском приближении эта модуляция приводит только к постоянному множителю в Ур. (1.55), что перенормирует температуру Дингла.
- [157] P.D. Grigoriev, M.V. Kartsovnik, W. Biberacher and P. Wyder, cond-mat/0108352 (2001) (unpublished).
- [158] This fact can be understood in a different way: slow oscillations originate from local electron motion and are not sensitive to global variations of the position of the chemical potential with respect to the bottom of the conducting band.
- [159] J.M. Williams et al., Inorg. Chem. **23**, 3839 (1984).
- [160] M.V. Kartsovnik et al., Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz., **48** 498 (1988) [Sov. Phys. JETP Lett. **48**, 541 (1988)]; M.V. Kartsovnik et al., Zh. Eksp. Teor. Fiz. **97**, 1305 (1990) [Sov. Phys. JETP **70**, 735 (1990)]; M.V. Kartsovnik et al., J. Phys. I France **2** 89 (1992).
- [161] M.V. Kartsovnik, V.N. Laukhin, V.I. Nizhankovskii and A. Ignat'ev, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47**, 302 (1988) [Sov. Phys. JETP Lett. **47**, 363 (1988)].
- [162] M.V. Kartsovnik, P.A.Kononovich, V.N.Laukhin, S.I.Pesotskii and I.F.Schegolev, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **49**, 453 (1989) [Sov. Phys. JETP Lett. **49**, 519 (1989)].
- [163] J. Wosnitza et al., Synth. Metals, **85**, 1479 (1997).
- [164] E. Ohmichi et al., Phys. Rev. B **57**, 7481 (1998).
- [165] J. Wosnitza et al., Synth. Metals **55-57**, 2891 (1993); J. Wosnitza et al., J. Phys. I France **6**, 1597 (1996).
- [166] M.V. Kartsovnik, V.N.Laukhin, S.I.Pesotskii, I.F.Schegolev and V.M.Yakovenko, J. Phys. I (France) **2**, 89 (1992).
- [167] Азимутальная ориентация проекции поля на плоскость ab отличалась для измерений, соответствующих Рис. 2.3 and 2.7. Поэтому значение $F_{\text{slow}} = 42$ Т, соответствующее Рис. 2.3а не точно совпадает с аппроксимирующей кривой на Fig. 2.7а.

- [168] O. Fischer et al., *Rev. Mod. Phys.* **79**, 353 (2007); A. K. Saxena, *High-Temperature Superconductors*, Springer 2009.
- [169] T. Ishiguro, K. Yamaji, and G. Saito, *Organic Superconductors*, 2nd ed., Springer-Verlag, Berlin, 1998; *The physics of organic superconductors and conductors*, Ed. by A.G. Lebed, Springer 2009.
- [170] V. Mitin, V. Kochelap, M. A. Stroschio, *Quantum Heterostructures: Microelectronics and Optoelectronics*, Cambridge University Press, 1999.
- [171] M. S. Dresselhaus and G. Dresselhaus, *Advances in Physics* **51**, 1460 (2002).
- [172] B. Vignolle et al., *Nature* **455**, 952 (2008) ; Nicolas Doiron-Leyraud, Cyril Proust et al., *Nature* **447**, 565 (2007); T. Pereg-Barnea, H. Weber, G. Refael, M. Franz, *Nature Physics* (2009); A. I. Coldea, J. D. Fletcher, A. Carrington et al., *Phys. Rev. Lett.* **101**, 216402 (2008); T. Helm, M.V. Kartsovnik, M. Bartkowiak et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 157002 (2009);
- [173] C. Bergemann et al., *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2662 (2000).
- [174] A. Carrington, E.A. Yelland, J.D. Fletcher and J.R. Cooper, *Physica C* **456**, 92 (2007).
- [175] M. S. Nam, S. J. Blundell, A. Ardavan, J. A. Symington and J. Singleton, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 2271 (2001).
- [176] A. A. House, N. Harrison, S. J. Blundell et al., *Phys. Rev. B* **53**, 9127 (1996).
- [177] A. F. Bangura, P. A. Goddard, J. Singleton et al., *Phys. Rev. B* **76**, 052510 (2007).
- [178] P. D. Grigoriev, Angular dependence of the Fermi surface cross-section area and magnetoresistance in quasi-two-dimensional metals, *Phys. Rev. B* **81**, 205122 (2010).
- [179] Sudip Chakravarty, Asle Sudbo, Philip W. Anderson and Steven Strong, *Science* **261**, 337 (1993).
- [180] C. Bergemann, A.P. Mackenzie, S.R. Julian, D. Forsythe and E. Ohmichi, *Advances in Physics* **52**, 639 (2003).
- [181] A. G. Lebed, N. N. Bagmet, *Phys. Rev. B* **55**, R8654 (1997).
- [182] A. J. Schofield and J. R. Cooper, *Phys. Rev. B* **62**, 10 779 (2000).

- [183] P.D. Grigoriev, T.I. Mogilyuk, Phys. Rev. B **90**, 115138 (2014).
- [184] E. I. Chashechkina and P. M. Chaikin, Phys. Rev. Lett. **80**, 2181 (1998).
- [185] S. P. Strong, D. G. Clarke, and P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **73**, 1007 (1994); D. G. Clarke and S. P. Strong, Adv. Phys. **46**, 545 (1997).
- [186] M. D. Johannes and I. I. Mazin, Phys. Rev. B **77**, 165135 (2008).
- [187] См., например, книги: E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems*, Westview Press (March, 1998); Alexander O. Gogolin, Alexander A. Nersesyan, Alexei M. Tsvelik, *Bosonization Approach to Strongly Correlated Systems*, Cambridge University Press (December 10, 1998).
- [188] Приведем пример, иллюстрирующий, что строго 1D модели не применимы для описания физических квазиодномерных соединений: фазовая диаграмма основного состояния (при низкой температуре) в координатах констант связи. В ренорм-групповом решении одномерной модели с константами взаимодействия $g_{1,2}$ (g_1 и g_2 являются амплитудами рассеяния вперед и назад соответственно) (см., например, D. Senechal, cond-mat/9908262) дает бесщелевую латтинжеровскую жидкость при $|g_1| < 2g_2$, в то время как в реальных соединениях такое состояние обычно не наблюдается, а наблюдается обычная волна зарядовой или спиновой плотности.
- [189] B. Horovitz, H. Gutfreund and M. Weger, Phys Rev B. **12**, 3174 (1975)
- [190] Ross H. McKenzie, Phys Rev B. **52**, 16428 (1995)
- [191] T. Ishiguro, K. Yamaji, and G. Saito, *Organic Superconductors*, 2nd edition, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1998.
- [192] P. Fulde and A. Ferrel, Phys. Rev. **135**, A550 (1964).
- [193] A. I. Larkin and Yu. N. Ovchinnikov, Sov. Phys. JETP **20**, 762 (1965) [Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47**, 1136 (1964)].
- [194] Roberto Casalbuoni and Giuseppe Nardulli, Rev. Mod. Phys. **76**, 263 (2004).
- [195] A.I. Buzdin and H. Kachkachi, Phys. Lett. A **225**, 341 (1997).
- [196] R. Combescot and C. Mora, Eur. Phys. J. B **28**, 397 (2002).

- [197] S.A. Brazovskii, L.P. Gor'kov, J.R. Schrieffer, *Physica Scripta* **25**, 423 (1982).
- [198] S.A. Brazovskii, L.P. Gor'kov, A.G. Lebed', *Sov. Phys. JETP* **56**, 683 (1982) [*Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **83**, 1198 (1982)].
- [199] A.I. Buzdin and V.V. Tugushev, *Sov. Phys. JETP* **58**, 428 (1983) [*Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **85**, 735 (1983)].
- [200] С.И. Матвеевко, "Периодические структуры в низкоразмерных коррелированных системах", докторская диссертация в ИТФ Ландау РАН (2012).
- [201] S.A. Brazovskii, I.E. Dzialoshinskii and N.N. Kirova, *Sov. Phys. JETP* **54**, 1209 (1981) [*ZhETF* 81, 2279 (1981)].
- [202] L. P. Gor'kov and A. G. Lebed, *J. Phys. (Paris) Lett.* **45**, L433 (1984).
- [203] G. Montambaux, M. Héritier, and P. Lederer, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2078 (1985).
- [204] J. F. Kwak, J. E. Schirber, P.M. Chaikin, J. M. Williams, H. H. Wang, and L. Y. Chiang, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 972 (1986).
- [205] A. G. Lebed, *JETP Lett.* **78**, 138 (2003).
- [206] W. Dieterich and P. Fulde, *Z. Phys.* **265**, 239 (1973).
- [207] P. M. Chaikin, *J. Phys. I France* **6**, 1875 (1996).
- [208] D. Zanchi, A. Bjeliš, and G. Montambaux, *Phys. Rev. B* **53**, 1240 (1996).
- [209] M. Fujita, K. Machida and H. Nakanishi, *J. Phys. Soc Jpn.*, 54, 3820 (1985).
- [210] M.V. Kartsovnik and V.N. Laukin, *J. Phys. I France* **6**, 1753 (1996).
- [211] N. Biskup, J.A.A.J. Perenboom, J.S. Qualls, and J.S. Brooks, *Solid State Commun.* 107, 503 (1998).
- [212] P. Christ, W. Biberacher, M. V. Kartsovnik, E. Steep, E. Balthes, H. Weiss, and H. Müller, *JETP Lett.* **71**, 303 (2000) [*Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **71**, 437 (2000)].
- [213] J. S. Qualls, L. Balicas, J. S. Brooks, N. Harrison, L. K. Montgomery, and M. Tokumoto, *Phys. Rev. B* **62**, 10008 (2000).

- [214] D. Andres, M. V. Kartsovnik, W. Biberacher, H. Weiss, E. Balthes, H. Müller and N. Kushch, Phys. Rev. B **64**, 161104(R) (2001).
- [215] N. Harrison, C. H. Mielke, A. D. Christianson, J.S. Brooks, and M. Tokumoto, Phys. Rev. Lett. **86**, 1586 (2001).
- [216] D. Andres, M. V. Kartsovnik, P. D. Grigoriev, W. Biberacher, and H. Müller, Phys. Rev. B **68**, 201101(R) (2003).
- [217] K. Maki, B. Dóra, M. Kartsovnik, A. Virosztek, B. Korin-Hamzic, Mario Basletic, Phys. Rev. Lett. **90**, 256402 (2003).
- [218] N. Harrison, J. Singleton, A. Bangura, A. Ardavan, P. A. Goddard, R. D. MacDonald and L. K. Montgomery, Phys. Rev. B **69**, 165103 (2004).
- [219] D. Graf, J. S. Brooks, E. S. Choi, S. Uji, J. C. Dias, M. Almeida and M. Matos, Phys. Rev. B **69**, 125113 (2004).
- [220] D. Graf, E. S. Choi, J. S. Brooks, R. T. Henriques, M. Almeida and M. Matos, Phys. Rev. Lett. **93**, 076406 (2004).
- [221] E. B. Lopes, M. J. Matos, R. T. Henriques, M. Almeida, and J. Dumas Phys. Rev. B **52**, R2237 (1995).
- [222] R. McDonald, N. Harrison, L. Balicas, K.H. Kim, J. Singleton and X. Chi, Phys. Rev. Lett. **93**, 076405 (2004).
- [223] R.D. McDonald, N. Harrison, J. Singleton, A. Bangura, P. A. Goddard, A. P. Ramirez and X. Chi, Phys. Rev. Lett. **94**, 106404 (2005)
- [224] H. Burkhardt and D. Rainer, Ann. Physik **3**, 181 (1994).
- [225] R.McKenzie, cond-mat/9706235 (1998)
- [226] A. Bjeliš, D. Zanchi, and G. Montambaux, “Pauli and orbital effects of magnetic field on charge density waves”, cond-mat/9909303.
- [227] Y.Hasegawa and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Japan **55**, 3978 (1986).
- [228] O. V. Dimitrova and M. V. Feigel'man, JETP Lett. **78**, 637 (2003).

- [229] В случае неоднородного ЛОФФ состояния расчет восприимчивости в металлической фазе дает только длину оптимального волнового вектора $|\mathbf{q}_{opt}|$ параметра порядка модуляции. Для определения наиболее энергетически выгодного сочетания \mathbf{q} ($|\mathbf{q}| = |\mathbf{q}_{opt}|$) необходимо учитывать члены третьего порядка по параметру порядка $|\Delta|$ в уравнении самосогласования. Чтобы определить, какие фазы, CDW_c или CDW_{2c} , выигрывают, мы проводим похожую процедуру. Наша процедура учитывает некоторые особенности состояния с ВЗП, такие как влияние "антинестинговых" гармоник в дисперсии электронов.
- [230] CDW_0 - CDW_{2c} переход при низкой температуре также имеет много общих черт с переходом от однородного сверхпроводящего состояния к ЛОФФ фазе в слоистых сверхпроводниках [224]. В этом случае при первом критическом поле H_{c1} формирование одиночного солитонного кинка также становится энергетически более выгодным, и функциональная форма этого солитона хорошо аппроксимируется функцией $\Delta(x) = \Delta_0 \text{th}(x/x_0)$, как в CDW_{2c} , так и в ЛОФФ состоянии при низкой температуре. Однако, есть некоторые важные различия между этими двумя системами. В случае сверхпроводимости было предсказано, что фазовый переход в ЛОФФ состояние второго рода [224], и концентрация солитонных стенок постепенно увеличивается от нуля с ростом магнитного поля. Для системы с ВЗП было предсказано, что фазовый переход от однородной CDW_0 к солитонной CDW_{2c} фазе ВЗП первого рода [201]. Наши расчеты также показывают переход первого рода между CDW_0 и CDW_{2c} фазами. Фазовый переход первого рода от металла к ЛОФФ фазе был предсказан как в приближении среднего поля [224], так и с помощью исследования в рамках ренорм-группы [231]. Переходы от нормального состояния к CDW_x фазе, наблюдаемые в экспериментах [210, 211, 212, 213, 214, 215, 216, 217, 218, 219, 220], наоборот, больше похожи на фазовые переходы второго рода.
- [231] K. Yang, Phys. Rev. B **63**, 140511(R) (2001); D. Dalidovich and Kun Yang, Phys. Rev. Lett. **93**, 247002 (2004).
- [232] T. Vuletic, P. Auban-Senzier, C. Pasquier et al., Eur. Phys. J. B **25**, 319 (2002).
- [233] J.A. Hertz and M.A. Klenin, Phys. Rev. B **10**, 1084 (1974).
- [234] D. Jerome et al., J. de Phys. Lett. **44**, L-49 (1980).
- [235] R. Brusetti, M. Ribault, D. Jerome and K. Bechgaard, J. Phys. France **43**, 801 (1982).

- [236] L.P. Gor'kov, A. G. Lebed, J. Phys. Colloq. Suppl. 44, C3-1531 (1983).
- [237] I.J. Lee, P.M. Chaikin and M.J. Naughton, Phys. Rev. Lett. **88**, 207002 (2002).
- [238] В большинстве Q1D органических соединений дисперсия электрона в c -направлении очень слаба, и его "антинестинговая" часть, которая единственная влияет на фазовую диаграмму, пренебрежимо мала.
- [239] G. Montambaux, Phys. Rev. B **88**, 207002 (2002).
- [240] S. Jafarey, Phys. Rev. B **16**, 2584 (1977).
- [241] D. Jerome, H.J. Schulz, Adv. Phys. **31**, 299 (1982).
- [242] Такое сильное взаимодействие между двумя фазами отражает хорошо известный факт, что в строго 1D проводниках, логарифмическая сингулярность появляется одновременно в куперовском и электрон-дырочном ("нулевой звук") каналах. Их разделение происходит из-за присутствия некоторых трехмерных свойств [Yu.A. Yuchkov, L.P. Gor'kov, I.E. Dzyaloshinskii, Sov. Phys. JETP **23**, 489 (1966)].
- [243] Ya. A. Gerasimenko et al., Phys. Rev. B **89**, 054518 (2014).
- [244] S.A. Brazovskij, Sov. Phys. JETP **51**, 342 (1980).
- [245] W.P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger, Phys. Rev. Lett. **42**, 1698 (1979); Phys. Rev. B **22**, 2099 (1980).
- [246] Z. Sun, Q. Wang, A.V. Federov, H. Zheng, J.F. Mitchell and D.S. Dessau, Proc. Nat. Acad. Sciences of the USA, **108**, 11799 (2011).
- [247] H. Seo, J. Phys. Soc. Jpn, **69**, 805 (2000).
- [248] S.A. Kivelson, I.P. Bindloss, E. Fradkin, V. Oganesyan, J.M. Tranquanda, A. Kapitulnic and C. Howald, Rev. Mod. Phys., **75**, 1201 (2003).
- [249] M. Vojta, Adv. Phys, **58**, 699 (2009).
- [250] E. DiMasi, M. C. Aronson, J. F. Mansfield, B. Foran, and S. Lee, Phys. Rev. B **52**, 14516 (1995).
- [251] V. Brouet, W. L. Yang, X. J. Zhou, Z. Hussain, R. G. Moore, R. He, D. H. Lu, Z. X. Shen, J. Laverock, S. B. Dugdale, N. Ru, and I. R. Fisher, Phys. Rev. B **77**, 235104 (2008).

- [252] N. Ru, C. L. Condrón, G. Y. Margulis, K. Y. Shin, J. Laverock, S. B. Dugdale, M. F. Toney, and I. R. Fisher, Phys. Rev. B **77**, 035114 (2008).
- [253] M. Lavagnini, M. Baldini, A. Sacchetti, D. Di Castro, B. Delley, R. Monnier, J.-H. Chu, N. Ru, I. R. Fisher, P. Postorino, and L. Degiorgi, Phys. Rev. B **81**, 081101(R) (2010).
- [254] H. Yao, J.A. Robertson, Eun-Ah Kim, and S.A. Kivelson, Phys. Rev. B **74**, 245126 (2006).
- [255] D. LeBoeuf, S. Krämer, W.N. Hardy, R. Liang, D.A. Bonn and C. Proust, Nature Phys., **9**, 79 (2013).
- [256] N. Ru and I. R. Fisher, Phys. Rev. B **73**, 033101 (2006).
- [257] A. Fang, N. Ru, I. R. Fisher, and A. Kapitulnik, Phys. Rev. Lett. **99**, 046401 (2007).
- [258] A. Banerjee, Yejun Feng, D. M. Silevitch, Jiyang Wang, J. C. Lang, H.-H. Kuo, I. R. Fisher, and T. F. Rosenbaum, Phys. Rev. B, **87**, 155131 (2013).
- [259] A.A. Sinchenko, P. Lejay, and P. Monceau, Phys. Rev. B **85**, 241104(R) (2012).
- [260] H.C. Montgomery, J.Appl.Phys. **42**, 2971 (1971).
- [261] B. F. Logan, S. O. Rice, and R. F. Wick, J.Appl.Phys. **42**, 2975 (1971).
- [262] N.P. Ong and J.W. Brill, Phys. Rev. B **18**, 5265 (1978).
- [263] Зависимость $\varepsilon(\mathbf{k})$ и $v_i^2(\mathbf{k})$ от межслоевого импульса k_z пренебрежимо мала из-за сильной квази-двумерной анизотропии. Следовательно, суммирование по межслоевой компоненте k_z в Ур. (4.102) является тривиальным и дает $1/d$, где d – это межслоевое расстояние.
- [264] A. Kikuchi, J. Phy. Soc. Japan **67**, 1308 (1998).
- [265] F. Schmitt, P. S. Kirchmann, U. Bovensiepen, R. G. Moore, J.-H. Chu, D. H. Lu, L. Rettig, M. Wolf, I. R. Fisher and Z-X. Shen, New Journal of Physics **13**, 063022 (2011).
- [266] Arjun Narayanan, Andhika Kiswandhi, David Graf, James Brooks, and Paul Chaikin, Phys. Rev. Lett. **112**, 146402 (2014).
- [267] P. Monceau, Adv. Phys. **61**, 325 (2012).
- [268] P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B **77**, 224508 (2008).

- [269] P.D. Grigoriev, *Physica B* **404**, 513 (2009).
- [270] A.M. Gabovich, A.I. Voitenko, J.F. Annett and M. Ausloos, *Supercond. Sci. Technol.* **14**, R1-R27 (2001); A.M. Gabovich, A.I. Voitenko and M. Ausloos, *Physics Reports* **367**, 583–709 (2002).
- [271] I. J. Lee, P. M. Chaikin, and M. J. Naughton, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 207002 (2002).
- [272] N. Kang, B. Salameh, P. Auban-Senzier, D. Jerome, C.R. Pasquier, and S. Brazovskii, *Phys. Rev. B* **81**, 100509(R) (2010).
- [273] A.A. Sinchenko, P.D. Grigoriev, P. Lejay, P. Monceau, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 036601 (2014).
- [274] L.P. Gor'kov, P.D. Grigoriev, *Europhys. Lett.* **71**, 425 (2005).
- [275] L.P. Gor'kov, P.D. Grigoriev, *Phys. Rev. B* **75**, 020507(R) (2007).
- [276] I. J. Lee, M. J. Naughton, G. M. Danner, and P. M. Chaikin, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3555 (1997); I. J. Lee, P. M. Chaikin, and M. J. Naughton, *Phys. Rev. B* **62**, R14 669 (2000); I. J. Lee, S. E. Brown, W. G. Clark, M. J. Strouse, M. J. Naughton, W. Kang, and P. M. Chaikin, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 017004 (2001); I.J. Lee, D. S. Chow, W. G. Clark, M. J. Strouse, M. J. Naughton, P. M. Chaikin, and S. E. Brown, *Phys. Rev. B* **68**, 092510 (2003).
- [277] L. P. Gor'kov and A.G. Lebed', *J. Phys. (Paris)* **44**, C3-1531 (1983).
- [278] S.A. Brazovskii, S.A. Gordyunin and N.N. Kirova, *JETP Lett.* **31**, 451 (1980)[*Pis'ma v ZhETF* **31**, 486 (1980)].
- [279] M. Dressel, K. Petukhov, B. Salameh, P. Zornoza, and T. Giamarchi, *Phys. Rev. B* **71**, 075104 (2005);
- [280] Ya.A. Gerasimenko, S.V. Sanduleanu, V.A. Prudkoglyad, A.V. Kornilov, J. Yamada, J.S. Qualls, and V.M. Pudalov, *Phys. Rev. B* **89**, 054518 (2014).
- [281] Takao Ebihara, N. Harrison, M. Jaime, Shinya Uji, and J. C. Lashley, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 246401 (2004).
- [282] L.P. Gor'kov, P.D. Grigoriev, "Antiferromagnetism and hot spots in CeIn₃", *Phys. Rev. B* **73**, 060401(R) (2006).

- [283] W. Knafo et al., J. Phys. Cond. Mat. **15**, 3741 (2005).
- [284] M. Biasini, G. Ferro, and A. Czopnik, Phys. Rev. B **68**, 094513 (2003).
- [285] J. Rusz and M. Biasini, Phys. Rev. B **71**, 233103 (2005).
- [286] Isuru Umehara, Nobuyuki Nagai and Yoshichika Onuki, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 591 (1991).
- [287] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Course of Theoretical Physics, Vol. 8: Electrodynamics of Continuous Media, (Nauka, Moscow, 2001; Pergamon Press, Oxford, 1984).
- [288] Y. Onuki and A. Hasegawa, *Handbook on Phys. and Chem. of Rare Earth* (1995), Vol. 20, Chap. 135.
- [289] I. Umehara, T. Ebihara, N. Nagai et al., J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 19 (1992); T. Ebihara, I. Umehara, A.K. Albessard et al., *ibid*, **61**, 1473 (1992).
- [290] I.R. Walker et al., Physica C **282-287**, 303 (1997).
- [291] I. Sheikin et al., Phys. Rev. B **67**, 094420 (2003).
- [292] M. Endo, N. Kimura, H. Aoki et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 247003 (2004).
- [293] N.D. Mathur, F. M. Grosche, S. R. Julian et al., Nature **394**, 39 (1998).
- [294] M.V. Kartsovnik, V.N. Zverev, D. Andres, W. Biberacher, T. Helm, P.D. Grigoriev, R. Ramazashvili, N.D. Kushch, H. Müller, Физика низких температур, 40(4), 484-491 (2014) [Low Temp. Phys., 40(4), 377-383 (2014)].
- [295] M.I. Kaganov, A.A. Slutskin, Phys. Reports 98, 189 (1983).
- [296] M. V. Kartsovnik, A. E. Kovalev, N. D. Kushch, J. Phys. I France **3**, 1187 (1993).
- [297] L. M. Falicov and H. Stachowiak, Phys. Rev. **147**, 505 (1966).
- [298] Полный фактор Дингла, измеренный по магнитным квантовым осцилляциям, имеет вклад не только от рассеяния электронов на короткодействующих примесях, но также от гладкого потенциала, приводящего к локальным сдвигам энергии Ферми (см. статьи [31, 48]).
- [299] Амплитуда МП также зависит от энергии: $p = p(\varepsilon)$. Ниже мы используем значения $\rho(\varepsilon)$, $\rho_{1D}(\varepsilon)$, $\rho_{2D}(\varepsilon)$ и $p(\varepsilon)$ только на уровне Ферми.

- [300] Ross H. McKenzie, G. J. Athas, J. S. Brooks, R. G. Clark, A. S. Dzurak, R. Newbury, R. P. Starrett, A. Skougarevsky, M. Tokumoto, N. Kinoshita, T. Kinoshita, and Y. Tanaka Phys. Rev. B **54**, R8289(R) (1996).
- [301] D. Andres, M. V. Kartsovnik, W. Biberacher, H. Weiss, E. Balthes, H. Müller, and N. Kushch, Phys. Rev. B **64**, 161104(R) (2001).
- [302] K. Levin, D. L. Mills, and S. L. Cunningham, Phys. Rev. B **10**, 3821 (1974).
- [303] C. A. Balseiro and L. M. Falicov, Phys. Rev. B **20**, 4457 (1979).
- [304] L. Milans del Bosch and Felix Yndurain, Phys. Rev. B **41**, 2540 (1990).
- [305] Griff Bilbro and W. L. McMillan, Phys. Rev. B **14**, 1887 (1976).
- [306] K. Machida, J. Phys. Soc. Jpn. **50**, 2195 (1981).
- [307] G. C Psaltakis, J. Phys. C: Solid State Phys. **17**, 2145 (1984).
- [308] A. M. Clogston, Phys. Rev. Lett. **9**, 266 (1962); B.S. Chandrasekhar, Appl. Phys. Lett. **1**, 7 (1962).
- [309] I. J. Lee, P. M. Chaikin, and M. J. Naughton, Phys. Rev. B **65**, 180502(R) (2002).
- [310] I. J. Lee, S. E. Brown, W. G. Clark, M. J. Strouse, M. J. Naughton, W. Kang, and P. M. Chaikin, Phys. Rev. Lett. **88**, 017004 (2001); I.J. Lee, D. S. Chow, W. G. Clark, M. J. Strouse, M. J. Naughton, P. M. Chaikin, and S. E. Brown, Phys. Rev. B **68**, 092510 (2003).
- [311] I. J. Lee, S. E. Brown, W. Yu, M. J. Naughton, and P. M. Chaikin, Phys. Rev. Lett. **94**, 197001 (2005).
- [312] Stuart Brown, private communication, unpublished.
- [313] Спиновая структура сверхпроводящего состояния в присутствии волны спиновой плотности была исследована также в статье [314], где параметр порядка сверхпроводимости появляется на всех частях поверхности Ферми, обладающих хорошим и плохим нестингом. Тогда такой параметр порядка сверхпроводимости содержит смесь спин-синглетного и спин-триплетного параметров порядка [314]. Мы рассматриваем модель, предложенную в статье [275], где параметры порядка

сверхпроводимости и ВП разделены в импульсном (разделы 5.2-5.4) или в координатном пространстве (раздел 5.5).

- [314] G.C. Psaltakis and E.W. Fenton, J. Phys. C: Solid State Phys. **16**, 3913 (1983).
- [315] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [316] J. Solyom, Adv. Phys. **28**, 201 (1979).
- [317] N. Dupuis, C. Bourbonnais, and J.C. Nickel, Fizika Nizkikh Temperatur **32**, 505 (2006) [cond-mat/0510544].
- [318] Kazuhiko Kuroki, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 051013 (2006).
- [319] Yu.A. Bychkov, L.P. Gor'kov and I.E. Dzyaloshinskii, JETP **23**, 489 (1966) [J. Exp. Theor. Fiz. **50**, 738 (1966)].
- [320] Y. Tanaka and K. Kuroki, Phys. Rev. B **70**, 060502(R) (2004).
- [321] M. T. Beal-Monod, C. Bourbonnais and V. J. Emery, Phys. Rev. B **34**, 7716 (1986).
- [322] J. C. Nickel, R. Duprat, C. Bourbonnais, and N. Dupuis, Phys. Rev. Lett. **95**, 247001 (2005).
- [323] Y. Fuseya and Y. Suzumura, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 1263 (2005).
- [324] Takuji Nomura and Kosaku Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 2694 (2001).
- [325] Hiori Kino and Hiroshi Kontani, J. Low Temp. Phys. **117**, 317 (1999).
- [326] S. Belin and K. Behnia, Phys. Rev. Lett. **79**, 2125 (1997).
- [327] Обобщение теоретического описания волн плотности в квази-1D металлах в присутствии магнитного поля было разработано, например, в статье [328] для ВСП, и для ВЗП в статьях [208, 329] (см. раздел 4.2). Сильное магнитное поле, действуя на ВЗП, смешивает параметры порядка ВСП и ВЗП [208, 329] и может привести к серии фазовых переходов между состояниями с различными квантованными значениями вектора нестинга [216]. Сильное магнитное поле, действуя на металлы с неидеальным нестингом, может привести к индуцированным полем волнам плотности (field-induced DW).[330]
- [328] A. Bjeliš and D. Zanchi, Phys. Rev. B **49**, 5968 (1994).

- [329] P.D. Grigoriev and D.S. Lyubshin, Phys. Rev. B **72**, 195106 (2005).
- [330] L.P. Gor'kov and A.G. Lebed, J. Phys. (Paris) 45, L433 (1984); G. Montambaux, M. Heritier, and P. Lederer, Phys. Rev. Lett. 55, 2078 (1985); A.G. Lebed, Phys. Rev. Lett. 88, 177001 (2002); A.G. Lebed, JETP Lett. 72, 141 (2000) [Pis'ma Zh. Teor. Eksp. Fiz. 72, 205 (2000)].
- [331] Обычно, $\delta \propto P - P_{c1}$. Однако, уменьшение энергетической щели Δ_0 , сопровождающее формирование бесщелевых карманов и уменьшения части ПФ, удовлетворяющей условию нестига, могут сделать рост $\delta(P)$ быстрее при $P = P_{c1}$.
- [332] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике. Гос. Изд. ФНЛ, Москва (1962); A.A. Abrikosov, L.P. Gor'kov and I.E. Dzyaloshinskii, "Methods of quantum field theory in statistical physics", Dover Publications, INC., New York 1977.
- [333] A. M. Gabovich and A. S. Shpigel, Phys. Rev. B **38**, 297 (1988).
- [334] Charles Ro and K. Levin, Phys. Rev. B 29, 6155 (1984).
- [335] Предлагаемое в статье [336] появление дополнительного пространственно-модулированного сверхпроводящего параметра порядка $\Delta_{SC}(Q_N)$, незначительно (или не верно) при энергии Ферми намного больше, чем параметры порядка сверхпроводимости и ВП.
- [336] Kazushige Machida, Tamotsu Kōnyama, and Takeo Matsubara, Phys. Rev. B **23**, 99 (1981).
- [337] L.P. Gor'kov and T.K. Melik-Barkhudarov, JETP **18**, 1031 (1963) [J. Exp. Teor. Fiz. **45**, 1493 (1963)].
- [338] J. B. Ketterson and S. N. Song, *Superconductivity*, Cambridge University Press, 1999.
- [339] A. E. Kovalev, S. Hill, and J. S. Qualls, Phys. Rev. B **66**, 134513 (2002).
- [340] Ryusuke Kondo, Seiichi Kagoshima and Mitsuhiro Maesato, Phys. Rev. B **67**, 134519 (2003).
- [341] L.P. Gor'kov and D. Jérôme, J. Physique Lett. **46**, L643 (1985).

- [342] Lawrence, W. E., and Doniach, S., in Proceedings of the 16th International Conference on Low Temperature Physics, ed. E. Kanda, Kyoto: Academic Press of Japan, p. 361 (1971).
- [343] R.A. Klemm, A. Luther and M.R. Beasley, Phys. Rev. B **12**, 877 (1975).
- [344] G. Deutcher and O. Entin-Wohlman, Phys. Rev. B **17**, 1249, (1978).
- [345] В.П. Минеев, К.В. Самохин, *Введение в теорию необычной сверхпроводимости*, М.: Изд-во МФТИ, 1998; ISBN 5-89155-024-5 .
- [346] В.Б. Шикин, Ю.П.Монарха. Двумерные заряженные системы в гелии. М.: Наука, (1989).
- [347] F. Wegner. Z. Phys. B **51**, 279 (1983).
- [348] W. Apel. J. Phys. C **20**, L577 (1987).
- [349] Y. Aharonov, A. Casher, Phys. Rev. A **19**, 2461 (1979)
- [350] Б.А. Дубровин, С.П. Новиков, ЖЭТФ **79**, 1006 (1980)
- [351] В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Квантовая электродинамика, М., Наука (1980).
- [352] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Статистическая физика, часть 2, М., Наука (1978).