

УДК 537.312.62

© 1990

ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА КВАЗИОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ МЯГКОЙ ФОНОННОЙ МОДОЙ (АНОМАЛИЕЙ КОНА)

Е. Н. Долгов, Е. С. Никомаров

Рассмотрены токовые состояния, возникающие в квазиодномерных соединениях с сильной зависимостью амплитуды рассеяния от передачи импульса, обусловленной мягкой модой. Показано, что поправка к функции распределения может оказаться знакопеременной. Рассмотрены критическое поведение проводимости и магнитосопротивление.

Несмотря на значительный интерес, вызываемый квазиодномерными соединениями в течение довольно длительного времени, на их кинетические свойства все еще не существует единой точки зрения. Ситуация, конечно, осложняется тем, что эти свойства нельзя отделить от термодинамических свойств, которые также весьма сложны из-за близости изучаемых систем к различным фазовым переходам (структурному, или переходу Пайерлса, сверхпроводящему, антиферромагнитному).

В работе одного из авторов [1] была предложена интерпретация кинетических свойств квазиодномерных соединений в терминах групп носителей, приобретающих под воздействием электрического поля существенно разные дрейфовые скорости. Необходимым условием образования таких групп является достаточно сильная зависимость амплитуды рассеяния электрона от величины передаваемого импульса, имеющая место при наличии в системе мягкой фононной моды, являющейся предвестницей структурного фазового перехода. С формальной точки зрения образованию групп носителей отвечает сильная зависимость функции распределения от расстояния от поверхности Ферми (ПФ), причем особенности проводимости обусловлены в основном сложным перераспределением носителей по различным группам.

Если исходить из вариационного принципа [2], согласно которому в неравновесном состоянии реализуется минимум производства энтропии, то предлагаемая картина может быть наглядно объяснена тем, что носители эффективно стремятся покинуть области наиболее сильного рассеяния, чтобы уменьшить производство энтропии. Другими словами, транспортные свойства будут определяться взаимодействием носителей с существенно отличающимися подвижностями.

В работе [1] не было проведено количественное исследование из-за определенных вычислительных трудностей, которые отражают сложность физической ситуации. В данной работе мы приводим результаты такого исследования с использованием ЭВМ. Перед тем как перейти к фактически изложению, уместно сделать некоторые замечания.

Во-первых, мы следуем работе [3] во всем, что касается условий применимости кинетического уравнения в квазиодномерных системах. Кроме того, как будет ясно из дальнейшего, многие выводы [3] остаются в силе при умеренной зависимости амплитуды рассеяния «назад».

Во-вторых, мы пренебрегаем в последующих вычислениях поперечной зависимостью амплитуды рассеяния, что эквивалентно пренебрежению поперечной дисперсией моды. Как уже упоминалось в [1], это обстоятельство не препятствует рассмотрению окрестности структурного фазового перехода из-за того, что кинетическая задача не сводится к задаче о наиболее смягченных фононах, определяющих термодинамику фазового перехода. Для кинетики существенны все фононы, эффективно взаимодействующие с электронами, поэтому введение небольшой (по сравнению с продольной) поперечной дисперсии не изменит существенно наши результаты, но сделает применимыми теории типа Гинзбурга—Ландау [3], позволяющие рассматривать окрестность точки перехода. Конечно, возможны и ситуации, в которых наиболее существенна поперечная дисперсия.

В разделе 1 будут изучены различные токовые состояния (далее называемые квазиодномерными токовыми состояниями) на основе вариационного принципа, а в разделе 2 в качестве примера проявления свойств этих состояний будет рассмотрено магнитосопротивление таких систем. Кратко полученные результаты можно суммировать так: поправка к функции распределения будет весьма сложной и знакопеременной, поэтому при включении магнитного поля возникнет сильное «смешивание» носителей, очевидным образом приводящее к большому магнитосопротивлению даже при наличии в системе одних лишь открытых орбит.

Нам кажется весьма существенным тот факт, что даже в нашей упрощенной модели результаты сильно отличаются от обычного τ -приближения. Количественной мерой этого отличия может служить величина σ/σ_1 , где σ_1 — проводимость, которая получилась бы в результате расчета с одной пробной функцией $\Phi=1$. Эта величина всюду существенно больше 1, а ее максимальное значение ≈ 20 . Несмотря на условность этой оценки, которая не всегда коррелирует с величиной магнитосопротивления, она, возможно, поможет преодолеть определенные трудности, связанные с оценками кинетических коэффициентов в квазиодномерных соединениях. Не останавливаясь на этом, отошлем читателя к работе [4] (оценки для семейства трихалькогенидов MX_3), а также к обзору [5].

Смягчение определенных фононных мод, являющееся общим для одномерной физики явлением, очевидным образом увеличивает амплитуду рассеяния и уменьшает значение проводимости, тогда как обнаруженный нами эффект перераспределения носителей увеличивает проводимость по сравнению с обычным τ -приближением. Иначе говоря, наши результаты показывают, что уменьшение проводимости при смягчении моды может быть не слишком большим. Поэтому проводимости реальных (даже родственных) квазиодномерных соединений отличаются довольно сильно. Кроме того, мы вправе ожидать, что квазиодномерные токовые состояния реализуются и в соединениях, не проявляющих структурного перехода, но обладающих мягкими модами, как это предположили авторы [6] для интерпретации свойств $TaSe_3$.

Таким образом, нам представляется вполне разумной интерпретация кинетических свойств различных классов квазиодномерных соединений в терминах специфических квазиодномерных токовых состояний, возникающих в системах с мягкой фононной модой. Этому должно предшествовать решение термодинамической задачи, которое определит детали нового фононного спектра, зависимости различных параметров от магнитного поля (для изучения гальваномагнитных явлений) и т. д. Очевидно, что такое исследование даже в простых моделях весьма затруднительно и требует применения ЭВМ. Все вышесказанное относится и к низкотемпературной фазе. На наш взгляд, главная трудность состоит в том, что невозможно предложить прямой эксперимент, который подтвердил бы или опроверг предлагаемую интерпретацию, поскольку, образно выражаясь, на трудности, связанные с термодинамическим описанием, накладывается еще один «слой» трудностей кинетического описания.

1. Проводимость. Квазидвумерные токовые состояния

Как уже говорилось, мы будем пользоваться вариационным принципом [2]. В обозначениях [2] кинетическое уравнение

$$e v_p E \left(- \frac{\partial n_1(\mathbf{p})}{\partial \varepsilon} \right)_p = I_{\sigma, p h}(\Phi), \quad \delta n_p = \left(- \frac{\partial n_0(\mathbf{p})}{\partial \varepsilon} \right)_p \Phi(\mathbf{p}) \quad (1)$$

запишется в виде

$$X(\mathbf{p}) = \hat{P} \Phi(\mathbf{p}). \quad (2)$$

Если выбрать базис из пробных функций Φ_i , а функцию распределения искать в виде

$$\Phi(\mathbf{p}) = \sum_i \eta_i \Phi_i(\mathbf{p}), \quad (3)$$

то вариационный принцип дает систему линейных уравнений для коэффициентов η_i

$$X_i = \sum_j P_{ij} \eta_j, \quad (4)$$

а величины P_{ij} , X_i определяются следующим образом

$$P_{ij} = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \Phi_i(\mathbf{p}) \hat{P} \Phi_j(\mathbf{p}), \quad X_i = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} X(\mathbf{p}) \Phi_i(\mathbf{p}). \quad (5)$$

Проводимость определяется по величинам η_i (в величинах X_i надо положить $E=1$)

$$\sigma = \sum_i \eta_i X_i. \quad (6)$$

Мы выберем базис из пяти нечетных по сторонам ПФ функций:

$$t^3, t^4, 1, t \cos^3(\pi p_{\perp}/b), t^3 \cos(\pi p_{\perp}/b). \quad (7)$$

Здесь t — продольный импульс, отсчитанный от фиксированного сечения зоны Бриллюэна, p_{\perp} — поперечный импульс (мы рассматриваем двумерные электроны), $2b$ — поперечный размер ПФ.

Столь сложный набор функций отражает сложность задачи, из последнего будет ясно, что все функции в нем существенны. Наиболее важен с физической точки зрения вопрос о выборе эффективной амплитуды рассеяния. Напомним, что мы пренебрегаем неупругостью рассеяния, а структурный фактор моды $T/\omega^2(\mathbf{k})$ аппроксимируем параболой [1]. Электронный спектр возьмем в приближении сильной связи: $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{p}) = \pm v_F t - \eta(p_{\perp})$, $\eta(p_{\perp}) = \eta_0 \cos(\pi p_{\perp}/b)$. Знаки « \pm » обозначают две стороны ПФ, а рассеяние на мягкой моде (рассеяние «назад») переводит частицы с одной стороны на другую. Сделав сдвиг переменной интегрирования по t (что соответствует переходу к изоэнергетической поверхности), можно получить симметричные по $c_1 = \cos(\pi p_{\perp}/b)$ и $c_2 = \cos[\pi(p_{\perp} - k_{\perp})/b]$ выражения. Поэтому подынтегральное выражение в интеграле, выражающем производство энтропии, есть (для простоты оставлены две функции)

$$T \frac{v_F}{4T \operatorname{ch}^2\left(\frac{v_F t}{2T}\right)} \times \frac{\left\{ \eta_1 \left[\left(t + \frac{\eta_0}{v_F} c_1 \right)^2 + \left(t + \frac{\eta_0}{v_F} c_2 \right)^2 \right] + \eta_2 \left[\left(t + \frac{\eta_0}{v_F} c_1 \right)^4 + \left(t + \frac{\eta_0}{v_F} c_2 \right)^4 \right] \right\}^2}{\left[\ln\left(\frac{T}{T_p}\right) + \frac{1}{A(T)} \left(\frac{v_F(t + \eta_0(c_1 + c_2)/v_F)}{\eta_0} \right)^2 \right]}. \quad (8)$$

Коэффициент $A(T)$ — интерполяционный параметр, описывающий изменение амплитуды рассеяния с ростом передачи продольного импульса. В области температур ниже дебаевской эта зависимость может быть очень сильной (экспоненциально падающей), чему отвечает достаточно быстрое убывание $A(T)$ с понижением температуры. Логарифмический закон для амплитуды рассеяния повторяет тот же закон для зависимости $\tilde{\omega}^2(k)$ [1, 3]. В (8) не войдет малая константа электрон-фононного взаимодействия из-за того, что $\tilde{\omega}^2 \sim \omega_{\text{D}}^2 \sigma_{ph}^2$, а поперечной дисперсией пренебрежено. Однако этот проигрыш в проводимости может быть компенсирован эффектом перераспределения носителей, как объяснялось во Введении. Условие применимости кинетического уравнения $1/\tau_{e,ph} \tau_{10} \ll 1$ выполняется лишь численно в области достаточно низких температур.

Сложность физической ситуации с формальной точки зрения иллюстрируется тем, что выражение [8] представляет собой частное от деле-

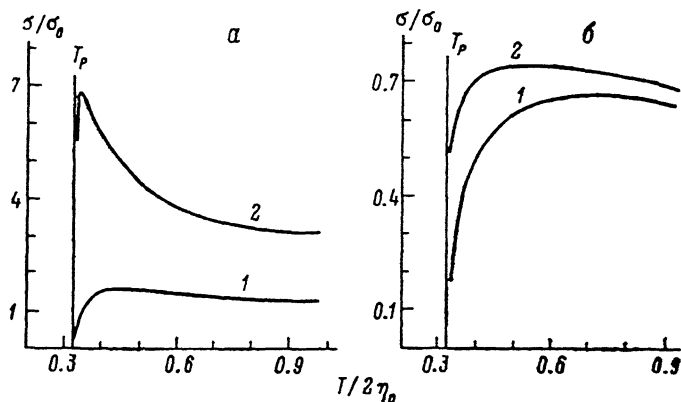


Рис. 1. Зависимость проводимости от температуры.

1 — получены в τ -приближении, 2 — результаты настоящей работы. А_α: а — 0.25, б — 4. Резкий асимметричный максимум схож с кривыми, приведенными в [7]. ($\sigma_0 \sim ne^2/m^*T_p$).

ния полинома 8-го порядка на полином 2-го. Вычисление частного и остатка (а потом их интегрирование и решение системы линейных уравнений) в случае достаточно большого числа пробных функций требует применения ЭВМ. Подробности этих вычислений приведены в Приложении.

Коэффициенты в (8) таковы, что при интегрировании по t и усреднении по p_L , k_L получится квадратичная форма ($P_{11}\eta_1^2 + 2P_{12}\eta_1\eta_2 + P_{22}\eta_2^2 + \dots$), определяющая величины P_{ij} . Эти матричные элементы сильно отличаются друг от друга по порядку величины, что отражает сложный характер кинетической задачи из-за вовлеченности носителей с весьма разными подвижностями. Несмотря на то что в нашей упрощенной модели смягчается большой фазовый объем фононов, можно получить металлический закон проводимости (σ растет с понижением T), взяв достаточно быстро убывающую функцию $A(T)$. Мы попытаемся охватить возможно более широкую область температур.

Считая для определенности $\eta_0 \approx 200$ К, возьмем для температуры перехода $T_p = \eta_0/6$, что примерно соответствует температурам переходов в органических соединениях типа TTF-TCNQ. В этой высокотемпературной области $A(T)$ не может быть слишком малой, а нас интересует в основном критическое поведение, поскольку при нашей постановке задачи температурный закон проводимости может быть любым. Если зафиксировать температурный закон убывания $f(T) = (1 + \varepsilon (\eta_0/2T)^3)^{-1}$, $A(T) = A_0 f(T)$, и менять лишь коэффициент A_0 , то при уменьшении A_0 растет значение проводимости в каждой точке, увеличивается отношение σ/σ_1 (см. Введение), а максимум проводимости вблизи температуры перехода становится все более резким (рис. 1) ($\varepsilon = 0.1 \div 0.3$).

Максимум проводимости вблизи T_p можно получить уже в простом τ -приближении [3]. Соответствующие кривые приведены на рис. 1; их отличие от найденных нами очень велико. С физической точки зрения максимум в τ -приближении обусловлен очевидной конкуренцией между процессами уменьшения чисел заполнения фононов и роста амплитуды рассеяния на мягких фононах при $T \rightarrow T_p$, однако этот максимум мало отличается от плато, тогда как получающийся у нас максимум достаточно высокий и резкий, как в реальных соединениях. Он вызван сложным перераспределением носителей, которое не может быть сведено к обычному τ -приближению, о чем свидетельствует большое значение параметра $\sigma/\sigma_1 = 10 \div 20$.

В работе [1] было сделано качественное замечание о возможности такого происхождения максимума, а предложенная интерпретация со-

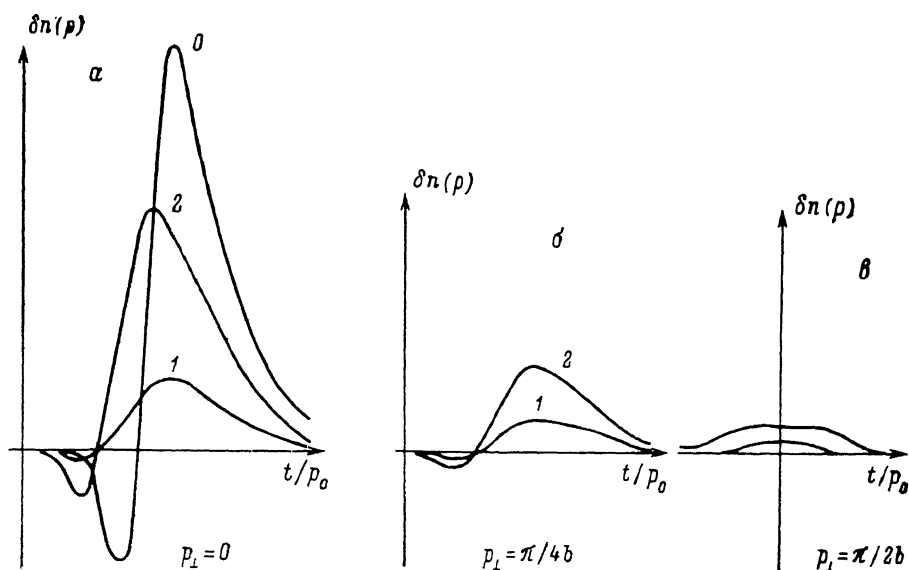


Рис. 2. График $\delta n(t, p_{\perp})$ (t — продольный импульс) при разных значениях поперечного импульса p_{\perp} и A_0 .

A_0 : 1 — 1, 2 — 0.25. а-в — $p_{\perp} = 0, \pi/4b, \pi/2b$; а (кривая 0) — $A_0 = 1, T_p = \tau_0/14$. ($p_0 = \tau_0/v_F$).

стояла в том, что вблизи T_p реализуется специфическое токовое состояние с малым производством энтропии, поскольку именно в окрестности перехода амплитуда рассеяния наиболее сильно зависит от передачи импульса. По аналогии с предыдущим рассуждением в духе τ -приближения можно утверждать, что существует конкуренция между процессами, которые стремятся соответственно уменьшить и увеличить эффективную зависимость амплитуды рассеяния от передачи импульса. Например, уже простое понижение температуры уменьшает эту зависимость, препятствуя носителям покидать области наиболее сильного рассеяния с большим производством энтропии.

Для описания функции распределения, которая реализует квазиодномерные токовые состояния, целесообразно рассматривать сечения зоны Бриллюэна плоскостями с фиксированным значением поперечного импульса. В случае обычных («квазитрехмерных») токовых состояний в любом сечении возникнут одинаковые функции, пропорциональные фермиевскому фактору ($-\delta n_0/\delta \epsilon$), но сдвинутые друг относительно друга из-за «гофрировки» ПФ, что отвечает ситуации, в которой все носители приобретают одинаковую дрейфовую скорость. Если следить за изменением δn при развитии в системе мягкой моды, то (при фиксированной температуре, которую мы для наглядности выберем близкой к T_p) следует

исследовать зависимость от параметра A_0 . При убывании A_0 носители стремятся покинуть области наибольшего смягчения и перейти в области с большими подвижностями. Достаточно привести 3 сечения со значениями p_1 соответственно $0, \pi/4b, \pi/2b$ (рис. 2). Наиболее сильно этот эффект выражен при $p_1=0$; здесь искажение «горба» наибольшее. При $p_1=\pi/4b$ «горб» становится меньше, меньше становится и его асимметрия. Наконец, при $p_1=\pi/2b$ высота симметричного «горба» наименьшая.

Дальнейшее уменьшение A (T) приводит к тому, что поправка к функции распределения становится знакопеременной (рис. 2). Причина такого поведения достаточно очевидна — при быстром изменении амплитуды рассеяния выражения для производства энтропии и для тока становятся в определенном смысле независимыми, поэтому надлежащим выбором знакопеременной $\delta n(\mathbf{p})$ уменьшение производства энтропии можно сделать более существенным, чем уменьшение тока [2].

Вернемся теперь к вопросу о критическом поведении сопротивления или о максимуме проводимости. Нетривиальность этого поведения заложена уже в самом вариационном принципе, в котором фигурируют все носители, а не только те, которые непосредственно взаимодействуют с наиболее мягкими фононами. Наша простая интерполяционная модель демонстрирует весьма сложное поведение функции распределения (рис. 2). Хотя общий вид $\delta n(\mathbf{p})$ аналогичен приведенному ранее, перестройка токового состояния очень велика, велик и разброс дрейфовых скоростей, приобретаемых носителями.

Любопытно, что функция распределения ведет себя аналогичным образом в широком интервале температур. Похожим будет и критическое поведение для низкотемпературных фазовых переходов. Такая универсальность, скорее всего, связана с выбранным нами единым видом амплитуды рассеяния.

2. Гальваноманнитные явления

Вариационный принцип может быть получен и в магнитном поле, если требовать стационарности производства энтропии [2]; при этом базис пробных функций должен быть дополнен функциями, не дающими вклада в продольный ток. Мы пока не пытаемся описать эффект Холла, а лишь хотим описать вызванное «смешиванием» носителей изменение в продольной проводимости. В трехмерном случае (τ -приближение) достаточно взять две функции $\Phi_1 = \mathbf{u}\mathbf{p}$, $\Phi_2 = [\mathbf{u} \times \mathbf{p}] \mathbf{H}/H$, первая из них описывает проводимость, вторая — эффект Холла. Обобщение (4) в магнитном поле дает

$$X_i = \sum_j P_{ij} \eta_j + \sum_j M_{ij} \eta_j,$$

$$M_{ij} \equiv - \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \Phi_i(\mathbf{p}) \frac{e}{c} \left(- \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right)_p [\mathbf{v}_p \times \mathbf{H}] \frac{\partial \Phi_j(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}. \quad (9)$$

Функции Φ_1 и Φ_2 связаны лишь посредством оператора M . Легко видеть, что из (9) получаются обычные выражения для тензора проводимости [8] в изотропном случае. Случай замкнутых трехмерных орбит в определенном смысле наиболее прост [8], поскольку магнитное поле не меняет порядка величины сопротивления. Это означает, что новых механизмов диссипации не возникает. Эффект вызван либо перераспределением носителей по ПФ из-за зависимости параметров рассеяния (например, транспортного сечения) от углов, либо наличием носителей разных знаков. Иначе говоря, магнитосопротивление является мерой отличия разных групп носителей по какому-либо параметру (времени релаксации, знаку заряда и т. п.). Поэтому в изотропном случае в τ -приближении сопротивление не меняется при включении магнитного поля.

Обнаруженный в работе эффект «смешивания» носителей может быть легко интерпретирован в τ -приближении как образование разных групп носителей при возникновении описанного выше квазиодномерного токового состояния. Однако на самом деле эффект сильнее, чем можно было бы ожидать из τ -приближения. Причина состоит в том, что поперечное магнитное поле очень сильно нарушает токовое состояние, прежде всего в области больших подвижностей.

Для описания гальваномагнитных состояний необходимо по аналогии с трехмерным случаем добавить аналогичные холловским функции, которые мы для краткости будем называть бестоковыми. Естественно предположить, что этот набор тоже должен быть достаточно большим и сложным, как и (7). Из-за определенных вычислительных трудностей мы пока не будем описывать эффект Холла, а бестоковые функции (функции 6—8) возьмем четными по сторонам ПФ

$$t \sin(\pi p_{\perp}/b), t^3 \sin(\pi p_{\perp}/b), t^5 \sin^3(\pi p_{\perp}/b). \quad (10)$$

Эти функции аналогичны холловским, но их вклад в поперечную составляющую тока равен 0 из-за нечетности по t . Не подлежит сомнению, что квазиодномерные токовые состояния проявятся и в поперечной проводимости, и в эффекте Холла, однако мы ограничимся лишь изучением продольной проводимости.

Мы будем называть бестоковые состояния также холловскими, поскольку отсутствие поперечного вклада в ток является приближенным. Наглядная картина магнетотранспорта с точки зрения вариационного принципа такова. При наложении магнитного поля в системе возникает холловское состояние, не дающее вклада в продольный ток, но дающее вклад в производство энтропии. Это значит, что матрица P_{ij} распадается на два диагональных блока — 5×5 и 3×3 , остальные элементы равны нулю. Хотя движение носителей в магнитном поле бездиссипативно, магнитное поле связывает токовое и холловское состояния, матричные элементы M_{ij} . Благодаря этому возникает эффект Холла и магнетосопротивление.

Как уже отмечалось (и наши предварительные результаты подтверждают это), холловское состояние тоже реализуется достаточно сложной знакопеременной функцией распределения. Поэтому в целом картина магнетотранспорта представляется весьма сложной из-за взаимодействия двух квазиодномерных токовых состояний. Мы ограничимся демонстрацией большого магнетосопротивления при малых H , обусловленного вкладом в проводимость носителей с большими подвижностями, а также приведем кривые $\sigma(H)$ и функции распределения.

Вычисление матричных элементов M_{ij} очевидно, а элементы P_{ij} получаются аналогично (8), но выражение в числителе будет

$$\left\{ \eta_6 \left[\left(t + \frac{\eta_0}{v_F} c_1 \right) \sin(\pi p_{\perp}/b) - \left(t + \frac{\eta_0}{v_F} c_2 \right) \sin(\pi(p_{\perp} - k_{\perp})/b) \right] + \right. \\ \left. + \eta_7 \left[\left(t + \frac{\eta_0}{v_F} c_1 \right)^3 \sin \dots \right]^2 \right\}.$$

Разница в знаках связана с различной четностью функций по сторонам ПФ и с нашим выбором потенциала рассеяния «назад».

Типичный вид зависимости $\sigma(H)$ приведен на рис. 3. Такая падающая зависимость имеет универсальный вид в широкой области температур.

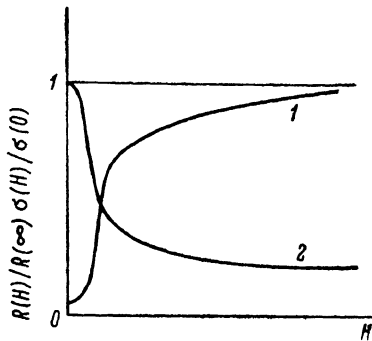


Рис. 3. Типичный вид кривых $\rho(H)$ ($\sigma(H)$).

Максимальное значение магнитного поля соответствует нескольким десяткам T_L . Величина $\rho(H)$ может и не насыщаться при этих полях. 1 — сопротивление, 2 — проводимость.

Для всех кривых характерен быстрый спад при малых H и выход на режим насыщения при больших полях. Однако ширина и высота максимума $\sigma(H)$ сильно зависят от температуры и величины A_0 . Как и следовало ожидать, величина магнитосопротивления очень чувствительна к перестройке токового состояния, описанной в предыдущем разделе. Поэтому имеется определенная корреляция между положением максимума проводимости и величиной магнитосопротивления, хотя эта связь не столь тривиальна и однозначна.

Для количественного исследования при малых H мы введем величину $\alpha(T)$, определенную следующим образом

$$\rho(H, T) = \rho(T) [1 + \alpha(T) (\Omega_H \tau(T))^2], \quad (11)$$

где Ω_H — циклотронная частота движения электрона по открытой орбите ($\Omega_H = \pi e H v_F / bc$). В обычной трехмерной ситуации $\alpha \sim 1$, а для квазиодно-

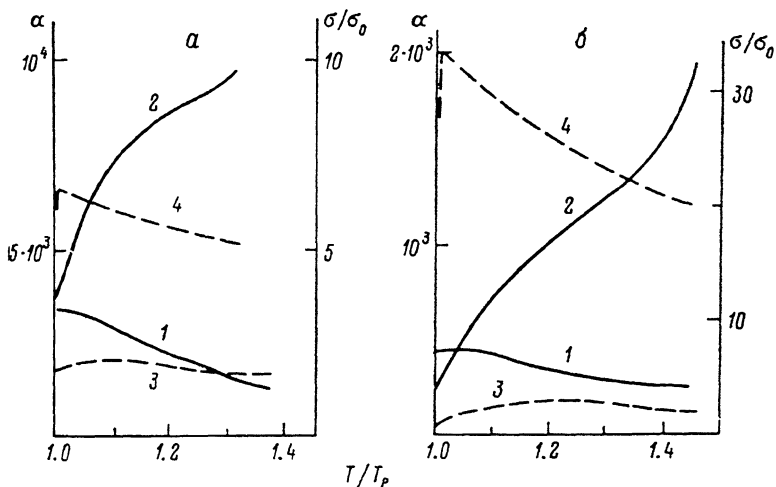


Рис. 4. Сравнительный вид кривых проводимости и магнитосопротивления.

Сплошные кривые — магнитосопротивление $\alpha(T)$, штриховые — проводимость $\sigma(T)$. $a - T_p = \eta_0/6$. 3 и 1 — проводимость и магнитосопротивление для $A_0 = 1$. 4 и 2 — то же для $A_0 = 0.25$. $b - T_p = \eta_0/14$. $a -$ для 3 и 1 $A_0 = 2.1$. Для проводимости отложено $10^4 \sigma(T)$. Для 4 и 2 $A_0 = 0.1$. Очевидна аналогия между рисунками a и b .

мерного металла без мягкой моды (обычное τ -приближение) величина $\alpha \sim (t_{\perp}/\varepsilon_F)^2 \ll 1$, где $t_{\perp} \sim \eta_0$ — поперечный интеграл перекрытия или величина «гофрировки» почти плоских ПФ. Величина $\tau(T)$ определяется из элементарного газокINETического соотношения $\sigma(T) = ne^2 \tau(T)/m^*$. Такое стандартное представление данных далеко не бесспорно в ситуации с заметными отличиями от τ -приближения. На рис. 4 приведены некоторые кривые $\alpha(T)$. Сама величина $\alpha(T)$ может быть очень большой ($10^2 - 10^3$), если измерять ее в очень слабых полях.

Большие величины магнитосопротивления при высоких температурах в «классических» квазиодномерных соединениях типа TTF-TCNQ известны уже давно, однако подробное исследование гальваномангнитных свойств в окрестности максимума проводимости не проводилось, насколько известно авторам. Обычно большое магнитосопротивление в двухцепочечных соединениях типа TTF-TCNQ приписывается наличию носителей разных знаков, а в соединениях типа TMTS F_2X — разного рода флуктуационным эффектам [5]. Для существования предсказанного нами эффекта безразлично, каким образом реализуется сильная зависимость амплитуды рассеяния. Поэтому наличие сильного магнитосопротивления (или его отсутствие) не может служить предвестником того или иного фазового перехода.

Обобщая результаты расчетов, можно заключить, что от параметра A_0 очень сильно зависят как величина магнитосопротивления, так и вид

кривой $\alpha(T)$ (рис. 4). Величина $\alpha(T)$ может быть очень большой в широком интервале температур, но меняется весьма заметно при $T \rightarrow T_p$. Критическое поведение $\alpha(T)$, как указывалось выше, весьма разнообразно (рис. 4). Хотя вид функций распределения $\delta n(t, p_{\perp})$ в значительной степени универсален, величина $\alpha(T)$, обусловленная различием подвижностей разных групп носителей, очень чувствительна к деталям поведения этих функций. Например, рост положительного «выброса» при $p_{\perp}=0$ и его сужение в продольном и в поперечном направлениях отвечает доминированию в проводимости соответствующей группы носителей, что приводит к уменьшению α . Такое поведение реализуется наиболее часто при $T \rightarrow T_p$. Исходя из вида функций распределения, нетрудно понять и другие особенности функций $\alpha(T)$. Во всяком случае, здесь нет никакого противоречия с универсальностью функций распределения.

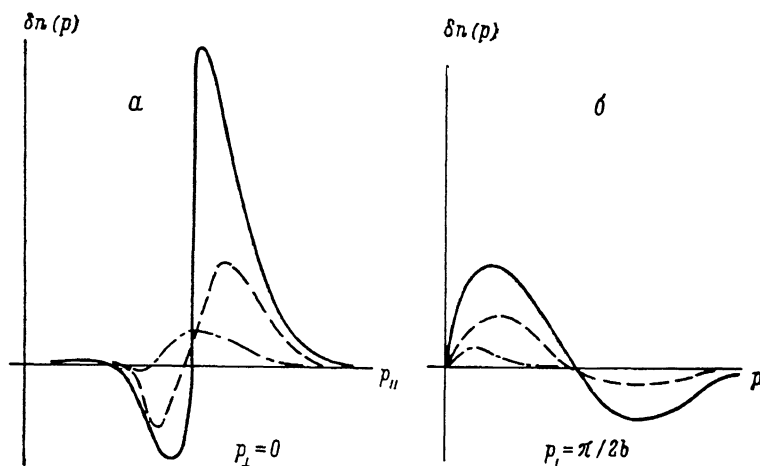


Рис. 5. Функция распределения в магнитном поле.

а — изменение токового состояния. Сплошная кривая — $H=0$, штриховые — токовые состояния при включении магнитного поля. Столь сильное воздействие оказывает поле величиной в несколько Тл. **б** — функция распределения, описывающая холловское (четное по сторонам ПФ) состояние. Сплошная кривая — $H \sim 0.1 - 1$ Тл, штриховые **а** и **б** отвечают одинаковым магнитным полям. В обоих случаях магнитное поле сильно «сглаживает» функцию распределения.

Наиболее сильно магнитное поле изменяет функцию распределения при малых p_{\perp} , т. е. там, где перестройка токового состояния максимальна. Магнитное поле стремится «сплющить» функцию распределения, увеличивая вклад, создаваемый носителями с большими поперечными импульсами (рис. 5). Такое поведение вполне согласуется с нашей интерпретацией в терминах «смешивания» носителей, поскольку «смешивание» наиболее сильно в областях с большим изменением функций распределения. Типичный вид холловских («бестоковых») функций приведен на рис. 5, из которого видно, что холловское состояние тоже реализуется посредством знакопеременной функции распределения.

Наиболее интересным представляется вопрос о применимости наших представлений в области низких температур для описания реальных квазиодномерных соединений. В частности, открытым остается вопрос о возможности немонотонной зависимости $\sigma(H)$. Нам кажется, что в столь простой модели в пренебрежении поперечной зависимостью амплитуды рассеяния и с универсальной функцией распределения ответ должен быть отрицательным. Однако в принципе нельзя исключить возможности такой ситуации, в которой магнитное поле меняло бы вид функции распределения и приводило к немонотонности $\sigma(H)$.

Наконец, обсудим весьма интересный и важный вопрос о насыщении сопротивления в сильном магнитном поле. В случае замкнутых трехмерных орбит движение по циклотронной орбите приводит фактически к некоторому усреднению времени релаксации носителя по траектории. Поскольку в большинстве случаев изменение времени релаксации срав-

нимо с самим его значением ($|\delta\tau/\tau| \sim 1$), то насыщение наступит при $\Omega_H \tau \sim 1$, т. е. когда циклотронная частота станет сравнимой с временем релаксации. В рассматриваемой нами ситуации подобного рода оценку привести значительно труднее, поскольку изменение подвижности носителей на орбите очень велико. Полному «смешиванию» носителей отвечает значение проводимости σ_1 (см. Введение), соответствующее ситуации, в которой все возможные подвижности входят с одинаковым весом. При циклотронном движении подобная ситуация реализовалась бы лишь в столь сильном магнитном поле, что $\Omega_H \tau_{\min} \gg 1$, где τ_{\min} — некоторое время релаксации в области наиболее сильного рассеяния. Оценить это время трудно, так как нужно учесть относительный вклад участков с сильным рассеянием, причем сама величина τ меняется на орбите на несколько порядков величины. Иначе говоря, электрон должен «пройти» участки сильного рассеяния столь быстро, чтобы избежать там столкновений. При этом проводимость будет стремиться к σ_1 и наступит режим насыщения. Нельзя, однако, исключить ситуации, в которой τ_{\min} будет столь малым, что фактически режим насыщения не наступит.

Наши данные даже в полях в несколько десятков Тл дают значения проводимости большие, чем σ_1 . При этом в низкотемпературной области $T_F = \gamma_0/14$, $T \rightarrow T_F$ имеется область с отсутствием насыщения (рис. 3). Эти кривые напоминают результаты работы [9].

Кратко предложенное выше объяснение можно сформулировать так: в некоторых участках ПФ имеется очень сильное рассеяние электронов, которое может не проявляться в проводимости, но проявится в магнитосопротивлении. Нам кажется, что этот эффект может служить наиболее прямым свидетельством в пользу справедливости предлагаемой физической картины.

3. Обсуждение результатов

Основным результатом работы является построенное с помощью численного счета на ЭВМ квазидномерное токовое состояние, реализуемое посредством сложной знакопеременной функции распределения. Это состояние возникает при наличии в системе сильной зависимости амплитуды рассеяния носителей от передачи импульса. Транспортные характеристики системы существенно отличаются от характеристик в обычном τ -приближении даже в рассмотренном простейшем случае зависимости амплитуды рассеяния лишь от продольного импульса.

Одним из проявлений квазидномерных токовых состояний мог бы быть резкий максимум проводимости вблизи структурного фазового перехода. Столь резкий максимум нельзя получить в τ -приближении даже в случае «одномерных» фононов без поперечной дисперсии.

Квазидномерные токовые состояния могут также приводить к большому магнитосопротивлению в области достаточно высоких температур (выше точек всевозможных фазовых переходов), хотя циклотронные орбиты носителей открыты. Такая интерпретация гальваномагнитных явлений является альтернативной, поскольку она в значительной степени чисто кинетическая. Мы уже подчеркивали условность разделения эффектов на термодинамические и кинетические в соединениях, где амплитуда рассеяния является сложной функцией всех взаимодействий, приводящих к фазовым переходам, и поэтому сильно зависит от магнитного поля. Тем не менее в нашей модели термин «кинетический» вполне уместен, поскольку гальваномагнитные эффекты будут существовать и при «замороженной» мягкой моде. Однако первопричиной всех кинетических эффектов, обусловленных мягкой модой, является близость системы к структурной неустойчивости, т. е. термодинамический фактор.

Наш основной результат применительно к гальваномагнитным явлениям состоит в том, что сильная зависимость сопротивления от поперечного магнитного поля обусловлена «смешиванием» носителей при движении по циклотронным орбитам. Параметры этой зависимости очень сильно

зависят от деталей функции распределения и, скорее всего, не могут быть вычислены в общем виде.

По-видимому, достаточно прямым свидетельством в пользу нашей модели может служить тот факт, что насыщение сопротивления происходит лишь при аномально больших значениях магнитного поля [9]. Мы считаем, что в этом проявляется существование участков ПФ с аномально сильным рассеянием носителей, которые не проявляются (согласно вариационному принципу) в обычной проводимости, поскольку носители эффективно стремятся покинуть эти участки. Однако при включении магнитного поля носители будут вынуждены проводить часть времени движения по орбите в этих участках, что и приведет к огромным полям насыщения.

Мы не смогли выяснить вопрос о возможной немонотонности зависимости $\sigma(H)$, т. е. о вкладе предложенного кинетического механизма в осцилляции типа Шубникова—де Гааза. Дальнейшее исследование этого вопроса в рамках более сложных моделей представляется весьма интересным.

Просматривая предыдущие разделы, легко убедиться в том, что все рассмотренные нами эффекты определяются фактически лишь формой электронных и фононных спектров. Квазиодномерная специфика заключена в параметрах этих спектров. Кроме того, важен еще вопрос о применимости кинетического уравнения. Мы кратко обсудим эти вопросы.

«Затравочный» фононный спектр вблизи $k = (\pm 2p_F, 0)$ имеет дисперсию

$$\omega_0^2(k) = \omega_0^2(2p_F, 0) [1 + B(k_{\perp}/k_{0\perp})^2], \quad (k_{\perp} \ll k_{0\perp}). \quad (12)$$

Новый спектр фононов определяется взаимодействием с электронами проводимости

$$\tilde{\omega}^2(k) = g_{ph}^2 \omega_0^2 [\ln(T/T_P) + f(\delta v_F/T)] + \omega_0^2 B(k_{\perp}/k_{0\perp})^2, \quad (13)$$

где $\omega_0^2 \equiv \omega_0^2(2p_F, 0)$, $\delta = k_{\parallel} - 2p_F$, g_{ph}^2 — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия, которая входит в высокотемпературное время релаксации электронов на фононах («затравочных») и в определение температуры пайерлсовского перехода

$$1/\tau_{e, ph} = 2\pi g_{ph}^2 T, \quad T_P \propto \varepsilon_F \exp(-1/g_{ph}^2). \quad (14)$$

Оценки g_{ph}^2 из (14) обычно дают лишь численную малость $g_{ph}^2 \sim 1/4 - 1/5$. Результаты нашей работы свидетельствуют о малой достоверности стандартных газокинетических оценок даже в высокотемпературной области при наличии в системе мягких мод. Поэтому мы будем считать взаимодействие сколь угодно слабым.

Выражение (13) в основном сохраняет свой вид и с учетом туннельных эффектов. Как правило, T_P сравнимо с характерными фононными частотами $\omega_0 \sim 50 - 100$ К. Оценки туннельных интегралов дают $t_{\perp} \sim 100 - 300$ К. Стандартная оценка критических флуктуаций дает условие применимости модели вблизи точки перехода T_P

$$t = |\Delta T/T_P| > g_{ph}^2/B^2. \quad (15)$$

Как известно, в случае трехмерных ПФ условием применимости кинетического уравнения является условие $1/\tau_{e, ph} \varepsilon_F \ll 1$. В квазиодномерном случае это условие принимает вид

$$1/\tau_{e, ph} t_{\perp} \ll 1, \quad (16)$$

что при $1/\tau_{e, ph} \sim g_{ph}^2 T$ равносильно $g_{ph}^2 (T/t_{\perp}) \ll 1$.

Мы работаем в так называемой «широкой» области температур $\omega_0 g_{ph} \leq T \leq \omega_0$, считая g_{ph}^2 малой. Далее, мы считаем достаточно большой величину B ($B \sim 1$), что позволяет рассматривать окрестность температуры перехода. С другой стороны, условие малости флуктуаций (15) ограничивает лишь фазовый объем наиболее мягких фононов, тогда как в ки-

нетике существенны все фононы, взаимодействующие с электронами. Поэтому наша упрощенная интерполяционная модель описывает вполне возможную кинетическую ситуацию, в которой определяющую роль играет зависимость амплитуды рассеяния от передачи продольного импульса. Легко видеть, что в рассматриваемой области температур этого можно добиться уже сравнительно небольшим изменением параметров функции $f(z)$ в (13).

Нетрудно убедиться также в том, что из-за смягчения большого фазового объема фононов из условия применимости кинетического уравнения исчезнет $g_{pk}^2 \ll 1$. Оно сможет выполняться лишь в силу малости T/t_{\perp} .

Наконец, обсудим еще роль фононов (или примесей), оставляющих при рассеянии электрон на своей половине ПФ. Роль таких рассеивателей до некоторой степени завуалирована, поскольку главную роль в передаче импульса решетке играет все же рассеяние с передачей большого продольного импульса ($\pm 2p_F$). Вообще говоря, длинноволновые фононы почти всегда требуют отдельного рассмотрения [2] из-за слабости их взаимодействий как с электронами, так и с фононами. Однако главная трудность, скорее всего, связана с так называемым эффектом увлечения фононов, который должен играть очень важную роль в квазиодномерных соединениях [3]. Суть эффекта состоит в том, что небольшой фазовый объем фононов вблизи $|k_{\parallel} \pm 2p_F| \sim T/v_F$ сильно связан с электронами и не может эффективно отдавать свой импульс решетке. Нам кажется, что при учете эффекта увлечения фононов тоже будут реализовываться квазиодномерные токовые состояния, аналогичные рассмотренным выше. При этом вклад длинноволновых фононов может быть весьма существенным, особенно в специфической для квазиодномерных соединений «широкой» области температур, в которой транспортные свойства могут определяться мягкими коновскими фононами и тремя акустическими ветвями.

Мы благодарны А. Б. Константинову за помощь при расчетах на ЭВМ.

П Р И Л О Ж Е Н И Е

Для используемых в работе пробных функций варьируемое выражение представляет собой интеграл вида

$$\iiint dx dp_1 dp_2 P(x, c_1, c_2) / (Q(x, c_1, c_2) \operatorname{ch}^2 x),$$

где P и Q — многочлены

$$Q = \left[x + \frac{1}{2} T(1)(c_1 + c_2) \right]^2 + T(0),$$

а P — квадратичная форма по η_i — вариационным параметрам (см. (8)). С помощью программы на языке аналитических вычислений Reduce многочлен P вычислялся и делился на Q , как многочлен от x . Интегрирование частного не представляет труда, вычислялось той же программой и представлялось в виде $b_{ij} \eta_i \eta_j$. Интеграл от остатка преобразовывался в одномерный с помощью следующих тождеств:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{\operatorname{ch}^2 t} \frac{1}{(t+c)^2 + (2\pi\alpha)^2} = \frac{1}{2\pi^2\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{\left(n + \frac{1}{2} + 2\alpha + \frac{ic}{\pi}\right)^2} + \text{к. с.} \right],$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{\operatorname{ch}^2 t} \frac{(t+c)}{(t+c)^2 + (2\pi\alpha)^2} = \frac{i}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{\left(n + \frac{1}{2} + 2\alpha + \frac{ic}{\pi}\right)^2} - \text{к. с.} \right],$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (d\varphi) \cos^m \varphi \exp(it \cos \varphi) = J_0^{(m)}(t).$$

Здесь $J_0^{(m)}$ — m -я производная нулевой функции Бесселя J_0 .

С помощью этих тождеств выполнялось усреднение по поперечным импульсам. Программа на языке Reduce выдавала аналитические выражения для коэффициентов $a_{i,j\alpha\beta}$, с помощью которых интеграл от остатка P запишется в виде

$$I = \sum_{i,j,\alpha,\beta} a_{i,j\alpha\beta} \bar{\eta}_i \bar{\eta}_j \int_0^{\infty} J_0^{(\alpha)}(By) J_0^{(\beta)}(By) y \exp(-Ay)/(1-e^{-y}) dy, \quad B = T(1)/2\pi,$$

$$A = 1/2 + \sqrt{T(0)}/\pi. \quad (\text{II. 1})$$

Вычисление интеграла вида (II. 1) после этого не представляет труда ввиду его экспоненциальной сходимости. Точность вычисления функций $J_0^\alpha(t)$ и интегралов равнялась 10^{-5} . В результате мы получили матрицу C_{ij} для вариационных уравнений

$$X_i = \sum_j C_{ij} \bar{\eta}_j,$$

которые решались с помощью программы из библиотеки HARWELL. После решения обязательно проводилось вычисление невязок $C_{ij} \bar{\eta}_j - \bar{X}_i$, которые не превышали $10^{-3} \bar{X}_i$. Полное процессорное время, необходимое для построения графика магнитосопротивления от температуры, для заданного значения параметров не превышало 8 мин на ЭВМ ЕС-1065.

Правильность проводимых вычислений контролировалась несколькими тестами. Во-первых, при $T(1) \rightarrow 0$, $\bar{\eta}_j \rightarrow 0$, $j \neq 1$, $\bar{\eta}_1 \rightarrow 1/4$. Во-вторых, при нулевом магнитном поле матрица C_{ij} положительно определена, и это проверялось всегда при ее вычислении. Это условие оказалось достаточно чувствительным. Так, при небольшом изменении таблицы значений только $J_0^{(1)}(t)$ при некоторых значениях температуры матрица C_{ij} теряла положительную определенность. В-третьих, при $T(0) \rightarrow 0$, $T(1) \neq 0$, $\bar{\eta}_3 \rightarrow 0$. Это условие также выполнялось.

Список литературы

- [1] Долгов Е. Н. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 9. С. 23—31.
- [2] Займан Дж. Электроны и фононы. М.: ИЛ, 1962.
- [3] Горьков Л. П., Долгов Е. Н., Лебедь А. Г. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. № 2. С. 613—630.
- [4] Долгов Е. Н. // ФНТ. 1984. Т. 10. № 9. С. 912—921.
- [5] Горьков Л. П. // УФН. 1985. Т. 144. № 3. С. 380—395.
- [6] Долгов Е. Н., Латышев Ю. И., Минакова В. Е. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 11. С. 3472—3474.
- [7] Ed. Devreese J. T., Evrard R. P., van Doren V. E. Highly Conducting One-Dimensional Solids. N. Y.: Plenum Press, 1979. P. 422.
- [8] Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И. Электронная теория металлов. М.: Наука, 1971. 416 с.
- [9] Chaikin P. M., Choi M. Y., Kwak J. F. et al. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 51. N 25. P. 2333—2336.

Институт теоретической физики
им. Л. Д. Ландау АН СССР
Черноголовка
Московская область

Поступило в Редакцию
7 февраля 1989 г.
В окончательной редакции
25 июля 1989 г.