

УДК 537.312.62

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

Е. Н. Долгов

Показано, что токовые состояния, реализующиеся в квазиодномерных системах с сильной зависимостью амплитуды рассеяния от передачи импульса, обусловленной мягкой модой, существенно отличаются от обычных — функция распределения может оказаться знакопеременной. Кратко рассмотрены магнетосопротивление и частотная дисперсия проводимости.

В настоящее время кинетические свойства квазиодномерных соединений представляются весьма противоречивыми, причем недостаточно ясна уже физическая картина при высоких температурах, т. е. выше точек всевозможных фазовых переходов. Не обсуждая экспериментальную ситуацию в этих весьма сложных веществах, сошлемся на работу [1], в которой была предложена простая модель, описывающая кинетику вышеупомянутых соединений в высокотемпературной фазе.

В предлагаемой статье будут продемонстрированы некоторые эффекты, возникающие в квазиодномерной системе в условиях, когда амплитуда рассеяния электрона «назад» ($\Delta p_{\parallel} \approx 2p_F$) сильно зависит от величины передаваемого импульса. Такая ситуация возникает в рамках модели [1] в системе с мягкой фононной модой, являющейся предвестницей структурного фазового перехода. При рассмотрении проводимости удобно пользоваться вариационным принципом, согласно которому в неравновесном состоянии реализуется минимум производства энтропии [2, 3]. Суть дела состоит в том, что в системе с мягкой модой возникает очень сложная знакопеременная функция распределения, так как при быстропеременной амплитуде рассеяния в интеграле столкновений выражения для производства энтропии и тока становятся в определенном смысле независимыми [2] — выбором знакопеременной δn уменьшение производства энтропии будет более существенным, чем уменьшение тока.

Нам кажется, что построение достаточно реалистической функции распределения будет весьма сложной задачей уже из-за наличия большого числа параметров. Поэтому предлагаемая весьма упрощенная модель заслуживает внимания, хотя получение количественных результатов требует определенной вычислительной работы, которую мы оставляем до следующей статьи, а в данной статье мы качественно обсудим некоторые свойства проводимости, очевидные уже при грубом рассмотрении. Такой подход представляется оправданным, если учесть исключительную сложность и многообразие свойств квазиодномерных соединений.

Итак, акцентируя внимание на качественной стороне дела, заметим, что отмеченная выше сложность функции распределения означает, что под воздействием электрического поля разные группы носителей приобретают существенно различные дрейфовые скорости. Напомним, что в нормальных трехмерных металлах изменение функции распределения, вызванное электрическим полем, имеет вид $\delta n(\mathbf{p}) = (-\partial n_0 / \partial \varepsilon) e \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{p})$ (см., например, [4]),

причем функция $I(\rho)$ очень слабо зависит от расстояния от поверхности Ферми (ПФ) и при вычислении проводимости эта зависимость несущественна, хотя, скажем, именно она определяет термоэлектрический коэффициент. Относительная величина поправки в проводимости была бы $\sim (T/\epsilon_F) \ll 1$, что является мерой изменения всех параметров на ширине теплового размытия в импульсном пространстве. Такая ситуация реализуется при низких температурах в области остаточного сопротивления (примесное рассеяние) и при высоких температурах при рассеянии на фононах в пренебрежении неупругостью.

Главное физическое утверждение статьи состоит в том, что в квазиодномерной ситуации функция распределения будет сильно зависеть от расстояния от ПФ. Такое поведение отвечает описанию кинетики в терминах групп носителей, приобретающих в электрическом поле существенно различные скорости, причем зависимость проводимости от температуры, магнитного поля, частоты и т. д. в основном определяется именно сложным перераспределением носителей по различным группам с разными скоростями, что коренным образом отличается от обычного трехмерного поведения металлов.

Вышеупомянутую зависимость функции распределения от расстояния от ПФ легко усмотреть уже из выражения для частоты мягкой фононной моды

$$\bar{\omega}^2(\mathbf{k}) = g_{ph}^2 \omega_0^2 \left[\ln \left(\frac{T}{T_P} \right) + f \left(\frac{(k_{\parallel} - 2p_F)v_F}{T} \right) \right] + \omega_0^2 B \left(\frac{k_{\perp}}{k_{\perp c}} \right)^2, \quad (1)$$

где $\omega_0^2 \equiv \omega_0^2(2p_F, 0)$; $B \sim 1$; $f(z) \geq 1$; g_{ph}^2 — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия ($g_{ph}^2 \ll 1$); T_P — температура фазового перехода Пайерлса. Поскольку эта частота (и соответствующая ей амплитуда рассеяния) существенно изменяется на ширине теплового размытия, то основное утверждение достаточно очевидно, однако истинное распределение носителей будет в известном смысле еще сильнее отличаться от обычного, поскольку эффективно носители стремятся покинуть области наиболее сильного рассеяния, чтобы уменьшить производство энтропии. Изучение свойств, обусловленных сложным взаимодействием разных групп носителей, принадлежащих одной электронной зоне, является до некоторой степени нетрадиционной кинетической задачей, выходящей за рамки τ -приближения.

Итак, в рамках модели [1] в условиях применимости кинетического уравнения мы рассмотрим электрон-фононное рассеяние на мягкой моде вида (1) в пренебрежении поперечной дисперсией моды. Кроме того, мы пренебрежем неупругостью рассеяния, а продольную дисперсию моды аппроксимируем параболой. Такая простая модель вполне подходит для иллюстрации основных кинетических особенностей, но при рассмотрении реальных квазиодномерных соединений необходимо в первую очередь учесть трехмерность фононного спектра, чтобы корректно рассматривать структурный фазовый переход [1]. Учет неупругости весьма сильно усложнил бы все выкладки из-за довольно сложного вида функции $\bar{\omega}^2(\mathbf{k})$ (1), однако, с физической точки зрения, неупругость усложняет зависимость амплитуды рассеяния от величины передаваемого импульса, что при условии достаточного смягчения моды также приведет к образованию различных групп носителей. Другими словами, неупругость рассеяния не может «замазать» вышеупомянутый эффект, а скорее, наоборот, усилит и усложнит его.

Хотя предлагаемые в статье выводы имеют предварительный характер, возможной областью их применимости является область не слишком низких температур, сравнимых с температурами структурных переходов или несколько ниже. В реальных соединениях это составляет несколько десятков градусов, что также сравнимо с дебаевскими частотами смягчающихся мод [1]. При таких предположениях зависимость чисел заполнения мягкой моды (1) будет очень сложной, и, видимо, единственным разумным выходом является параболическая интерполяция спектра.

На первый взгляд пренебрежение поперечной дисперсией моды не дает возможности рассматривать окрестность точки фазового перехода T_p . Однако именно интерполяционный характер формул позволяет в некоторых случаях описывать и критическое поведение сопротивления. Дело в том, что кинетическая задача не сводится к задаче о наиболее смягченных фононах, определяющих термодинамику фазового перехода. Поэтому возможна в принципе ситуация, в которой фазовый переход является трехмерным из-за достаточно большой поперечной дисперсии фононов при малых k_{\perp} (справедливы теории типа Гинзбурга—Ландау [1]), однако во всей существенной для кинетики области импульсов продольная зависимость амплитуды рассеяния значительно превосходит поперечную. (В области температур $T \sim \omega_0$ эта зависимость может быть экспоненциальной). Поэтому образование групп носителей, существенных для транспортных свойств, будет определяться именно продольной дисперсией. С формальной точки зрения это означает, что параметры корреляционной функции фононов (D -функции) не совпадают с интерполяционными параметрами амплитуды рассеяния, а задача о критическом поведении сопротивления теряет в квазиодномерном случае смысл обычной задачи теории фазовых переходов, в которой существенны лишь носители вблизи наиболее смягченных фононов.

Напомним, что, согласно [1], малые участки фазового пространства вблизи точек максимального смягчения дают большой вклад в проводимость в широкой области температур $T \sim T_p$ (этот факт следует уже из (1)). Все количественные оценки [1] были основаны на доминировании в проводимости самых мягких фононов; например, максимум проводимости может быть следствием конкуренции двух процессов: уменьшения чисел заполнения фононов с понижением температуры и роста амплитуды рассеяния на мягких фононах при $T \sim T_p$. В терминах групп носителей эта ситуация отвечает доминированию в проводимости одной такой группы, взаимодействующей с наиболее мягкими и сильно рассеивающими фононами. Столь простая картина проводимости, видимо, может сохраниться вплоть до точки перехода T_p , если последняя достаточно высока. Вероятным кандидатом на роль вещества, в котором реализуется именно такая кинетическая ситуация, является NbSe_3 , в котором отсутствуют максимумы проводимости, а сама проводимость описывается простым металлическим законом ($\rho \sim T$). Скорее всего в такой «квазитрехмерной» ситуации достаточно эффективным является τ -приближение [5, 6].

Однако при понижении температуры даже сравнительно небольшая дисперсия фононной частоты способна дать требуемую сильную зависимость амплитуды рассеяния из-за экспоненциальной зависимости чисел заполнения фононов, поэтому весьма вероятно, что вышеупомянутые квазиодномерные токовые состояния реализуются в органических соединениях типа TTF—TCNQ, TMTSF₂X и т. д. Более того, можно предположить, что квазиодномерные токовые состояния возникают и в квазиодномерных веществах, не проявляющих структурного перехода, но обладающих смягченными фононными модами. Предположение о заметном вкладе мягкой моды в проводимость непроявляющего перехода Пайерлса TaSe_3 было сделано в [7]. Возможно, что и транспортные свойства TMTSF₂X в значительной степени связаны с мягкими модами.

После обсуждения всех этих весьма важных вопросов вернемся к кинетическому уравнению. Для электронного спектра возьмем приближение сильной связи

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = v_F t - \eta(p_{\perp}), \quad \eta(p_{\perp}) = \eta_0 \cos(\pi p_{\perp}/b),$$

где $2b$ — поперечный размер ПФ. При рассмотрении продольной проводимости в системе с двумя почти плоскими ПФ надо брать нечетные по двум ее степеням пробные функции, причем удобно отсчитывать продольный импульс от фиксированного сечения зоны Бриллюэна (соответствующей минимальной частоте моды), от которого отсчитывается продольный импульс t в выражении для спектра носителей. Кинетическое уравнение

$$e v_p \cdot E \left(-\frac{\partial n_0(\mathbf{p})}{\partial \varepsilon} \right) = I_{e, ph}(\varphi), \quad \delta n_p = \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right)_p \varphi_p \quad (2)$$

запишем в обозначениях [2]

$$X(\mathbf{p}) = \hat{P} \Phi(\mathbf{p}). \quad (3)$$

Для коэффициентов η_i , определяющих функцию распределения, получается система линейных уравнений $(\Phi(\mathbf{p}) = \sum_i \eta_i \Phi_i(\mathbf{p}))$

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

где величины P_{ij} , X_i являются матричными элементами на пробных функциях $(\Phi_i = \varphi_i)$

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

Проводимость выражается через величины P_{ij} , X_i . Например, в случае двух пробных функций $(E=1)$

$$\sigma = \eta_1 X_1 + \eta_2 X_2 = (X_1^2 P_{22} + X_2^2 P_{11} - 2X_1 X_2 P_{12}) / (P_{11} P_{22} - P_{12}^2). \quad (6)$$

Вариационный принцип в магнитном поле дает систему

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

$$M_{ij} \equiv - \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \Phi_i(\mathbf{p}) \frac{e}{c} \left(-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} \right)_p [v_p \times \mathbf{H}] \frac{\partial \Phi_j(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}, \quad (7)$$

причем базис пробных функций должен быть дополнен функциями, четными по сторонам ПФ. Оператор магнитного поля M имеет матричные элементы лишь между четными и нечетными функциями (см. ниже).

Как уже отмечалось, в данной статье мы ограничимся лишь качественным рассмотрением. Для этого можно взять два набора пробных функций

$$1) \Phi_1^{(1)} = t^2, \quad \Phi_2^{(1)} = t^4; \quad 2) \Phi_1^{(2)} = 1, \quad \Phi_2^{(2)} = t^2. \quad (8)$$

Вычислительные трудности задач связаны с вычислением величин P_{ij} . Для этого необходимо работать с тройными интегралами, выражающими производство энтропии. Как известно, в интеграле столкновений фигурирует δ -функция от разности энергий электронов [4], которая уменьшает число фактических интегрирований до двух, если электронный спектр трехмерный. При этом вычисление производства энтропии потребовало бы пяти фактических интегрирований. Мы, однако, берем двумерный электронный спектр, чтобы упростить задачу и получить тройные интегралы. При первом рассмотрении это вполне разумно, тем более что в разных классах изучаемых соединений наблюдается большая анизотропия проводимости в плоскости, перпендикулярной оси максимальной проводимости $(\sigma_{11} \gg \sigma_{12}, \sigma_{11} \gg \sigma_{11})$, что подтверждает сделанное предположение.

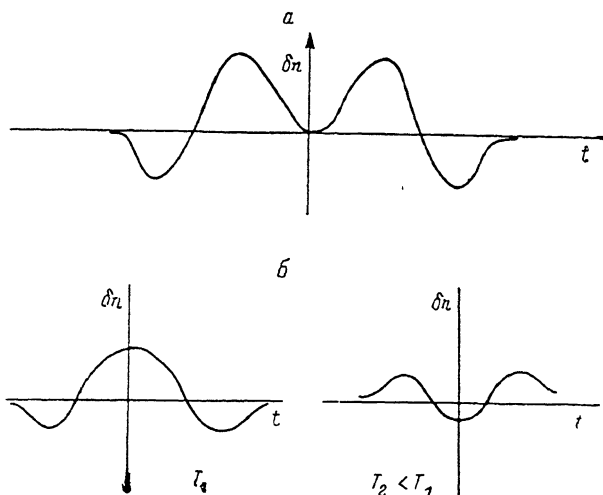
В обеих задачах целесообразно сделать сдвиг переменной интегрирования по t , после чего получаются симметричные по $c_1 = \cos(\pi p_{\perp}/b)$ и $c_2 = \cos(\pi(p_{\perp} - k_{\perp})/b)$ выражения. Например, в задаче 1 подынтегральное выражение в интеграле, выражающем производство энтропии, есть

$$T \frac{v_F}{4T \operatorname{ch}^2 \left(\frac{v_F t}{2T} \right)} \times \frac{\left\{ \eta_1 \left[\left(t + \frac{\eta_0}{v_F} c_1 \right)^2 + \left(t + \frac{\eta_0}{v_F} c_2 \right)^2 \right] + \eta_2 \left[\left(t + \frac{\eta_0}{v_F} c_1 \right)^4 + \left(t + \frac{\eta_0}{v_F} c_2 \right)^4 \right] \right\}^2}{\left[\ln \left(\frac{T}{T_P} \right) + \frac{1}{A} \left(\frac{v_F (t + \eta_0) (c_1 + c_2) / v_F}{\eta_0} \right)^2 \right]}. \quad (9)$$

Здесь коэффициент A -интерполяционный параметр, его следует выбирать из условия наилучшего совпадения с экспериментальными данными.

Задача 2 иллюстрирует ситуацию, в которой функция распределения носителей, взаимодействующих с областью максимального смягчения, становится отрицательной. Физическая причина этого состоит в том, что носители стремятся покинуть область самого сильного электрон-фононного рассеяния, где производство энтропии максимально, причем резкая перестройка токового состояния (см. рисунок) происходит при стремлении частоты моды к нулю, т. е. вблизи перехода.

Чтобы дать представление о масштабах функции распределения, укажем, что, за исключением узкой области вблизи температуры перехода, функция распределения имеет «нормальный» порядок величины. Слово «нормальный» взято в кавычки из-за пренебрежения поперечной дисперсией фононной моды, что приводит к уменьшению проводимости и функции



Токовые состояния в квазиодномерной системе при наличии сильной зависимости амплитуды рассеяния от передачи импульса.

a: в задаче 1 общий вид состояния сохраняется, при понижении температуры высоты горбов растут, растут и проводимость; *б*: в задаче 2 происходит изменение токового состояния при понижении температуры.

распределения в $g_{ph}^2 \ll 1$ раз в широкой области температур. Однако обе эти величины очень слабо зависят от расстояния до точки перехода, тогда как при отбрасывании Φ_2 , что отвечает пренебрежению перераспределением носителей, проводимость вела бы себя как $(T - T_p)^{-1/2}$.

Укажем также, что если в квазиодномерной системе смягчается достаточно большой фазовый объем фононов (подобно рассматриваемой задаче), то возможен немонотонный закон проводимости $\sigma(T)$ выше точки перехода. Наша первая (основная) задача с пробными функциями t^2 и t^4 описывает проводимость в терминах двух групп носителей, сравнительно слабо взаимодействующих с наиболее мягкими фононами. Она также проявляет свойство знакопеременности функции распределения, однако наиболее интересным и важным является тот факт, что в проводимости могут доминировать носители, далекие от особенности в фононном спектре.

Качественно ситуацию с сильной продольной зависимостью амплитуды рассеяния можно понять так. Коэффициенты η_i определяются из системы (4), в которой фигурируют матричные элементы X_i , P_{ij} , а в выражении для проводимости возникают комбинации типа X_i^2/P_{ij} (6). Ограничиваясь пробными функциями вида 1 , t^2 , t^4 , t^6 и т. д., мы видим, что величины P_{ij} растут значительно быстрее, чем X_i , поэтому слишком быстрорастущие функции $\Phi(t)$ дадут малый вклад в проводимость. Физически это означает, что производство энтропии для токовых состояний, описываемых

быстрорастущими функциями, оказывается больше выигрыша в токе, который дают эти состояния, что легко усмотреть уже из элементарного соотношения [2]

$$\dot{S} = \rho I^2 / T, \quad (10)$$

исходя из которого можно получить все формулы вариационной задачи (4)–(6).

Однако при смягчении моды амплитуда рассеяния с большой передачей продольного импульса начинает быстро падать, а в набор пробных функций необходимо включать достаточно быстрорастущие. В целом же ситуация представляется весьма сложной и необычной. По-видимому, систему с большим смягчением моды нужно описывать большим числом пробных функций, а не одной или двумя, как обычно. С физической точки зрения это означает, что возникнет много электронных групп с разными скоростями, причем особенности сопротивления (и магнетосопротивления) обусловлены резким изменением характера разбиения носителей на группы. Последнее утверждение можно проиллюстрировать на примере задачи 2 (несколько формальной, поскольку она не учитывает вклада далеких от особенности в спектре фононов носителей), в которой функция распределения испытывает резкое изменение вблизи температуры перехода. Нам кажется, что это утверждение может быть обобщено на более реалистичный случай большого числа групп носителей, описываемых большим набором пробных функций. Близость к точке перехода важна из-за того, что именно в окрестности перехода амплитуда рассеяния наиболее сильно зависит от передачи импульса.

Нетривиальность физической ситуации демонстрирует следующая особенность, обнаруженная нами в задаче 1. Напомним еще раз, что в этой задаче учитывается вклад далеких от особенности в фононном спектре носителей, поэтому при добавлении пробных функций, описывающих взаимодействия с наиболее мягкими фононами ($\Phi_3=1$, $\Phi_4=t \cos(\pi r_1/b)$ и т. д.), можно надеяться получить достаточно реалистичное токовое состояние. Выражение (10) представляет собой частное от деления полинома восьмого порядка на полином второго. Отбрасывание остатка означает пренебрежение вкладом самых мягких фононов, что представляется разумным вдали от фазового перехода, тем более что численно вклады от далеких носителей достаточно велики. Любопытная особенность состоит в том, что при вышеупомянутом отбрасывании остатка выражение $P_{11}P_{22}-P_{12}^2$ (см. (6)) могло бы обратиться в нуль при $T_M \approx \eta_0/4$, если величина $\ln(T/T_P)$ мала. Если бы этот результат был точным, то очевидна интерпретация этого полюса в выражении для проводимости (6) как точки, в которой (в рамках вариационной процедуры) существует нетривиальное решение уравнения $St(\delta n)=0$. Легко видеть также, что в точке, соответствующей полюсу, можно сделать производство энтропии равным нулю, так как квадратичная форма для \dot{S} сводится к полному квадрату.

Приближенный характер полученного результата позволяет говорить лишь о возможности максимума проводимости вблизи точки перехода, который является проявлением очень сложного квазиодномерного токового состояния с малым производством энтропии. Хотя наши результаты требуют дальнейшего исследования, весьма соблазнительно приписать наблюдаемый во многих соединениях максимум проводимости проявлению сложного квазиодномерного токового состояния. Разумеется, физическая картина этого максимума значительно сложнее и интереснее предложенной в [1].

Может показаться странным, что выражение (10) для производства энтропии, являющееся частным от деления двух существенно положительных величин, после интегрирования даст малую величину. Физическая причина этого состоит в том, что быстрое изменение функции распределения в продольном направлении дает сильные осцилляции этой функции на изоэнергетических поверхностях. Сдвиг переменной интегрирования

в (10) фактически и означает переход к изоэнергетической поверхности. Поэтому даже комбинация простых пробных функций, зависящих лишь от продольного импульса, дает весьма сложную картину проводимости, для которой могут оказаться непригодными простые оценки по аналогии с обычным τ -приближением. Это обстоятельство иллюстрирует сделанное выше замечание о необходимости брать заметное число пробных функций, поскольку, например, описание сильной поперечной зависимости требует учета большого числа гармоник.

В конце статьи мы остановимся несколько подробнее на вычислительной стороне дела, а пока в духе нашего качественного подхода рассмотрим некоторые проявления квазиодномерных токовых состояний. Полученные состояния отвечают знакопеременной функции распределения на каждой изоэнергетической поверхности, поэтому при движении по циклотронным орбитам в магнитном поле возникает «смешивание» носителей и магнетосопротивление может быть большим, несмотря на то что эти орбиты открытые. Достаточно очевидна и нетривиальная частотная дисперсия проводимости: поскольку токовое состояние реализуется посредством сложного взаимодействия носителей с существенно различными подвижностями, то уже очень малая в смысле обычной формулы Друде частота может сильно нарушить это состояние.

Вариационный принцип в магнитном поле является следствием требования стационарности производства энтропии [2], однако базис пробных функций должен быть расширен. В обычном трехмерном случае достаточно взять две функции $\Phi_1 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{p}$, $\Phi_2 = [\mathbf{u} \times \mathbf{p}] \cdot \mathbf{H}/H$; первая из них описывает обычную проводимость, вторая — эффект Холла. Оператор магнитного поля M связывает их, в результате чего получаются обычные выражения для тензора проводимости. Это перераспределение носителей в определенном смысле бездиссипативно, что наиболее ясно проявляется в изотропном случае в τ -приближении [3]: диагональные члены экспериментально определяемого тензора сопротивления не меняются при включении магнитного поля. Такой результат является следствием высокой симметрии, однако и при ее отсутствии в случае замкнутых орбит сопротивление в магнитном поле остается по порядку величины тем же ($\Delta\rho/\rho \sim 1$), т. е. новых механизмов сопротивления не возникает.

В квазиодномерном же случае могут возникнуть бестоковые функции, не дающие вклада ни в одну из компонент тока. Мы ограничимся случаем двух токовых (1), (2) и двух бестоковых (3), (4) функций, связанных между собой только посредством магнитного поля (матричными элементами M_{ij}), тогда как между собой бестоковые функции связаны матричным элементом P_{34} , что может привести, вообще говоря, к тому, что аналогично токовым состояниям могут возникнуть бестоковые с малой диссипацией (малым производством энтропии). В качестве функций (3, 4) мы выберем четные по сторонам ПФ функции

$$\Phi_3 = t \sin(\pi p_{\perp}/b), \quad \Phi_4 = t^3 \sin(\pi p_{\perp}/b). \quad (11)$$

Эти функции аналогичны холловским, однако их вклад в поперечную составляющую тока равен нулю из-за нечетности по t . Во избежание недоразумений отметим, что обычные холловские функции не рассматриваются лишь для упрощения формул. Бестоковые функции (11) наиболее ясно подчеркивают механизм «смешивания», проявляющийся лишь в продольной проводимости, однако этот механизм проявится и в поперечной проводимости, и в эффекте Холла, что требует отдельного рассмотрения. Для иллюстрации основных особенностей магнетотранспорта мы положим $P_{34} = 0$, чтобы получить обзримую формулу для проводимости

$$\sigma = \frac{(X_1^2 P_{22} + X_2^2 P_{11} - 2X_1 X_2 P_{12}) + \frac{1}{P_{33}} (X_1 M_{23} - X_2 M_{13})^2 + \frac{1}{P_{44}} (X_1 M_{24} - X_2 M_{14})^2}{\left\{ (P_{11} P_{22} - P_{12}^2) + \frac{1}{P_{33}} [P_{11} M_{23}^2 + P_{22} M_{13}^2 - 2P_{12} M_{13} M_{23}] + \frac{1}{P_{44}} [P_{11} M_{24}^2 + P_{22} M_{14}^2 - \dots - 2P_{12} M_{14} M_{24}] + \frac{1}{P_{33} P_{44}} (M_{13} M_{24} - M_{14} M_{23})^2 \right\}} \quad (12)$$

В квазиодномерной ситуации $\sigma_1 = 1/\rho_1$ из-за большой анизотропии, $M \propto H$.

Прежде всего из (12) следует большое магнетосопротивление, сравнимое с магнетосопротивлением обычных трехмерных металлов. В очень грубой оценке его величина есть $\Delta\rho/\rho \sim (\omega_H\tau)^2$, где ω_H — циклотронная частота. Грубость оценки связана с наличием в матричных элементах M_{ij} больших численных коэффициентов, отвечающих сильному «смешиванию» носителей. Другим важным результатом является отсутствие насыщения сопротивления в сильном поле, если величина $(M_{13}M_{24} - M_{14}M_{23})/P_{33}P_{44}$ не слишком мала. Это выполняется в том случае, когда функция (2) существенно отличается от функции (1), а функция (4) — от функции (3), что отвечает фактическому образованию разных групп носителей.

Итак, магнетосопротивление в квазиодномерной системе с мягкой модой реализуется посредством сложного взаимодействия токовых и бестоковых состояний, возникающего при наложении магнитного поля: уже очень простая функция (12) может быть немонотонной. При введении большого числа токовых и бестоковых функций (что необходимо при решении более реалистичной задачи) возникающие немонотонности, видимо, могут образовать «рябь» на кривой $\rho(H)$, аналогичную осцилляциям Шубникова—де Гааза. В качестве примера укажем соединение TaSe_3 семейства MX_3 [9], в котором отсутствуют высокотемпературные переходы (вероятно, из-за большой трехмерности), а на монотонно растущую при малых T кривую $\rho(H)$ накладывается мелкая «рябь». Сильный рост сопротивления в магнитном поле наблюдается и в $\text{TMTSF}_2\text{ClO}_4$ [10].

Наконец, укажем, что предложенный механизм магнетосопротивления является чисто кинетическим. Однако амплитуда рассеяния в реальных квазиодномерных соединениях является сложной функцией всех взаимодействий, приводящих к фазовым переходам, и сильно зависит от магнитного поля. В этом смысле задача является термодинамической и, вообще говоря, трехмерной, если в трехмерной ситуации удастся создать аналогичную зависимость амплитуды рассеяния. Поэтому параметры зависимости $\sigma(H)$, например возможные осцилляции, определяемые предложенным кинетическим механизмом, не будут простым образом связаны с электронным спектром [11, 12] по аналогии с осцилляциями Шубникова—де Гааза, а будут определяться деталями перенормированного спектра фононов.

В заключение остановимся несколько подробнее на вычислении проводимости. Как известно, рассеяние носителей на фононах определяется структурным фактором мягкой моды $T/\bar{\omega}^2(k)$ [1, 4], который входит под интеграл вида

$$\frac{1}{\tau} \approx T \int \frac{dk; d^2k_{\perp}}{\bar{\omega}^2(k)} \bar{W} \delta(\dots), \quad (13)$$

(13) написано для обычного τ -приближения, причем $T > \bar{\omega}$ (числа заполнения фононов велики). При не слишком высоких температурах можно принять (13) как интерполяционное выражение. Используя законы сохранения (δ -функция в (13)) и делая вышеупомянутый сдвиг по t , нетрудно получить формулу (9), коэффициенты в которой подобраны так, что при интегрировании по t и усреднении по p_{\perp}, k_{\perp} получится квадратичная форма $P_{11}\eta_1^2 + 2P_{12}\eta_1\eta_2 + P_{22}\eta_2^2$, определяющая величины P_{ij} . Малая константа электрон-фононного взаимодействия g_{ph}^2 не войдет в эти выражения из-за того, что $\bar{\omega}^2 \sim \omega_0^2 g_{ph}^2$, поэтому она не войдет и в условие применимости кинетического уравнения $1/\tau_{e, ph}\eta_0 \ll 1$, которое будет выполняться численно в области достаточно низких температур. Нетрудно видеть также, что в аналогичном (10) выражении для функций вида (11) (четных по сторонам ПФ) в каждой из квадратных скобок в числителе будет фигурировать не сумма, а разность пробных функций. Это различие связано с тем, что рассматривается рассеяние «назад». Величины X_i не содержат зависимости от амплитуды рассеяния, и их вычисление достаточно очевидно.

Мы приведем выражения для P_{ij} в пренебрежении остатком и величиной $\ln(T/T_F)$, а также точные выражения для X_i , из которых следуют качественные утверждения, сделанные выше для задачи 1

$$\begin{aligned}
 X_1 &= \frac{neE}{2p_F} \left\{ \frac{\pi^2}{6} y_1^2 + y_2^2 \right\}, \\
 X_2 &= \frac{neE}{2p_F} \left\{ \frac{7\pi^4}{120} y_1^4 + \frac{\pi^2}{2} y_1^2 y_2^2 + \frac{3}{4} y_2^4 \right\}, \\
 P_{11} &= \frac{n}{4p_F v_F} A(T) T \eta_0^2 \left[\frac{2\pi^2}{3} y_1^2 + 6y_2^2 \right], \\
 P_{12} &= \frac{n}{4p_F v_F} A(T) T \eta_0^2 \left[\frac{7\pi^4}{30} y_1^4 + \frac{13\pi^2}{6} y_1^2 y_2^2 + \frac{79}{8} y_2^4 \right], \\
 P_{22} &= \frac{n}{4p_F v_F} A(T) T \eta_0^2 \left[\frac{31\pi^6}{168} y_1^6 + \frac{63\pi^4}{40} y_1^4 y_2^2 + \frac{183\pi^2}{32} y_1^2 y_2^4 + \frac{375}{32} y_2^6 \right], \\
 y_1 &= (2T/v_F), \quad y_2 = (\eta_0/v_F). \tag{14}
 \end{aligned}$$

Соответствующий вид функции распределения приведен на рисунке. Эта функция знакопеременная, но в силу сделанных упрощений она описывает ситуацию, в которой носители покидают области с большими подвижностями. Более реалистической представляется задача 2, в которой происходит сильное изменение токового состояния вблизи температуры перехода. Столь большие различия связаны с тем, что система близка к состоянию с малым производством энтропии, а наше рассмотрение слишком грубо.

Таким образом, предварительные оценки показывают, что токовое состояние является весьма сложным и требует более детального рассмотрения.

Список литературы

- [1] Горьков Л. П., Долгов Е. Н., Лебедь А. Г. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. № 2. С. 613—630.
- [2] Займан Дж. Электроны и фононы. М.: ИЛ, 1962.
- [3] Пригожин И. От существующего к возникающему. М.: Наука, 1985. 327 с.
- [4] Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. 527 с.
- [5] Горьков Л. П., Долгов Е. Н. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. № 1. С. 396—403.
- [6] Долгов Е. Н. // ФНТ. 1984. Т. 10. № 9. С. 912—921.
- [7] Долгов Е. Н., Латышев Ю. И., Минакова В. Е. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 11. С. 3472—3474.
- [8] Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И. Электронная теория металлов. М.: Наука, 1971. 416 с.
- [9] Fleming R. M., Polo J. A., Coleman R. V. // Phys. Rev. B. 1978. V. 17. N 4. P. 1634—1644.
- [10] Chaikin P. M., Choi M. Y., Kwak J. F. et al. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 51. N 25. P. 2333—2336.
- [11] Jamaji N. // J. Phys. Soc. Jpn. 1986. V. 55. N 5. P. 1424—1427.
- [12] Jacobsen C. S., Tanner D. B., Bechgaard K. // Phys. Rev. B. 1983. V. 28. N 12. P. 7019—7032.

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

Поступило в Редакцию
15 января 1988 г.
В окончательной редакции
4 января 1989 г.