

ЭФФЕКТ ХОЛЛА В ДОПИРОВАННОМ МОТТ-ХАББАРДОВСКОМ ДИЭЛЕКТРИКЕ

Э. З. Кучинский^{a*}, Н. А. Кулеева^{a**}, М. В. Садовский^{a***}, Д. И. Хомский^{b****}

^a *Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук,
620016, Екатеринбург, Россия*

^b *II Physikalisches Institut, Universität zu Koeln,
50937, Koeln, Germany*

Поступила в редакцию 8 ноября 2022 г.,
после переработки 8 ноября 2022 г.
Принята к публикации 15 ноября 2022 г.

Проведен теоретический анализ эффекта Холла в допированном моттовском диэлектрике, рассматриваемом в качестве прототипа купратного сверхпроводника. Рассматривается стандартная модель Хаббарда в рамках DMFT-приближения. В качестве типичного рассматривается случай частичного заполнения (дырочное допирование) нижней хаббардовской зоны. Рассчитана зависимость коэффициента Холла и холловского числа от степени дырочного допирования и определено значение критической концентрации носителей, при которой происходит смена знака коэффициента Холла. Получена существенная зависимость параметров эффекта Холла от температуры. Качественно анализируется роль рассеяния на беспорядке. Проведено сравнение теоретических результатов с имеющимися экспериментами по концентрационной зависимости холловского числа в нормальном состоянии YBCO и Nd-LSCO, демонстрирующее вполне удовлетворительное согласие теории и эксперимента. Полученная картина концентрационной зависимости параметров эффекта Холла в рамках модели Хаббарда может быть альтернативой популярной модели квантовой критической точки.

DOI: 10.31857/S0044451023030136

EDN: QFDCRI

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение эффекта Холла в высокотемпературных сверхпроводниках ведется уже давно. Самые ранние эксперименты показали существенные зависимости параметров эффекта Холла от температуры и от степени допирования, качественно отличные от случая обычных металлов [1]. Полное теоретическое понимание эффекта Холла в купратах в настоящее время отсутствует.

В последние годы большой интерес вызывают экспериментальные исследования эффекта Холла при низких температурах в нормальном состоянии высокотемпературных сверхпроводников (куп-

ратов), которое реализуется в очень сильных внешних магнитных полях [2–4]. Наблюдающиеся при этом аномалии эффекта Холла обычно связываются с реконструкцией поверхности Ферми, связанной с формированием (антиферромагнитной) псевдощели и с близостью к соответствующей квантовой критической точке [5].

С начала теоретического изучения купратов одной из основных является точка зрения о том, что эти системы являются сильно коррелированными и металлическое (в том числе сверхпроводящее) состояние в них реализуется в результате допирования исходной фазы моттовского диэлектрика, который в простейшем случае может быть описан в рамках модели Хаббарда. При этом имеется довольно мало работ, в которых в рамках этой модели проводилось бы систематические исследования зависимости эффекта Холла от степени допирования и температуры [6].

Не до конца ясен даже ответ на классический вопрос о том, при какой степени допирования (концентрации носителей) происходит смена знака эффекта

* E-mail: kuchinsk@iep.uran.ru

** E-mail: strigina@iep.uran.ru

*** E-mail: sadovski@iep.uran.ru

**** E-mail: khomskii@ph2.uni-koeln.de

Холла? При малом дырочном допировании исходного диэлектрика, такого как La_2CuO_4 или YBCO он, очевидно, просто определяется концентрацией дырок δ . Но при какой степени допирования происходит смена знака коэффициента Холла, когда происходит переход от дырочной поверхности Ферми к электронной? Решение этого вопроса представляется важным и для общей теории транспортных явлений в сильно коррелированных системах. Данная работа, в основном, посвящена изучению именно этого вопроса.

2. ХОЛЛОВСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ И КОЭФФИЦИЕНТ ХОЛЛА

Весьма общим подходом к исследованию модели Хаббарда является динамическая теория среднего поля (DMFT) [6–8], которая дает точное описание системы в пределе бесконечномерного пространства (решетки с бесконечным числом ближайших соседей). Активно развиваются подходы, позволяющие выйти за рамки этого жесткого ограничения [9, 10], но они, как правило, сильно усложняют рассмотрение. В данной работе мы ограничимся рассмотрением эффекта Холла в рамках стандартного приближения DMFT. Целью работы является систематическое исследование концентрационной и температурной зависимости эффекта Холла при различных степенях допирования нижней хаббардовской зоны, и сравнение полученных результатов с экспериментом на YBCO и Nd-LSCO [3, 4]. Предварительные результаты были опубликованы в краткой статье [11].

В стандартной DMFT [6–8] собственно энергетическая часть одноэлектронной функции Грина $G(\mathbf{p}\varepsilon)$ является локальной, т. е. есть не зависящей от импульса. В условиях такой локальности и обычная, и холловская проводимости полностью определяются спектральной плотностью этой функции Грина:

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

В частности, обычная (диагональная) статическая проводимость имеет вид [6]

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

а холловская (недиагональная) проводимость определяется как

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

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

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

также полностью определяется спектральной плотностью $A(\mathbf{p}\varepsilon)$, которую мы далее будем находить в рамках DMFT [6–8]. Эффективная однопримесная модель Андерсона DMFT в данной работе решалась с помощью метода численной ренормгруппы (NRG) [12].

Далее мы рассматриваем две базовые модели затравочной электронной зоны. Модель с полуэллиптической плотностью состояний (DOS) (на элементарную ячейку и один спин), что является неплохим приближением для трехмерного случая:

$$N_0(\varepsilon) = \frac{2}{\pi D^2} \sqrt{D^2 - \varepsilon^2}, \quad (5)$$

где D — полуширина зоны проводимости. Мы полагаем затравочный электронный спектр изотропным. Для нахождения в такой модели производных по импульсу от электронного спектра, входящих в (2) и (3), мы будем следовать подходу, предложенному ранее в работе [13]. Технические детали соответствующего анализа вынесены в Приложение.

Для двумерных систем, имея в виду сравнение с экспериментальными данными для купратов, мы ограничимся результатами для обычной модели электронного спектра в приближении сильной связи:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = -2t(\cos(p_x a) + \cos(p_y a)) - 4t' \cos(p_x a) \cos(p_y a). \quad (6)$$

В такой двумерной модели мы далее рассмотрим ряд случаев:

- (1) спектр с перескоком лишь на ближайших соседей ($t' = 0$) и полной электрон-дырочной симметрией;
- (2) спектр с $t'/t = -0.25$, качественно соответствующий электронной дисперсии в системах типа LSCO .

(3) спектр с $t'/t = -0.4$, качественно соответствующий ситуации, наблюдаемой в YBCO.

Ниже приводятся подробные результаты расчетов коэффициента Холла для всех этих моделей.

3. КОЭФФИЦИЕНТ ХОЛЛА В ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА В ПРИБЛИЖЕНИИ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

Проведем сначала простейший качественный анализ. Нетрудно понять, что глубоко в состоянии моттовского диэлектрика с хорошо определенными верхней и нижней хаббардовскими зонами при допировании дырками коэффициент Холла фактически определяется заполнением нижней хаббардовской зоны (верхняя находится существенно выше по энергии и практически не заполнена). В такой ситуации в модели с электрон-дырочной симметрией (в двумерном случае это соответствует спектру с $t' = 0$) оценка заполнения зоны, при котором происходит смена знака коэффициента Холла, может быть получена из очень простых соображений. Будем рассматривать парамагнитную фазу $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = n$, так что n далее обозначает плотность электронов на одну проекцию спина, а их полная плотность равна $2n$. Качественно ситуация иллюстрируется рис. 1. В нижней хаббардовской

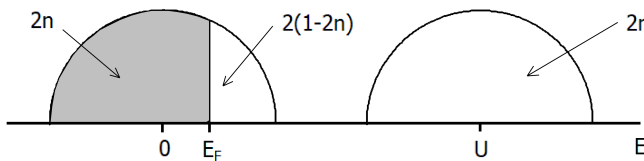


Рис. 1. Схематическое изображение допирования хаббардовских зон в случае полной электрон-дырочной симметрии

зоне (в окрестности энергии $E = 0$) $2n$ электронов занимают состояния ниже энергии Ферми E_F . При добавлении следующего электрона он может попасть в верхнюю хаббардовскую зону в окрестности $E \sim U$, где также имеется $2n$ состояний. Он также может попасть в нижнюю хаббардовскую зону, где еще остается $2(1 - 2n)$ пустых состояний в области $E > E_F$. В итоге имеем $2n + 2(1 - 2n) + 2n = 2$, как и должно быть. Знак коэффициента Холла изменится при половинном заполнении нижней зоны, когда $2n = 2(1 - 2n)$. Отсюда ясно, что значение критической концентрации $n_c = 1/3$.

Этот же результат легко получается и в приближении Хаббард I, где функция Грина для электро-

нов с проекцией спина «вверх» имеет вид [14]

$$G_{\uparrow}^R(\epsilon\mathbf{p}) = \frac{1 - n_{\downarrow}}{\epsilon - \epsilon_{-}(\mathbf{p}) + i\delta} + \frac{n_{\downarrow}}{\epsilon - \epsilon_{+}(\mathbf{p}) + i\delta}. \quad (7)$$

где $\epsilon_{\pm}(\mathbf{p})$ — спектр квазичастиц в верхней и нижней хаббардовских зонах. Видим, что в этом приближении число состояний с проекцией спина «вверх» в нижней хаббардовской зоне (первое слагаемое в (7)) действительно есть $1 - n_{\downarrow}$. При допировании дырками моттовского диэлектрика практически весь вклад в заполнение дает нижняя хаббардовская зона, поэтому

$$\begin{aligned} n &= n_{\uparrow} \approx \\ &\approx (1 - n_{\downarrow}) \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon f(\epsilon) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\epsilon - \epsilon_{-}(\mathbf{p}) + i\delta} \right) \equiv \\ &\equiv (1 - n)n_0. \end{aligned} \quad (8)$$

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

В общем случае ситуация конечно сложнее. В сильно коррелированных системах коэффициент Холла (и другие электронные свойства) оказываются существенно зависящими от температуры. При низкой температуре в таких системах в DMFT-приближении наряду с нижней и верхней хаббардовскими зонами вблизи уровня Ферми формируется узкая квазичастичная зона — квазичастичный пик

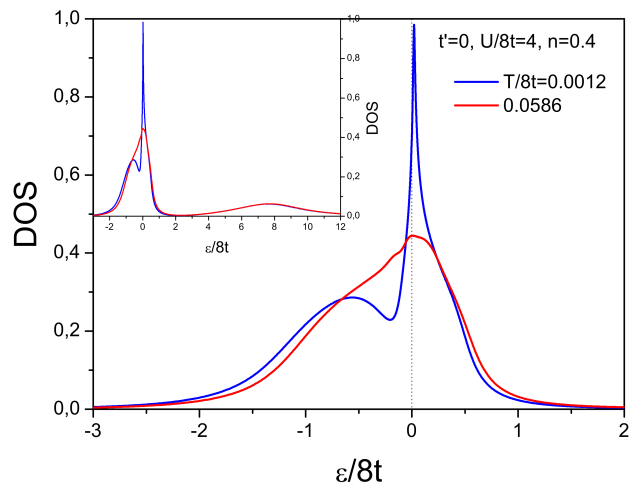


Рис. 2. Плотность состояний (DOS) в допированном моттовском диэлектрике при различных температурах. Параметры модели Хаббарда приведены на рисунке, $8t$ — ширина исходной зоны. На вставке показана плотность состояний в широком интервале энергий, включающем верхнюю хаббардовскую зону

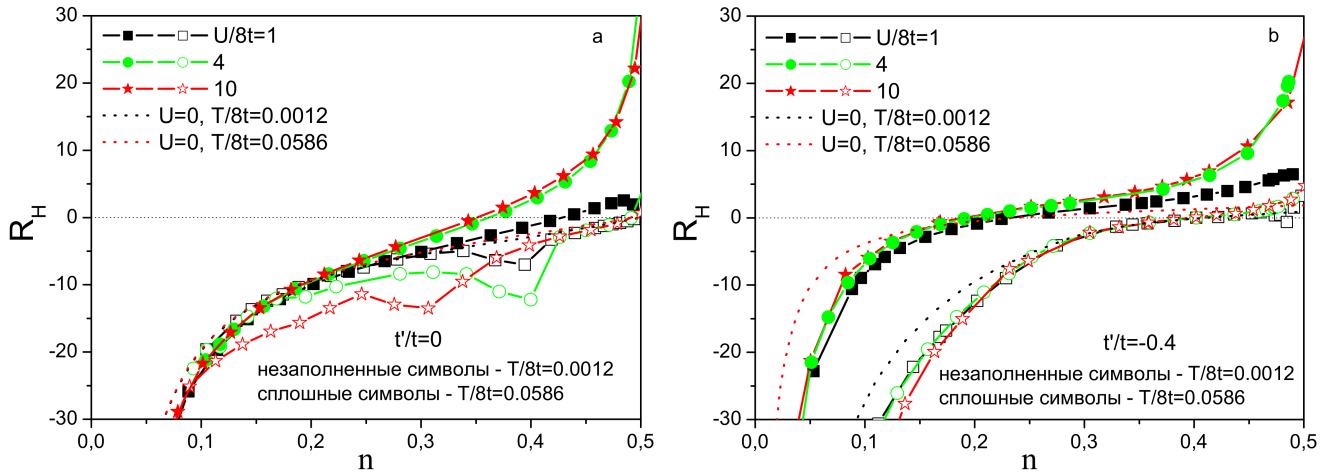


Рис. 3. Зависимость коэффициента Холла в случае $t' = 0a$ и $t'/t = -0.4b$ от степени заполнения зоны для различных значений силы электронных корреляций U в низкотемпературном режиме (незаполненные символы) и в высокотемпературном режиме (заполненные символы)

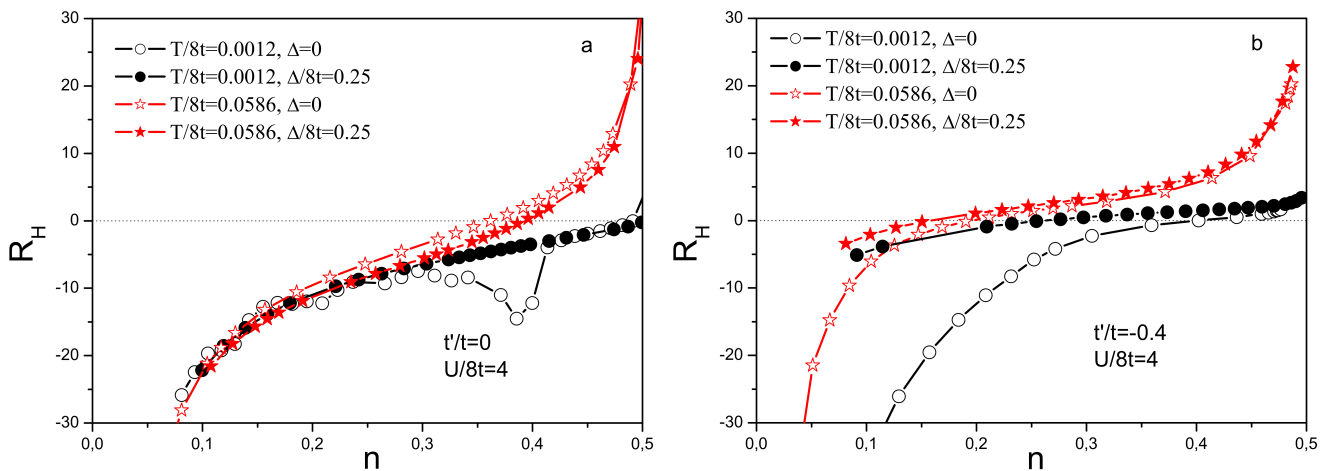


Рис. 4. Зависимость коэффициента Холла от степени заполнения зоны в присутствии примесного рассеяния ($\Delta/8t = 0.25$, заполненные символы) и в его отсутствии ($\Delta = 0$, незаполненные символы) для двух разных моделей двумерного электронного спектра: a — полной электрон-дырочной симметрии ($t' = 0$); b — $t'/t = -0.4$

в плотности состояний [6–8]. В допированном дырками моттовском диэлектрике (далее мы будем рассматривать именно дырочное допирование) такой пик лежит вблизи верхнего края нижней хаббардовской зоны (см. рис. 2). Поэтому при низкой температуре коэффициент Холла во многом определяется заполнением этой квазичастичной зоны. При достаточно высокой температуре (порядка или больше ширины квазичастичного пика) квазичастичный пик размывается и тогда коэффициент Холла полностью определяется заполнением нижней хаббардовской зоны. Таким образом, в общем случае, необходимо рассматривать два достаточно разных температурных режима для эффекта Холла.

В низкотемпературном режиме и ширина, и амплитуда квазичастичного пика зависят как от заполнения, так и от температуры. Рост температуры приводит к уширению квазичастичного пика и некоторому смещению уровня Ферми ниже максимума этого пика (см. рис. 2). Это может приводить к заметному уменьшению коэффициента Холла, однако дальнейший рост температуры, размывая квазичастичный пик, приводит к росту этого коэффициента. Существенная зависимость квазичастичного пика от заполнения зоны в низкотемпературном режиме приводит к областям немонотонной зависимости коэффициента Холла от степени заполнения (см. рис. 3a).

На рис. 3а видно, что высокотемпературное поведение коэффициента Холла в допированном моттовском диэлектрике ($U/2D = 4; 10$) в модели с полной электрон-дырочной симметрией ($t' = 0$) полностью подтверждает приведенную выше качественную оценку. Но при заметном нарушении электрон-дырочной симметрии эта оценка перестает работать (см. рис. 3б).

Необходимо отметить, что к размытию и исчезновению квазичастичного пика приводит не только рост температуры, но и разупорядочение [9, 13] (см. рис. 4), а также, например, псевдощелевые флуктуации, которыми локальный подход DMFT полностью пренебрегает [9, 15]. Таким образом, область применимости приведенных выше простейших оценок в реальности оказывается заметно шире.

В общем случае расчет влияния рассеяния на беспорядке (тем более псевдощелевых флуктуаций) на эффект Холла представляет собой очень сложную задачу. Для простых оценок ниже приводятся результаты расчетов по формулам (2), (3), (4), в которых просто использованы значения спектральной плотности $A(\mathbf{p}\varepsilon)$ для неупорядоченной модели Хаббарда, полученные в рамках DMFT+ Σ -подхода [9, 15]. Параметр беспорядка Δ обозначает эффективную частоту рассеяния электронов случайным полем (в самосогласованном борновском приближении). Ясно, что такой подход, основанный только на учете беспорядка в спектральной плотности, является слишком упрощенным, но он представляется разумным для качественного анализа.

На рис. 4 приведено сравнение зависимостей коэффициента Холла от степени заполнения зоны в отсутствие беспорядка и для рассеяния на примесях с $\Delta/8t = 0.25$ для случая моттовского диэлектрика с $U/8t = 4$. Видим, что для разных значений t' в высокотемпературном пределе беспорядок достаточно слабо влияет на коэффициент Холла, лишь очень незначительно смещая величину заполнения, при которой наблюдается смена знака R_H . В низкотемпературном режиме примесное рассеяние, размывая квазичастичный пик, приводит к исчезновению аномалий R_H , связанных с существованием такого пика (см. рис. 4а), и ослабляя различие между низкотемпературным и высокотемпературным режимами.

На рис. 5 приведены зависимости коэффициента Холла от степени заполнения зоны и температуры в случае моттовского диэлектрика с $U/8t = 4$ для различных моделей электронного спектра, как в случае полной электрон-дырочной симметрии $t' = 0$, так и при $t'/t = -0.25$ и $t'/t = -0.4$, характерных для

купратных систем LSCO и YBCO соответственно. На зависимости R_H от степени заполнения зоны с ростом температуры мы наблюдаем плавную эволюцию от низкотемпературного режима к высокотемпературному с плавным ослаблением аномалий коэффициента Холла, связанных с квазичастичными пиками, которые наиболее ярко видны на рис. 3а и рис. 5а. Для всех рассмотренных случаев электронного спектра ($t'/t = 0; -0.25; -0.4$) рост температуры приводит к смещению величины заполнения зоны, при которой $R_H = 0$, в область больших величин дырочных допирований. Также на рис. 5 б, d, f приведены температурные зависимости коэффициента Холла для различных степеней заполнения зоны. Во всех случаях наблюдается существенная зависимость R_H от температуры и при небольших значениях дырочных допирований ($n = 0.45-0.3$) R_H растет с ростом температуры и мы наблюдаем смену знака R_H при существенных величинах дырочных допирований ($n = 0.3-0.2$). В случае достаточно малых t' ($t'/t = 0; -0.25$) может наблюдаться немонокотонная зависимость коэффициента Холла от температуры, когда при низких температурах R_H уменьшается с ростом температуры, а при высоких T растет.

Смену знака коэффициента Холла обычно связывают с изменением типа носителей заряда. Кроме того, стремление к нулю коэффициента Холла приводит к расходимости холловского числа $n_H \sim 1/R_H$. На рис. 6 приведена зависимость степени заполнения, при котором в моттовском диэлектрике происходит смена знака коэффициента Холла, от температуры для всех трех рассматриваемых нами значений t'/t . Видим, что во всех моделях степень заполнения, при которой R_H меняет знак, уменьшается с ростом температуры. В случае полной электрон-дырочной симметрии $t' = 0$ мы видим, что в высокотемпературном режиме величина дырочного допирования $\delta = 1 - 2n$, при котором R_H меняет знак, действительно стремится к значению $1/3$. Однако с ростом $|t'/t|$ наблюдается заметное уменьшение величины дырочного допирования, при котором R_H меняет знак.

4. КОЭФФИЦИЕНТ ХОЛЛА В МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОННОЙ ЗОНЫ С ПОЛУЭЛЛИПТИЧЕСКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ СОСТОЯНИЙ

Кратко рассмотрим результаты, полученные в модели электронной зоны с полуэллиптической плотностью состояний, которая обладает полной электрон-дырочной симметрией. Основные ре-

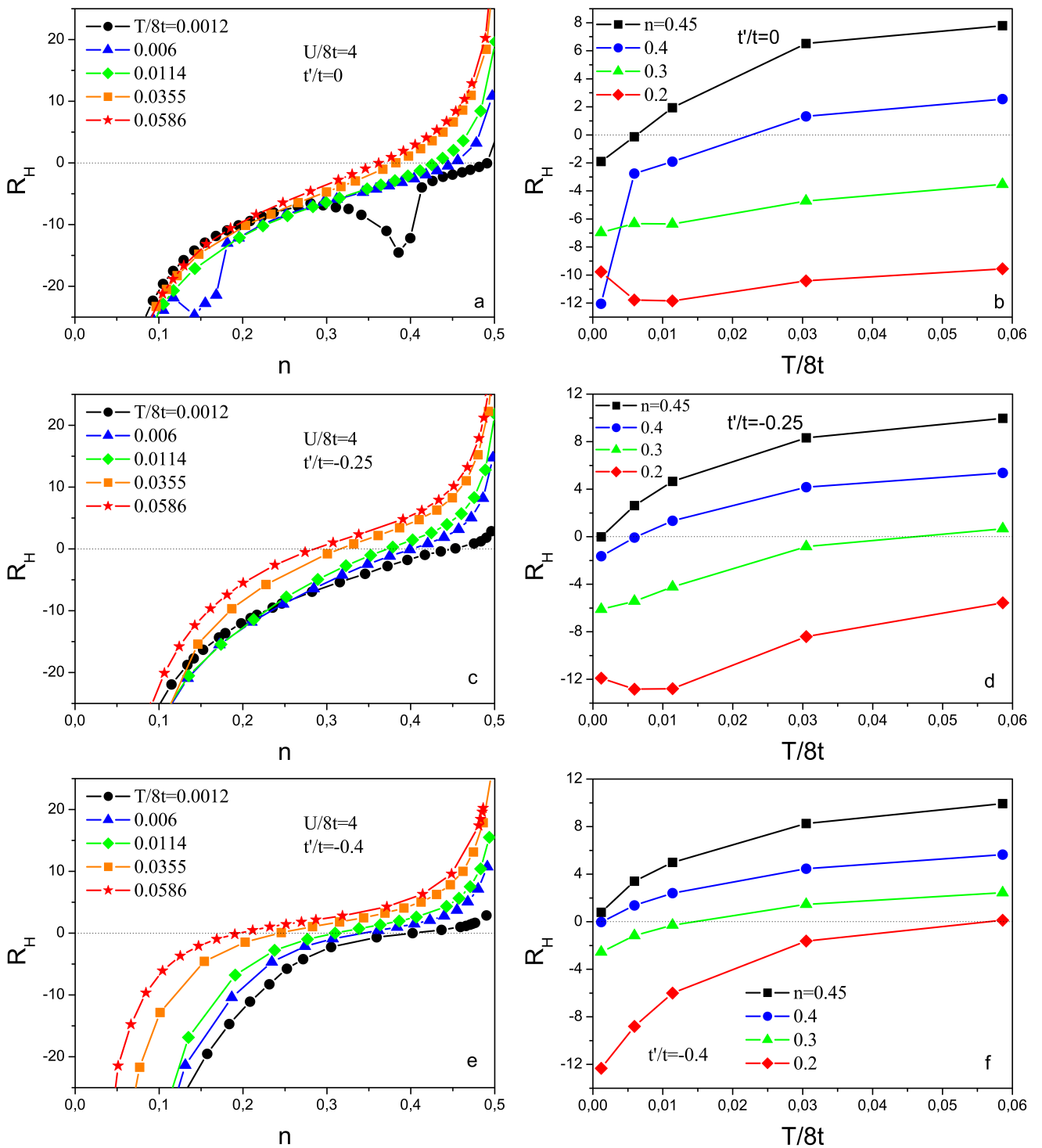


Рис. 5. Зависимость коэффициента Холла от степени заполнения зоны для различных значений температуры (a, c, e) и температурная зависимость R_H для разных значений заполнения зоны (b, d, f)

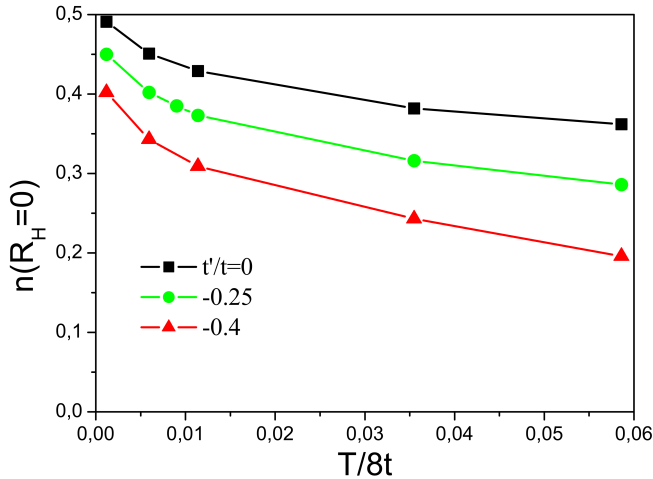


Рис. 6. Зависимость степени заполнения, при котором в моттовском диэлектрике происходит смена знака коэффициента Холла, от температуры для трех различных значений t'/t

зультаты оказываются качественно аналогичными результатам для рассмотренной выше двумерной модели электронного спектра с сильной связью с $t' = 0$, которая тоже обладает полной электрон-дырочной симметрией. Аналогично двумерному случаю коэффициент Холла в трехмерной модели в сильно коррелированной системе существенно зависит от температуры, и необходимо отдельно рассматривать низкотемпературный и высокотемпературный режимы для R_H , поскольку в низкотемпературном режиме коэффициент Холла во многом определяется заполнением квазичастичной зоны (квазичастичного пика).

Рост температуры приводит к размытию квазичастичного пика (см. рис. 7), и в высокотемпературном режиме коэффициент Холла в основном определяется заполнением нижней (для рассматриваемого нами случая дырочного допирования) хаббардовской зоны.

На рис. 8а приведена зависимость коэффициента Холла от заполнения электронной зоны в низкотемпературном (незаполненные символы) и в высокотемпературном (сплошные символы) режимах как для случая сильно коррелированного металла ($U/2D = 1$), так и допированного моттовского диэлектрика ($U/2D = 4; 10$). Видим, что в низкотемпературном режиме, как и в двумерной модели с $t' = 0$ (R_H практически при всех заполнениях зоны отрицателен), при небольших величинах дырочного допирования наблюдается существенная немонотонность в зависимости R_H от уровня допирования.

В высокотемпературном режиме коэффициент Холла при малой величине дырочного допирования

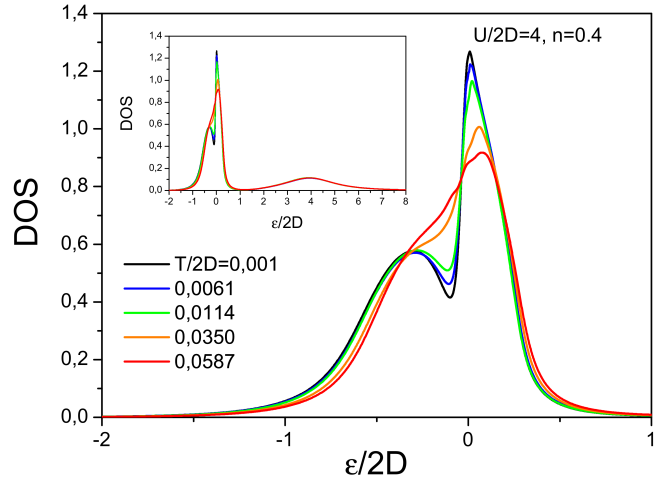


Рис. 7. Плотность состояний (DOS) в допированном моттовском диэлектрике при различных температурах для модели с полуэллиптической зоной (трехмерный случай)

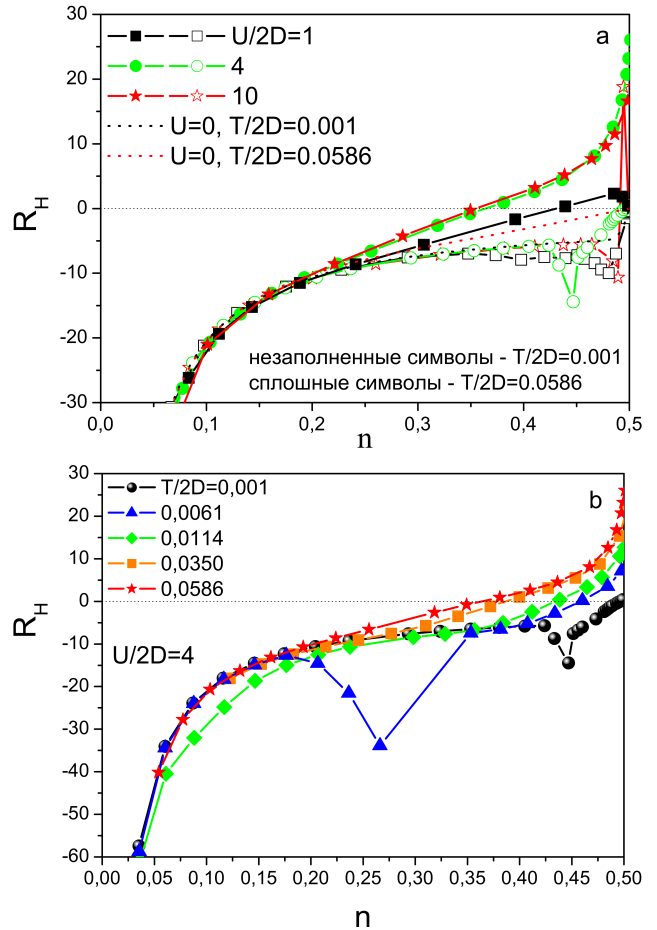


Рис. 8. Зависимость коэффициента Холла от заполнения в модели электронной зоны с полуэллиптической плотностью состояний: а — для различных значений U в низкотемпературном (незаполненные символы) и в высокотемпературном режиме (сплошные символы); б — для различных значений температуры при фиксированном значении $U/2D = 4$

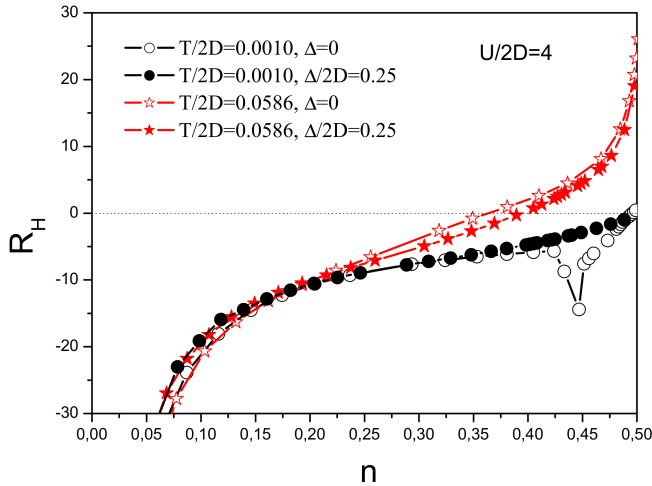


Рис. 9. Зависимость коэффициента Холла от заполнения зоны в низкотемпературном режиме (черные кривые) и высокотемпературном режиме (красные кривые) в отсутствии беспорядка $\Delta = 0$ (незаполненные символы) и при $\Delta/2D = 0.25$ (сплошные символы)

оказывается положительным (дырочным), уменьшаясь с ростом уровня дырочного допирования и при большом уровне допирования R_H становится отрицательным, изменяя знак (в моттовском диэлектрике) при $\delta = 1 - 2n \approx 1/3$, что снова подтверждает приведенные выше качественные оценки. Плавная эволюция зависимости коэффициента Холла от степени заполнения при росте температуры от низкотемпературного предела до высокотемпературного в моттовском диэлектрике ($U/2D = 4$) приведена на рис. 8b.

На рис. 9 продемонстрировано влияние беспорядка на коэффициент Холла в моттовском диэлектрике. В высокотемпературном пределе примесное рассеяние практически не влияет на R_H , а в низкотемпературном пределе беспорядок, размывая квазиэлектронный пик, устраняет аномальную немонотонность в зависимости R_H от n .

5. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Как уже упоминалось выше, в последние годы были проведены уникальные экспериментальные исследования эффекта Холла при низких температурах в нормальном состоянии высокотемпературных сверхпроводников (купратов), которое было реализовано в очень сильных внешних магнитных полях [2–4]. При этом была получена зависимость холловского числа $n_H = a^2/|eR_H|$ от степени допирования. Наблюдался постепенный переход от линейной зависимости от концентрации дырок пропорциональной δ в области малой их концентрации к значе-

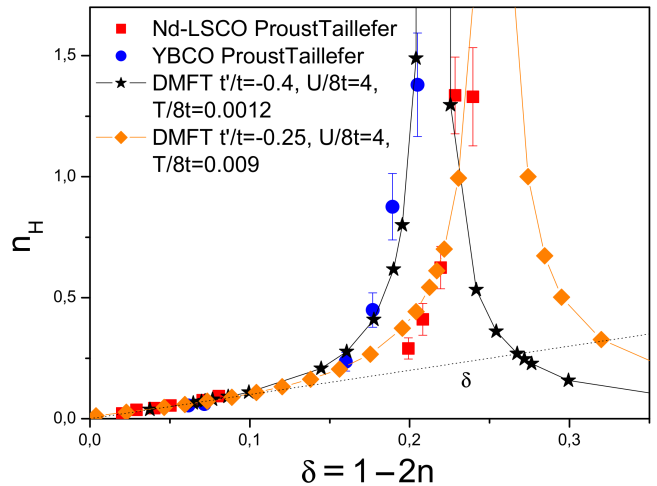


Рис. 10. Зависимость холловского числа n_H от степени допирования — сравнение с экспериментами [3,4] для YBCO и Nd-LSCO, $\delta = 1 - 2n$ — концентрация дырок. Звездочки и ромбики — результаты наших расчетов, синие кружочки и красные квадраты — эксперимент

ниям пропорциональным $(1 + \delta)$ в области достаточно больших концентраций порядка критической концентрации дырок, при которой происходит исчезновение (закрывание) псевдощели. Эти данные, в основном, интерпретируются в рамках картины реконструкции поверхности Ферми вблизи предполагаемой квантовой критической точки в рамках достаточно специфической модели купратов с неоднородной локализацией носителей [5,16]. Нужно заметить, что ни в одной из известных нам работ экспериментальные точки, надежно демонстрирующие зависимость, пропорциональную $(1 + \delta)$, отсутствуют, а надежным экспериментальным фактом является только наблюдаемый рост холловского числа.

Ниже предлагается альтернативная интерпретация роста холловского числа в этих экспериментах, как связанного с приближением к критической концентрации носителей, при которой меняется знак величины эффекта Холла (коэффициент Холла R_H обращается в нуль) [11].

На рис. 10 показано сравнение результатов наших расчетов для холловского числа (холловской концентрации) $n_H = a^2/|eR_H|$ для типичных значений параметров модели с экспериментальными данными по YBCO и Nd-LSCO из работ [3,4]. Видим, что даже при этом, достаточно произвольном, выборе параметров мы можем получить практически количественное согласие с экспериментом без всяких предположений о связи эффекта Холла с реконструкцией поверхности Ферми псевдощелью и близостью к соответствующей квантовой критической точке, которые использовались в работах [3–5,16].

Таким образом, оказывается, что интерпретация эффекта Холла в купратах на основе картины допирования нижней халлардовской зоны моттовского диэлектрика может оказаться достаточно разумной альтернативой картине, основанной на близости к квантовой критической точке.

С этой точки зрения, было бы крайне интересно более детально изучить эффект Холла в окрестности критической концентрации, соответствующей смене знака коэффициента Холла (расходимости холловского числа). Для этого требуется исследовать системы (купраты), в которых такая смена знака реально достигается при изменении степени допирования.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы исследовали поведение коэффициента Холла в металлической фазе, возникающей при допировании моттовского диэлектрика. Основное внимание мы уделили случаю дырочного допирования, характерного для большей части купратов. Был рассмотрен ряд двумерных моделей сильной связи для электронного спектра, подходящих для описания электронной структуры в купратах, а также и трехмерная модель с полуэллиптической затравочной плотностью состояний. Во всех моделях коэффициент Холла R_H в допированном моттовском диэлектрике существенно зависит от температуры. В низкотемпературном пределе R_H во многом определяется заполнением квазичастичного пика, что может приводить к заметной немонотонности в зависимости коэффициента Холла от степени допирования. В высокотемпературном пределе, когда квазичастичный пик существенно подавлен, R_H в основном определяется заполнением нижней (при дырочном допировании) или верхней (при электронном допировании) халлардовской зоны. В этом пределе смена знака эффекта Холла и соответствующая ей расходимость холловского числа происходит в простейшем (симметричном) случае вблизи величины заполнения зоны $n = 1/3$ в расчете на одну проекцию спина или $2/3$ для полной плотности электронов, что соответствует дырочному допированию $\delta = 1 - 2n = 1/3$, но в общем случае это заполнение достаточно сильно зависит от выбора параметров модели. Эта концентрация возникает из простых качественных оценок и не связана с более сложными факторами, такими как изменение топологии поверхности Ферми или с наличием квантовых критических точек.

Вполне удовлетворительное согласие полученных концентрационных зависимостей холловского числа с экспериментами на YBCO и Nd-LSCO [3, 4] показывает, что рассмотренная нами модель может быть достаточно разумной альтернативой картине эффекта Холла в окрестности квантовой критической точки, связанной с закрытием псевдощели [5, 16].

Финансирование. Работа Э.З.К., Н.А.К. и М.В.С. выполнялась при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-02-00011). Работа Д.И.Х. поддержана грантом DFG по проекту № 277146847 — CRC 1238.

ПРИЛОЖЕНИЕ

«Затравочная» электронная дисперсия и ее производные для зоны с полуэллиптической плотностью состояний

Будем считать электронный спектр, отвечающий плотности состояний (5) изотропным $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon(|\mathbf{p}|) \equiv \varepsilon(p)$. Для нахождения проводимостей (2) и (3) необходимо провести усреднение «по углам» производных по компонентам импульса, имеющихся в этих выражениях,

$$\left\langle \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} \right)^2 \right\rangle_{\Omega} = \varepsilon'^2(p) \left\langle \frac{p_x^2}{p^2} \right\rangle_{\Omega} = \frac{1}{d} \varepsilon'^2(p) = \frac{1}{3} \varepsilon'^2(p), \quad (9)$$

где

$$\langle \dots \rangle_{\Omega} = \int \frac{d\Omega}{4\pi} \dots$$

— усреднение по телесному углу в трехмерной ($d = 3$) системе, а

$$\varepsilon'(p) = \frac{d\varepsilon(p)}{dp}$$

— производная по модулю импульса

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} \right)^2 \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_y^2} &= \\ &= \varepsilon'^2(p) \left[\varepsilon''(p) \frac{p_x^2 p_y^2}{p^4} + \frac{\varepsilon'(p)}{p} \frac{p_x^2 p^2 - p_x^2 p_y^2}{p^4} \right], \quad (10) \end{aligned}$$

где $\varepsilon''(p) = d^2\varepsilon(p)/dp^2$. Поэтому возникает задача найти среднее по углам $\langle p_x^2 p_y^2 / p^4 \rangle_{\Omega}$. Введем обозначения:

$$\left\langle \frac{p_x^4}{p^4} \right\rangle_{\Omega} \equiv a \quad \text{и} \quad \left\langle \frac{p_x^2 p_y^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} \equiv b.$$

С одной стороны:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} &= \\ &= \left\langle \frac{(p_x^4 + p_y^4 + p_z^4) + 2p_x^2 p_y^2 + 2p_x^2 p_z^2 + 2p_y^2 p_z^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} = \\ &= d \left\langle \frac{p_x^4}{p^4} \right\rangle_{\Omega} + d(d-1) \left\langle \frac{p_x^2 p_y^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} = 3a + 6b = 1. \end{aligned} \quad (11)$$

С другой стороны:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{(p_x^2 + p_y^2)^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} &= \left\langle \frac{p_x^4 + p_y^4 + 2p_x^2 p_y^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} = \\ &= 2a + 2b = \frac{8}{15}. \end{aligned} \quad (12)$$

Поскольку

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{(p_x^2 + p_y^2)^2}{p^4} \right\rangle_{\Omega} &= \langle \sin^4 \theta \rangle_{\Omega} = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \sin \theta \sin^4 \theta d\theta = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (1 - \tau^2)^2 d\tau = \frac{8}{15}, \end{aligned} \quad (13)$$

где θ — угол между вектором \mathbf{p} и осью z , из системы уравнений (11), (12) сразу находим $a = \langle p_x^4/p^4 \rangle_{\Omega} = 1/5$ и $b = \langle p_x^2 p_y^2/p^4 \rangle_{\Omega} = 1/15$, так что получаем

$$\left\langle \left(\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x} \right)^2 \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_y^2} \right\rangle_{\Omega} = \frac{\varepsilon'^2(p)}{15} \left[\varepsilon''(p) + \frac{4\varepsilon'(p)}{p} \right]. \quad (14)$$

Для нахождения производных $\varepsilon'(p)$, $\varepsilon''(p)$ для спектра, определяемого полуэллиптической плотностью состояний (5), можно воспользоваться подходом, развитым в [13]. Приравнивая число состояний в элементе фазового объема $d^3 p$ числу состояний в области энергий $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$, получаем дифференциальное уравнение для определения $\varepsilon(p)$:

$$\frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi)^3} = N_0(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (15)$$

Предполагая квадратичность закона дисперсии $\varepsilon(p)$ вблизи нижнего края зоны, получаем начальное условие к (15): $p \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow -D$. В результате:

$$p = \left[6\pi \left(\pi - \varphi + \frac{1}{2} \sin(2\varphi) \right) \right]^{1/3}, \quad (16)$$

где $\varphi = \arccos(\varepsilon/D)$, а импульс дан в единицах обратного параметра решетки. Данное выражение

неявным образом определяет закон дисперсии $\varepsilon(p)$ на электронном участке спектра $\varepsilon \in [-D, 0]$.

Можно определить характерный импульс p_0 , соответствующий $\varepsilon = 0$:

$$p_0 = p(\varepsilon = 0) = (3\pi^2)^{1/3}. \quad (17)$$

Нас интересуют первые две производные по импульсу от такого спектра. Из (15) получаем

$$\varepsilon'(p) = \frac{d\varepsilon}{dp} = \frac{p^2}{2\pi^2} \frac{1}{N_0(\varepsilon)}, \quad (18)$$

где p определяется выражением (16).

$$\begin{aligned} \varepsilon''(p) &= \frac{d}{dp} \frac{d\varepsilon}{dp} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{2pN_0(\varepsilon) - p^2 \frac{dN_0(\varepsilon)}{d\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dp}}{N_0^2(\varepsilon)} = \\ &= \frac{1}{N_0(\varepsilon)} \left[\frac{p}{\pi^2} - \varepsilon'^2(p) \frac{dN_0(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right], \end{aligned} \quad (19)$$

где

$$\frac{dN_0(\varepsilon)}{d\varepsilon} = -\frac{2}{\pi D^2} \frac{\varepsilon}{\sqrt{D^2 - \varepsilon^2}},$$

$\varepsilon'(p)$ определяется (18), а p определяется выражением (16).

На дырочном участке спектра ($\varepsilon \in [0, D]$) для получения квадратичного закона дисперсии вблизи верхнего края зоны ($\varepsilon \rightarrow D$) вводим дырочный импульс $\tilde{p} = 2p_0 - p$ и приравниваем число состояний в элементе фазового объема $d^3 \tilde{p}$ и в энергетической полосе $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$:

$$\frac{4\pi \tilde{p}^2 d\tilde{p}}{(2\pi)^3} = -N_0(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (20)$$

Требуя $\tilde{p} \rightarrow 0$ на верхнем крае зоны $\varepsilon \rightarrow 0$, получаем

$$\tilde{p} = \left[6\pi \left(\varphi - \frac{1}{2} \sin(2\varphi) \right) \right]^{1/3}. \quad (21)$$

Для скорости на дырочном участке спектра получаем

$$\varepsilon'(p) = -\frac{d\varepsilon}{d\tilde{p}} = \frac{\tilde{p}^2}{2\pi^2} \frac{1}{N_0(\varepsilon)}. \quad (22)$$

Выражения (18), (22) определяют зависимость скорости $\varepsilon'(p)$ от энергии. Легко убедиться, что скорость оказывается четной по энергии и обращается в нуль на краях зоны. Вторая производная по импульсу в таком подходе явно определена на электронном участке спектра ($\varepsilon \in [-D, 0]$), на дырочном это сделать сложнее. Однако можно потребовать от модели полной электрон-дырочной симметрии, которая сводится к требованию четности по $\varepsilon(p)$ квадрата скорости, входящего в выражение (2) и нечетности (смена знака при изменении типа носителей

заряда) величины (14), входящей в выражение (3) для холловской проводимости. С учетом такой симметрии полученные в этом приложении выражения позволяют перейти в (2), (3) от суммирования по импульсам к интегрированию по энергии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Iye, J. Phys. Chem. Solids **53**, 1561 (1992).
2. F. F. Balakirev, J. B. Betts, A. Migliori, I. Tsukada, Y. Ando, and G. S. Boebinger, Phys. Rev. Lett. **101**, 017004 (2009).
3. S. Badoux, W. Tabis, F. Laliberte, B. Vignolle, D. Vignolles, J. Beard, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud, L. Taillefer, and C. Proust, Nature **531**, 210 (2016).
4. C. Collignon, S. Badoux, S. A. A. Afshar, B. Michon, F. Laliberte, O. Cyr-Choiniere, J.-S. Zhou, S. Licciardello, S. Wiedmann, N. Doiron-Leyraud, and L. Taillefer, Phys. Rev. B **95**, 224517 (2017).
5. C. Proust and L. Taillefer, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **10** 409 (2019).
6. Th. Pruschke, M. Jarrell, and J. K. Freericks, Adv. Phys. **44**, 187 (1995).
7. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
8. D. Vollhardt in: *Lectures on the Physics of Strongly Correlated Systems XIV*, eds. A. Avella and F. Mancini, AIP Conference Proceed. vol. 1297, AIP, Melville, New York (2010), p. 339; ArXiv: 1004.5069.
9. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, М. В. Садовский, УФН **182**, 345 (2012) [Phys. Usp. **55**, 325 (2010)].
10. G. Rohringer, H. Hafermann, A. Toschi, A. A. Katanin, A. E. Antipov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, and K. Held. Rev. Mod. Phys. **90**, 025003 (2018).
11. Э. З. Кучинский, Н. А. Кулеева, Д. И. Хомский, М. В. Садовский, Письма ЖЭТФ **115**, 444 (2022) [JETP Lett. **115**, 402 (2022)].
12. R. Bulla, T. A. Costi, and T. Pruschke, Rev. Mod. Phys. **60**, 395 (2008).
13. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, ЖЭТФ **133**, 670 (2008) [JETP **106**, 581 (2008)].
14. D. I. Khomskii, *Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids*, Cambridge University Press, NY (2010).
15. M. V. Sadovskii, I. A. Nekrasov, E. Z. Kuchinskii, Th. Pruschke, and V. I. Anisimov, Phys. Rev. B **72**, 155105 (2005).
16. D. Pelc, P. Popčević, M. Požek, M. Greven, and N. Barišić, Sci. Adv. **5**, eaau4538 (2019).