

Анализ особенностей поведения коэффициента Нернста–Эттингсгаузена в проводниках с узкой проводящей зоной и применение его результатов к случаю ВТСП-материалов

© Н.В. Агеев, В.Э. Гасумянц

Санкт-Петербургский государственный технический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: VGAS@twonet.stu.neva.ru

(Поступила в Редакцию 6 октября 2000 г.
В окончательной редакции 1 марта 2001 г.)

Проведен теоретический анализ коэффициента Нернста–Эттингсгаузена Q в случае наличия в зонном спектре материала узкой проводящей зоны. Показано, что это обстоятельство приводит к качественному изменению механизма возникновения эффекта Нернста–Эттингсгаузена по сравнению с классическим случаем широкой проводящей зоны, а поведение коэффициента Нернста–Эттингсгаузена характеризуется появлением ряда специфических особенностей, отличных от случая классической теории кинетических коэффициентов в полупроводниках и металлах. Показано, что в случае узкой зоны наиболее сильное влияние на вид зависимости $Q(T)$ оказывает асимметрия дисперсионной кривой, в то время как другие детали строения зонного спектра и свойств системы носителей заряда, включая характер энергетической зависимости времени релаксации, оказываются менее существенными и могут в первом приближении не учитываться. Получены расчетные кривые $Q(T)$, качественно соответствующие экспериментальным зависимостям для легированных ВТСП системы $YBa_2Cu_3O_y$, и продемонстрирована возможность использования предложенного подхода для комплексного анализа экспериментальных температурных зависимостей четырех кинетических коэффициентов в ВТСП-материалах в нормальной фазе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования России (грант № E00-3.4-546).

Вопрос о строении зонного спектра и в целом о природе нормального состояния ВТСП-материалов широко обсуждается в литературе с момента открытия данного класса веществ. К числу ярких проявлений необычных свойств нормального состояния, непосредственно связанных со строением зонного спектра в этих соединениях, можно отнести экспериментальные результаты, полученные при исследовании электронных явлений переноса. К настоящему времени накоплен большой объем экспериментальных данных о температурных зависимостях кинетических коэффициентов (удельного сопротивления ρ , коэффициентов термоэдс S и Холла R_H) в высокотемпературных сверхпроводниках различных классов, а также характере их трансформации при различных отклонениях от стехиометрии (см. [1–3]). Было обнаружено, что эти зависимости обладают рядом нетривиальных особенностей, отличающих ВТСП-соединения от традиционных объектов исследования физики твердого тела — металлов и полупроводников.

В противоположность большому объему экспериментальных данных о поведении трех перечисленных выше кинетических коэффициентов данные о температурных зависимостях коэффициента Нернста–Эттингсгаузена (НЭ) Q в нормальном состоянии к настоящему моменту малочисленны. Попытки анализа экспериментальных зависимостей $Q(T)$, предпринятые в [4–6], ограничиваются качественным обсуждением одной кривой $Q(T)$, полученной для конкретного образца, и базируются на предположениях, недостаточно обоснованных и нуждающихся в серьезной дополнительной провер-

ке. Действительно полезным и теоретически значимым может стать подход, базирующийся на сравнительном анализе большого массива экспериментальных данных, в том числе и по характеру трансформации зависимостей $Q(T)$ при направленном изменении состава образцов. Важно также рассматривать поведение коэффициента НЭ не отдельно, а в совокупности с результатами для других кинетических коэффициентов. Такой подход может позволить с единых позиций объяснить всю совокупность данных по электронным явлениям переноса в нормальной фазе. Это, во-первых, даст возможность получить наиболее полную информацию об особенностях электронного транспорта в ВТСП-материалах в нормальной фазе, а во-вторых, позволит извлекать из зависимостей $Q(T)$ полезную и объективную информацию.

За основу для проведения подобного анализа нами была выбрана модель узкой зоны, впервые предложенная в [7] и детально описанная в [8]. Данная модель основана на предположении о существовании в зонном спектре ВТСП узкого пика плотности состояний. Отметим, что к выводу о наличии в зонном спектре ВТСП узкой проводящей зоны, или узкого пика плотности состояний, в котором расположен уровень Ферми, приходят авторы и ряда других работ, как экспериментальных [9–21], так и теоретических [22–28]. Преимуществом модели узкой зоны, по нашему мнению, является то, что она содержит небольшое число параметров, имеющих ясную физическую интерпретацию, позволяет описать поведение не одного кинетического коэффициента, а одновременно трех (удельного сопротивления, коэффициентов термо-

эдс и Холла) и дает возможность на основании количественного анализа экспериментальных данных определить параметры зонного спектра и системы носителей заряда в нормальной фазе для образцов различного состава. Представляется важным включение в анализ электронных явлений переноса в рамках модели узкой зоны и данных о коэффициенте НЭ. Поскольку анализ эффекта НЭ в случае проводников с узкой зоной ранее систематически не проводился (исключение составляет работа [29], где кратко обсуждалась зависимость значения Q от заполнения узкой зоны электронами в металле при отсутствии энергетической зависимости времени релаксации), реализация подобного подхода требует предварительного детального теоретического рассмотрения, имеющего самостоятельное значение.

В связи с вышеизложенным целью данной работы являлось проведение теоретического анализа коэффициента НЭ в случае наличия в зонном спектре материала узкого пика плотности состояний, а также рассмотрение особенностей применения результатов этого анализа к описанию экспериментальных температурных зависимостей коэффициента НЭ в высокотемпературных сверхпроводниках системы $YBa_2Cu_3O_y$ в нормальной фазе.

1. Особенности возникновения эффекта Нернста–Эттингсгаузена в случае узкой проводящей зоны

Напомним, что эффект НЭ заключается в следующем. Образец находится в магнитном поле H , направление которого перпендикулярно градиенту температуры ∇T , приложенному к образцу. При этом возникает электрическое поле E_N , перпендикулярное магнитному полю и градиенту температуры и пропорциональное их величине $E_N = QH\nabla T$. Коэффициент пропорциональности в этом выражении Q и является коэффициентом НЭ. В классическом случае его величина и знак определяются характером энергетической зависимости времени релаксации носителей заряда τ . Если τ увеличивается с ростом энергии, то коэффициент Q положительный, если уменьшается — отрицательный, при отсутствии энергетической зависимости времени релаксации $Q = 0$. В результате анализ данных, полученных для коэффициента НЭ, позволяет делать выводы о механизме рассеяния носителей заряда в исследуемых материалах.

Однако это справедливо лишь в классическом случае широкой проводящей зоны и квадратичного закона дисперсии. При наличии в зонном спектре узкой проводящей зоны поведение коэффициента НЭ характеризуется, как и в случае других кинетических коэффициентов, появлением ряда специфических особенностей, отличных от случая классической теории кинетических коэффициентов. Для выяснения причин появления этих особенностей рассмотрим качественно механизм возникновения эффекта НЭ в случае узкой проводящей зоны.

В пределе узкой зоны ее ширина W сравнима с величиной $k_B T$, где k_B — постоянная Больцмана, т. е. фермиевское размытие захватывает заметную часть зоны. Если уровень химического потенциала μ лежит вблизи середины зоны (что характерно для ВТСП-материалов, см. [8,30–36]), то область энергий $\varepsilon = \mu \pm (1-2)k_B T$ включает как верхнюю, так и нижнюю части зоны. В такой ситуации нецелесообразно вводить понятие дырки и изучать движение двух типов носителей — электронов и дырок, поскольку благодаря тепловой энергии электроны постоянно перемещаются из нижней половины зоны в верхнюю и наоборот. Поэтому будем считать, что весь транспорт в узкой зоне определяется одним типом носителей — электронами, которые обладают положительной или отрицательной эффективной массой в нижней или верхней половинах зоны соответственно.

В рамках данного условия рассмотрим частный случай, когда зона является симметричной, а уровень химического потенциала совпадает с ее серединой. Отметим, что в этом случае закон дисперсии в актуальной области энергий является заведомо неквадратичным. При приложении к образцу градиента температуры термодиффузионный ток, согласно решению кинетического уравнения Больцмана в приближении времени релаксации, определяется выражением

$$j = \int \left(e\tau \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \bar{V} \frac{\varepsilon - \mu}{T} \frac{\partial T}{\partial R} D(\varepsilon) \right) \bar{V} d\varepsilon, \quad (1)$$

где f_0 — равновесная функция распределения Ферми–Дирака, \bar{V} — средняя скорость электронов, $D(\varepsilon)$ — функция плотности состояний; начало отсчета энергии находится в середине зоны, интегрирование ведется по всей зоне, т. е. в пределах от $-W/2$ до $W/2$.

Из (1) видно, что электроны, имеющие энергию выше уровня химического потенциала, будут двигаться в одну сторону, а электроны, имеющие энергию ниже уровня химического потенциала, — в противоположную. Поскольку химический потенциал находится в центре зоны, эффективная масса электронов с $\varepsilon < \mu$ будет положительной, а электронов с $\varepsilon > \mu$ — отрицательной. Под интегралом (1) стоят две четные функции энергии и одна нечетная, следовательно, он будет равен нулю, т. е. будет равен нулю коэффициент термоэдс (аналогично коэффициент Холла в рассматриваемом случае также будет равен нулю). Однако, хотя суммарный термодиффузионный ток равен нулю, в образце присутствуют два встречных термодиффузионных потока электронов, энергия которых выше или ниже уровня химического потенциала. Поскольку эти потоки состоят из электронов с положительной и отрицательной массами, при приложении магнитного поля они будут отклоняться в одну сторону. В результате возникнут поток носителей заряда вдоль оси, перпендикулярной градиенту температуры и направлению магнитного поля, и встречный ему дрейфовый ток. Это и есть эффект Нернста–Эттингсгаузена. В данном случае наличие этого эффекта определяется не

характером энергетической зависимости времени релаксации, а тем обстоятельством, что в случае узкой зоны закон дисперсии не является квадратичным. Отметим, что знак коэффициента НЭ в рассмотренном случае, когда зона является симметричной и заполненной наполовину, будет положительным при любой температуре.

Таким образом, узость проводящей зоны приводит к качественному изменению как механизма возникновения эффекта НЭ, так и поведения коэффициента НЭ по сравнению с классическим случаем широкой проводящей зоны. Для детального анализа рассмотрим выражение для коэффициента НЭ в рамках модели узкой зоны.

2. Коэффициент Нернста–Эттингсгаузена в модели узкой зоны

Стандартный метод решения кинетического уравнения Больцмана в приближении времени релаксации при наличии температурного и слабого магнитного полей позволяет для коэффициента НЭ получить

$$Q = -\frac{1}{eT} \left(\frac{I_{\sigma_{H1}}}{I_{\sigma_0}} - \frac{I_{\sigma_{H0}} I_{\sigma_1}}{I_{\sigma_0}^2} \right), \quad (2)$$

где введены обозначения

$$I_{\sigma_0} = \int \sigma(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon, \quad I_{\sigma_1} = \int \sigma(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon d\varepsilon,$$

$$I_{\sigma_{H0}} = \int \sigma_H(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon, \quad I_{\sigma_{H1}} = \int \sigma_H(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon d\varepsilon, \quad (3)$$

$\sigma(\varepsilon) = \frac{\tau e^2 V^2}{3} D(\varepsilon)$ — дифференциальная проводимость, $\sigma_H(\varepsilon) = -\frac{\tau^2 e^3 V^2}{3m^*} D(\varepsilon) = u\sigma(\varepsilon)$ — холловская дифференциальная проводимость, $D(\varepsilon)$ — функция плотности электронных состояний, u — подвижность электронов, m^* — их эффективная масса; интегрирование в (3) ведется по всей зоне.

Выражение (2) может считаться общим и справедливым для любого вида зонного спектра. Единственным ограничением является условие изотропии. В анизотропном случае формула для коэффициента НЭ усложняется вследствие необходимости учета дисперсионных зависимостей разного вида для различных направлений. Что касается ВТСП-материалов, то сильная анизотропия приводит к квазидвумерному характеру проводимости в этих соединениях; учет этого обстоятельства и рассмотрение процесса проводимости в плоскости ab могут привести лишь к незначительному изменению коэффициентов, входящих в выражения для интегралов в (2), и не изменят их общий вид. Для простоты далее ограничимся анализом выражения для Q в изотропном случае.

Для количественного анализа коэффициента НЭ необходимо задаться конкретным видом функций $D(\varepsilon)$, $\sigma(\varepsilon)$ и $\sigma_H(\varepsilon)$, входящих в интегралы (3). Воспользуемся методом их аппроксимации в рамках модели узкой зоны.

Как показано в [8], при наличии в зонном спектре узкого пика плотности состояний шириной $W \cong 100 \text{ meV}$ именно узость этого пика (а не детали строения зонного спектра и особенности свойств системы носителей заряда) определяет в первом приближении поведение кинетических коэффициентов. Это позволяет использовать для их анализа простейшую прямоугольную аппроксимацию функций $D(\varepsilon)$, $\sigma(\varepsilon)$ и $\sigma_H(\varepsilon)$

$$\begin{aligned} D(\varepsilon) &= \langle D \rangle && \text{при } -W_D/2 < \varepsilon < W_D/2, \\ D(\varepsilon) &= 0 && \text{при } \varepsilon < -W_D/2 \text{ и } \varepsilon > W_D/2, \\ \sigma(\varepsilon) &= \langle \sigma \rangle && \text{при } -W_\sigma/2 < \varepsilon < W_\sigma/2, \\ \sigma(\varepsilon) &= 0 && \text{при } \varepsilon < -W_\sigma/2 \text{ и } \varepsilon > W_\sigma/2, \\ |\sigma_H(\varepsilon)| &= \langle \sigma_H \rangle && \text{при } -W_\sigma/2 < \varepsilon < W_\sigma/2, \\ \sigma_H(\varepsilon) &= 0 && \text{при } \varepsilon < -W_\sigma/2 \text{ и } \varepsilon > W_\sigma/2, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\sigma_H(\varepsilon) < 0$ при $\varepsilon < 0$, $\sigma_H(\varepsilon) > 0$ при $\varepsilon > 0$,

$$\begin{aligned} \langle D \rangle &= \frac{1}{W_D} \int_{-W_D/2}^{W_D/2} D(\varepsilon) d\varepsilon, & \langle \sigma \rangle &= \frac{1}{W_\sigma} \int_{-W_\sigma/2}^{W_\sigma/2} \sigma(\varepsilon) d\varepsilon, \\ \langle \sigma_H \rangle &= -\frac{2}{W_\sigma} \int_{-W_\sigma/2}^0 \sigma_H(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{2}{W_\sigma} \int_0^{W_\sigma/2} \sigma_H(\varepsilon) d\varepsilon. \end{aligned}$$

При такой аппроксимации значения времени релаксации, скорости движения электронов и их массы (с точностью до знака) усредняются в узком интервале энергий $\varepsilon = -W_\sigma/2 - W_\sigma/2$, сравнимом с величиной фермиевского размытия. Это позволяет получить достаточно простые аналитические выражения, описывающие температурные зависимости химического потенциала и трех кинетических коэффициентов [8]. Выгодность использования аналогичного подхода для анализа коэффициентов НЭ очевидна: он позволяет сильно упростить его расчет и благодаря этому качественно и количественно проанализировать его поведение. Кроме того, становится возможным проведение комплексного анализа поведения четырех кинетических коэффициентов в рамках единой модели.

Модель узкой зоны содержит три основных параметра: W_D — полная эффективная ширина зоны; W_σ — эффективная ширина зоны "по проводимости" (при этом отношение $C = W_\sigma/W_D$ характеризует степень локализации носителей заряда); F — степень заполнения зоны электронами, равная отношению полного числа носителей к полному числу состояний в зоне и определяющая наряду с W_D температурную зависимость уровня химического потенциала

$$\mu^* \equiv \frac{\mu}{k_B T} = \ln \frac{FW_D/2k_B T}{(1-F)W_D/2k_B T}. \quad (5)$$

Кроме этих трех основных параметров для учета возможной слабой асимметрии узкой зоны необходимо ввести дополнительный, характеризующий сдвиг центра

прямоугольника дифференциальной проводимости относительно центра зоны, параметр b (степень асимметрии зоны). В этом случае при вычислении кинетических коэффициентов значение μ^* , рассчитанное по (5), должно заменяться на

$$(\mu^*)' = \mu^* - bW_D/k_B T. \quad (6)$$

Отметим, что, как показано в наших предыдущих публикациях, в случае ВТСП-материалов различных семейств значения всех четырех модельных параметров могут быть определены на основании количественного анализа экспериментальных данных о коэффициенте термоэдс [8,30–36].

В рамках аппроксимации (4) интегралы (3) существенно упрощаются, что позволяет качественно проанализировать особенности поведения коэффициента НЭ в модели узкой зоны. Прежде всего выясним, как будет изменяться характер зависимости $Q(T)$ при переходе к предельным случаям узкой и широкой зоны.

В высокотемпературном пределе (т.е. при выполнении условия $k_B T > W_D/2$), подставляя (4) в (3) и интегрируя (3) в пределах $-W_\sigma < \varepsilon < W_\sigma$ с учетом $\langle \sigma_H \rangle = \bar{u}(\sigma)$, где \bar{u} — среднее по зоне значение подвижности электронов, легко получить

$$\lim_{T \rightarrow \infty} Q = -\frac{1}{eT} u \left(\frac{\int_{\frac{1}{4}}^{\frac{1}{4}} \text{sign}(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon}{\int_{\frac{1}{4}}^{\frac{1}{4}} \varepsilon d\varepsilon} - \frac{\int_{\frac{1}{4}}^{\frac{1}{4}} \text{sign}(\varepsilon) d\varepsilon \int_{\frac{1}{4}}^{\frac{1}{4}} \varepsilon d\varepsilon}{\left(\int_{\frac{1}{4}}^{\frac{1}{4}} \varepsilon d\varepsilon\right)^2} \right) = 0.$$

Таким образом, независимо от деталей строения зонного спектра в узкой зоне и степени ее заполнения электронами коэффициент НЭ при высоких температурах стремится к нулю по закону $Q \propto 1/T$.

В другом предельном случае — $T \rightarrow 0$ (т.е. при $W_D/2 \gg k_B T$) — в рамках используемой аппроксимации мы имеем классическую ситуацию широкой зоны при отсутствии энергетической зависимости времени релаксации. При взятии интегралов (3) можно ограничить пределы интегрирования диапазонами энергий, в котором функция $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)$ отлична от нуля. Ясно, что если уровень химического потенциала лежит достаточно далеко по энергии от центра зоны, где нарушается квадратичный закон дисперсии, т.е. выполнено условие $|\mu| \gg k_B T$, то в рассматриваемом интервале энергий значение энергии ε в интегралах (3) заведомо сохраняет знак. В результате $I_{\sigma_{H1}} = \bar{\mu} I_{\sigma_1}$, $I_{\sigma_{H0}} = \bar{\mu} I_{\sigma_0}$ и выражение в скобках в (3) равно нулю. Следовательно, в пределе широкой зоны коэффициент НЭ будет равен нулю, причем независимо от того в верхней или нижней половине зоны находится уровень химического потенциала. Такое поведение Q полностью совпадает с классическим случаем широкой зоны при условии отсутствия энергетической зависимости времени релаксации.

Таким образом, в случае зоны промежуточной ширины коэффициент НЭ, рассчитанный в рамках модели

узкой зоны, будет стремиться к нулю в области как высоких, так и низких температур, и зависимость $Q(T)$ будет иметь максимум при промежуточных температурах. В области промежуточных температур на зависимость $Q(T)$ помимо узости зоны существенное влияние могут оказывать значения основных модельных параметров (F , W_D , C , b), а также более мелкие детали строения зонного спектра, учет которых в рамках используемой модели может производиться путем изменения способа модельной аппроксимации функций $D(\varepsilon)$, $\sigma(\varepsilon)$ и $\sigma_H(\varepsilon)$. Результаты количественного анализа этого влияния представлены далее.

3. Особенности температурных зависимостей коэффициента Нернста–Эттингсгаузена в случае узкой проводящей зоны

Обсудим характер зависимостей $Q(T)$ в материале с узкой проводящей зоной и проанализируем возможность описания в рамках модели узкой зоны экспериментальных данных для ВТСП-материалов. Для этого прежде всего необходимо выбрать способ модельной аппроксимации функций $\sigma(\varepsilon)$ и $\sigma_H(\varepsilon)$, который, с одной стороны, был бы физически ясным, а с другой — позволял бы получать расчетные зависимости $Q(T)$, качественно соответствующие наблюдаемым экспериментально. Кроме того, используемые аппроксимации и значения основных модельных параметров должны позволять получать расчетные кривые, соответствующие экспериментальным данным для зависимостей $\rho(T)$, $S(T)$ и $R_H(T)$. Подробный анализ полученных нами экспериментальных результатов для зависимостей $Q(T)$ в легированных ВТСП системы $YBa_2Cu_3O_y$ будет проведен в другой работе. Не обсуждая здесь детально эти результаты, отметим главные характерные особенности зависимостей $Q(T)$, обнаруженные нами [37,38] и в работе [5] и наблюдаемые для образцов различного состава:

- коэффициент НЭ при $T = 300$ К для $YBa_2Cu_3O_y$ всегда положителен, в области низких температур для ряда составов наблюдается переход к отрицательным значениям Q ;
- значения Q слабо возрастают при понижении температуры от $T = 300$ К;
- на зависимости $Q(T)$ наблюдается широкий максимум при температурах $T = 200–260$ К в зависимости от состава образцов;
- при дальнейшем понижении температуры значения Q резко падают.

Все эти особенности должны учитываться при разработке модели для описания поведения коэффициента НЭ в ВТСП.

Прежде всего проанализируем уже обсуждавшийся нами случай симметричной узкой зоны, когда уровень Ферми лежит вблизи ее середины. Результаты расчета

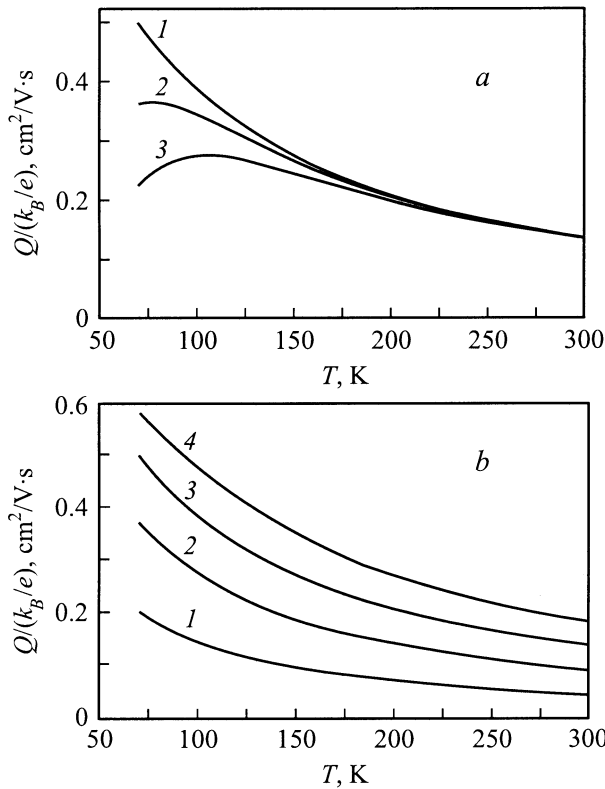


Рис. 1. Расчетные зависимости $Q(T)$ в случае симметричной узкой зоны при различных значениях степени заполнения зоны $F = 0.5$ (1); 0.4, 0.6 (2); 0.3, 0.7 (3) (a) и степени локализации носителей заряда $C = 0.1$ (1), 0.2 (2), 0.3 (3), 0.4 (4) (b). Значения параметров модели: $W_D = 100$ meV, $u = 0.5$ cm²/V · s; $C = 0.3$ (a), $F = 0.5$ (b).

температурной зависимости коэффициента НЭ в рамках модельной аппроксимации (4) для различных значений F и C приведены на рис. 1, a и b соответственно. Ширина зоны принималась равной $W_D = 100$ meV, а подвижность носителей заряда $u = 0.5$ cm²/V · s. Из рис. 1, a видно, что при высоких температурах коэффициент НЭ падает пропорционально T^{-1} , а его значение при этом не зависит от степени заполнения зоны, как это уже отмечалось выше. Независимо от степени заполнения зоны коэффициент НЭ всегда положительный. Так, например, в случае $F = 0.3$, когда коэффициенты термоэдс и Холла, рассчитанные в модели узкой зоны, принимают отрицательные значения, коэффициент НЭ остается положительным. С изменением степени заполнения зоны, зависимость $Q(T)$ меняется, причем как рост F , так и ее уменьшение относительно половинного заполнения зоны вызывают одинаковое изменение характера зависимости $Q(T)$, а максимальных значений в области низких температур коэффициент НЭ достигает при $F = 0.5$, т.е. при нахождении μ в области наиболее сильной неквадратичности закона дисперсии. Таким образом, зависимость $Q(T)$ при варьировании F изменяется симметрично относительно половинного заполнения зоны.

Отметим, что эти особенности зависимости $Q(T)$ совпадают с результатами, полученными в [29]. Что касается степени локализации носителей заряда C , то, как видно из рис. 1, b, с ростом доли делокализованных состояний значение Q увеличивается во всем температурном интервале, однако качественный вид зависимости $Q(T)$ при этом остается неизменным.

Рассмотрим влияние ширины зоны на зависимость $Q(T)$. На рис. 2, a приведены зависимости $Q(T)$, рассчитанные для различных величин W_D при постоянных значениях $F = 0.6$ и $C = 0.3$. Как было показано выше, и в высокотемпературном, и в низкотемпературном пределах коэффициент Q должен стремиться к нулю. При этом низкотемпературный предел характеризуется соотношением $|\mu| \gg k_B T$, т.е. реализуется в случае, когда фермиевское размытие функции распределения не затрагивает области в середине узкой зоны, где нарушается квадратичный закон дисперсии и происходит смена знака эффективной массы. Расширение зоны при постоянном значении F приводит к росту величины $|\mu|$ и соответственно выполнению условия $|\mu| \gg k_B T$ при более высоких температурах. Это приводит к смещению участка роста коэффициента НЭ с увеличением температуры на зависимости $Q(T)$ в сторону более высоких температур.

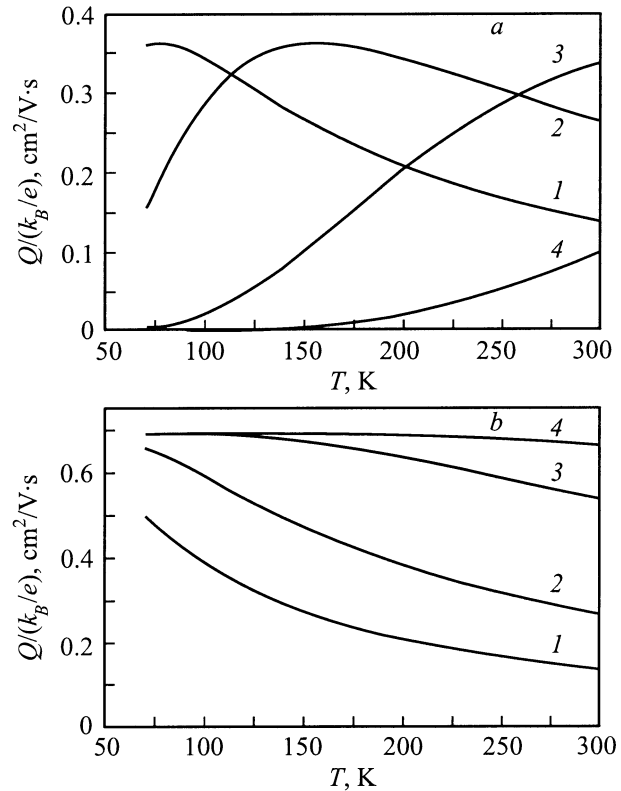


Рис. 2. Расчетные зависимости $Q(T)$ в случае симметричной узкой зоны при различных значениях ее ширины. Значения параметров модели: $C = 0.3$, $u = 0.5$ cm²/V · s, $F = 0.6$ (a) и 0.5 (b). W_D : 1 — 100 meV, 2 — 200 meV, 3 — 500 meV, 4 — 1 eV.

Падение значений Q с ростом температуры, наблюдаемое на кривых 1 и 2, связано с наступлением высокотемпературного предела, когда полуширина узкой зоны становится сравнимой с величиной фермиевского размытия. Это условие с увеличением ширины зоны выполняется при все более высоких температурах. Поэтому участок падения значения Q с ростом температуры отсутствует на зависимостях 3 и 4, находясь за пределами приведенного температурного интервала (50–300 К).

Отдельно необходимо рассмотреть случай половинного заполнения зоны ($F = 0.5$), когда уровень Ферми располагается в середине зоны, т.е. непосредственно в области, где нарушается квадратичный закон дисперсии. При таких условиях значение химического потенциала, рассчитанное по (4), равно нулю, и условие $|\mu| \gg k_B T$ не выполняется ни при каких температурах; следовательно, низкотемпературный предел не реализуется. Соответственно на расчетных температурных зависимостях $Q(T)$ отсутствует участок роста коэффициента Q с увеличением температуры (рис. 2, *b*). На поведение коэффициента НЭ в высокотемпературном пределе половинное заполнение зоны качественного влияния не оказывает. Расчетные кривые тем быстрее стремятся к нулю, чем меньше величина ширины зоны.

Большинство из зависимостей $Q(T)$, представленных на рис. 1, 2, не соответствует наблюдаемым в эксперименте для ВТСП-материалов. Исключение составляют кривая 3 на рис. 1, *a* и кривая 2 на рис. 2, *a*. Однако, как уже указывалось выше, при анализе экспериментальных зависимостей $Q(T)$ в рамках модели узкой зоны отсутствует большая свобода выбора модельных параметров, так как они "жестко" определяются на основе анализа зависимостей $S(T)$, полученных для тех же образцов. Значения параметров $F = 0.6$ и $W_D = 200$ meV, для которых рассчитана кривая 2 на рис. 2, *a*, и тем более значения $F = 0.3$ и $W_D = 100$ meV (кривая 3 на рис. 1, *a*), не реализуются для образцов состава $YBa_2Cu_3O_y$ при $y \approx 7$ [8].

Таким образом, в рамках модели симметричной узкой зоны при одновременном анализе зависимостей $S(T)$ и $Q(T)$ не удается достичь качественного согласия расчетных зависимостей с результатами эксперимента. В то же время, как указывалось в работах [8,34,36], посвященных применению модели узкой зоны к описанию транспортных свойств ВТСП системы $YBa_2Cu_3O_y$, проводящая зона в этом соединении почти симметричная. Выходом из данной ситуации является предположение о наличии особенностей в зонном спектре, которые не оказывают влияния на поведение удельного сопротивления и коэффициента термоэдс (или оказывают на эти зависимости слабое влияние), но к которым был бы чувствителен коэффициент НЭ. Наиболее естественной представляется попытка учесть влияние энергетической зависимости времени релаксации, асимметрии дисперсионной зависимости $\varepsilon(k)$ и соответственно $m^*(k)$, а также асимметрии функции плотности состояний. Рассмотрим

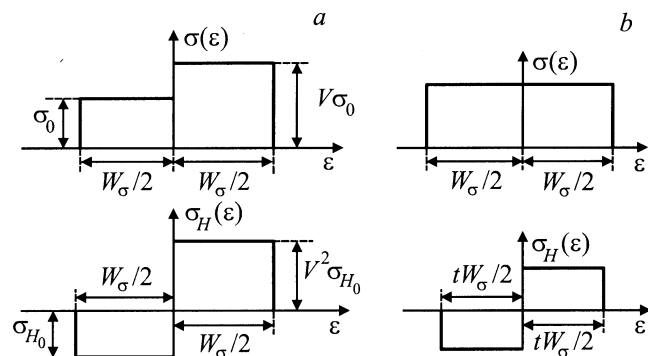


Рис. 3. Способ моделирования энергетической зависимости времени релаксации в узкой зоне. Значение τ изменяется от нижнего края зоны к верхнему (*a*) или от краев зоны к ее середине (*b*).

возможные варианты модельной аппроксимации функций $D(\varepsilon)$, $\sigma(\varepsilon)$ и $\sigma_H(\varepsilon)$, к которым приводит учет этих обстоятельств, при условии сохранения общих положений модели узкой зоны.

Прежде всего проанализируем влияние характера зависимости $\tau(\varepsilon)$ на вид расчетных кривых $Q(T)$. Время релаксации входит множителем в выражение для дифференциальной проводимости $\sigma(\varepsilon)$ и в квадратичном виде в функцию холловской дифференциальной проводимости $\sigma_H(\varepsilon)$. Это означает, что на вид $\sigma_H(\varepsilon)$ энергетическая зависимость времени релаксации окажет более сильное влияние. При условии сохранения прямоугольной аппроксимации случай, когда время релаксации изменяется от нижнего края зоны к верхнему, может быть промоделирован путем введения разной высоты прямоугольников $\sigma(\varepsilon)$ и $\sigma_H(\varepsilon)$ в верхней и нижней половинах зоны. При этом различие в высотах прямоугольников, аппроксимирующих $\sigma_H(\varepsilon)$, должно быть больше, чем при аппроксимации $\sigma(\varepsilon)$, как показано на рис. 3, *a*. В случае если τ изменяется от краев зоны к ее середине, это должно приводить к изменению размера прямоугольников, аппроксимирующих $\sigma_H(\varepsilon)$, относительно размера прямоугольника $\sigma(\varepsilon)$ (по аналогии с различием между прямоугольниками, аппроксимирующими $D(\varepsilon)$ и $\sigma(\varepsilon)$ в рамках модели узкой зоны; см. результаты анализа в [8]), как это показано на рис. 3, *b*.

Результаты расчетов $Q(T)$ для первого случая в зависимости от величины параметра V , описывающего характер и степень изменения τ с ростом энергии носителей заряда в зоне, представлены на рис. 4. На рис. 5 показаны расчеты в рамках аппроксимации, представленной на рис. 3, *b*. Видно, что оба варианта учета характера $\tau(\varepsilon)$ не приводят в большинстве случаев к изменению вида зависимости $Q(T)$, которая в результате по-прежнему отличается от экспериментально наблюдаемой. Некоторое исключение составляет кривая 7 на рис. 5, однако проведенный анализ коэффициента Холла показал, что в рамках модельной аппроксимации, представленной на рис. 3, *b*, расчетные зависимости $R_H(T)$

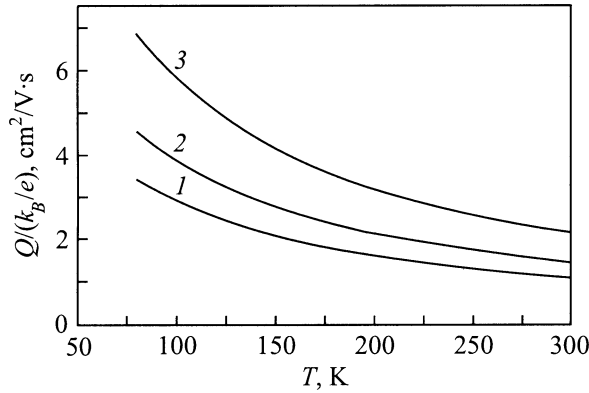


Рис. 4. Расчетные зависимости $Q(T)$ в рамках аппроксимации, представленной на рис. 3, а. Значения параметров модели: $F = 0.51$, $W_D = 100$ meV, $C = 0.3$, $u = 0.5$ cm²/V · s, $V = 0.5$ (1), 1.0 (2), 2.0 (3).

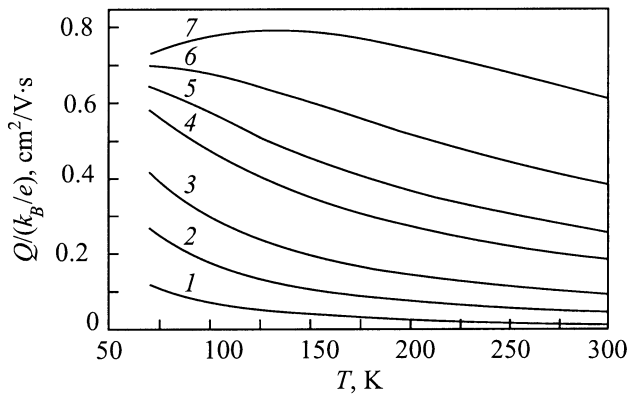


Рис. 5. Расчетные зависимости $Q(T)$ в рамках аппроксимации, представленной на рис. 3, б. Значения параметров модели: $F = 0.51$, $W_D = 100$ meV, $C = 0.3$, $u = 0.5$ cm²/V · s, $t = 0.3$ (1), 0.5 (2), 0.7 (3), 1 (4), 1.2 (5), 1.5 (6), 2 (7).

качественно не соответствуют результатам эксперимента для YBa₂Cu₃O_y.

Таким образом, в случае узкой проводящей зоны характер энергетической зависимости времени релаксации не оказывает в отличие от классического случая существенного влияния на поведение коэффициента НЭ. Как показали наши расчеты, учет слабой асимметрии функции плотности состояний хотя и вносит некоторое изменение в поведение коэффициента Q , однако также не меняет качественный вид зависимости $Q(T)$.

Наиболее интересным оказывается влияние на коэффициент НЭ характера дисперсионной зависимости $\varepsilon(k)$. В выражение для $\sigma(\varepsilon)$ входит квадрат скорости V^2 , где $V = \partial\varepsilon/\partial k$, а в выражение для $\sigma_H(\varepsilon)$ — дополнительно и эффективная масса электронов $m^* = \hbar^2/(\partial^2\varepsilon/\partial k^2)$. В стандартной зоне при симметричной зависимости $\varepsilon(k)$ значение V^2 максимально в центре зоны (по шкале энергии) и уменьшается к ее краям, а m^* меняет знак в центре зоны. При асимметрии $\varepsilon(k)$ зависимость $V^2(\varepsilon)$

сместится относительно середины зоны, и при использовании прямоугольной аппроксимации эта асимметрия приведет к смещению прямоугольника $\sigma(\varepsilon)$, а также верхней и нижней границ прямоугольников $\sigma_H(\varepsilon)$ относительно центра прямоугольника $D(\varepsilon)$. При этом, поскольку положение точки смены знака функции $\sigma_H(\varepsilon)$ на шкале энергии определяется энергией, при которой происходит смена знака эффективной массы, при учете асимметрии функции $\varepsilon(k)$ сдвинется не только границы прямоугольников $\sigma_H(\varepsilon)$, но и, что особенно важно, положение точки смены знака. В результате модельная аппроксимация перечисленных функций будет выглядеть так, как показано на рис. 6. Выражение для коэффициента НЭ (2) в рамках данной аппроксимации может быть записано в виде

$$Q = -\frac{1}{eT} \bar{u} \left(\frac{I_{H1}}{I_0} - \frac{I_{H0}I_1}{I_0^2} \right), \tag{7}$$

где

$$I_0 = \int_{-W_D/2+bW_D}^{W_D/2+bW_D} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon,$$

$$I_{H0} = \int_{-W_D/2+kW_D}^{W_D/2+kW_D} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \text{sign}(\varepsilon - kW_D) d\varepsilon,$$

$$I_1 = \int_{-W_D/2+bW_D}^{W_D/2+bW_D} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon d\varepsilon,$$

$$I_{H1} = \int_{-W_D/2+kW_D}^{W_D/2+kW_D} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \text{sign}(\varepsilon - kW_D) \varepsilon d\varepsilon. \tag{8}$$

Очевидно, что подобное изменение вида функции $\sigma_H(\varepsilon)$ должно оказать сильное влияние на коэффициенты Холла и НЭ, в то время как слабая асимметрия функции $\sigma(\varepsilon)$, как показано в [8], не оказывает влияния на вид зависимости $R_H(T)$ и слабо влияет на $S(T)$ при заполнении зоны выше $F = 0.505$. Это позволяет в первом приближении не учитывать в расчетах асимметрию функции $\sigma(\varepsilon)$ и в большинстве случаев использовать аппроксимацию, представленную на рис. 6, и выражения (7), (8) при $b = 0$, но $k \neq 0$. При этом величина модельного параметра k характеризует степень асимметрии дисперсионной кривой. В общем случае, когда анализ зависимостей $S(T)$ свидетельствует о наличии асимметрии функции плотности состояний (что, как было показано нами ранее, наблюдается в ВТСП висмутовой [32] и лантановой [39] систем, а также при легировании YBa₂Cu₃O_y кальцием [33,35]), необходимо учитывать и этот фактор и использовать при расчете коэффициента НЭ значение $b \neq 0$, определенное из анализа зависимостей $S(T)$.

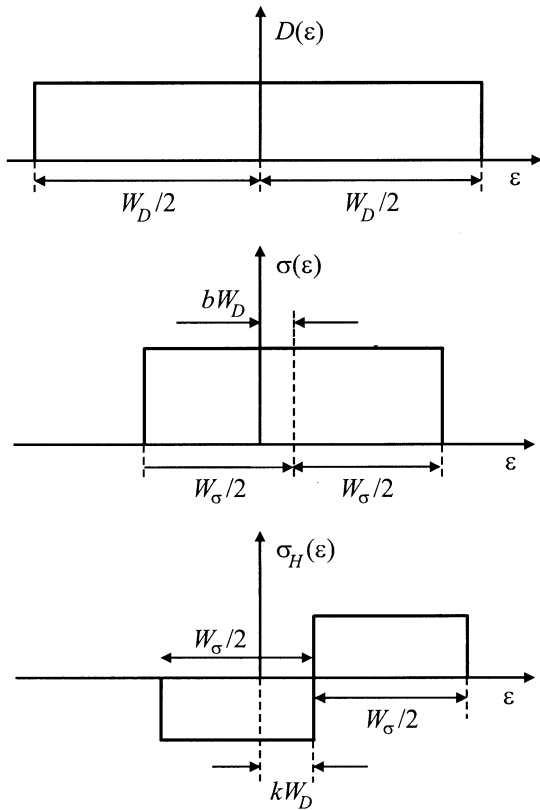


Рис. 6. Аппроксимация функций плотности состояний, дифференциальной проводимости и холловской дифференциальной проводимости, используемая при расчете зависимости $Q(T)$ в рамках модели узкой зоны.

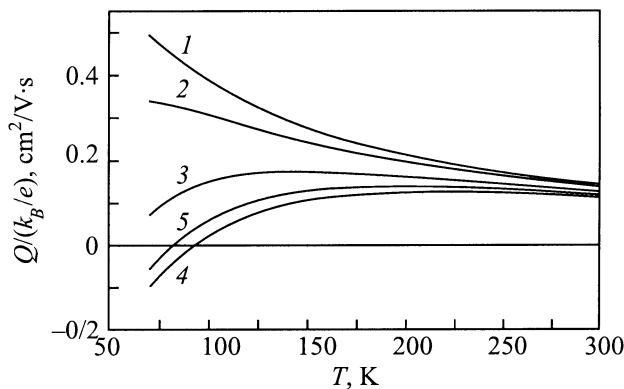


Рис. 7. Расчетные зависимости $Q(T)$ в рамках аппроксимации, представленной на рис. 6, при $b = 0$. Значения параметров модели: $F = 0.51$, $W_D = 100$ meV, $C = 0.3$, $u = 0.5$ cm²/V · s. $k = 0$ (1), -0.05 (2), -0.1 (3), -0.14 (4) и 0.14 (5).

Введение описанной поправки серьезно изменяет качественную картину поведения коэффициента НЭ. Зависимости $Q(T)$, рассчитанные в рамках аппроксимации, представленной на рис. 6, по формулам (5), (7), (8) при $b = 0$ для разной степени асимметрии $\varepsilon(k)$ (значение параметра k), приведены на рис. 7. В области высоких

температур коэффициент НЭ по-прежнему положителен, однако по мере уменьшения температуры за участком роста его значений, наблюдаемым и при других способах модельной аппроксимации, следует широкий максимум на зависимости $Q(T)$, после чего значение Q достаточно быстро падает. При определенных значениях модельных параметров происходит смена знака коэффициента НЭ в области низких температур. Таким образом, зависимость $Q(T)$ существенно видоизменилась, и на ней стали наблюдаться все отмеченные выше особенности, характерные для экспериментально измеряемых кривых $Q(T)$ в легированных ВТСП иттриевой системы.

Как видно из рис. 7, в рамках данной аппроксимации расчетная зависимость $Q(T)$, качественно соответствующая экспериментальной, наблюдается как при положительных, так и при отрицательных значениях модельного параметра k (см. кривые 4 и 5). Чтобы добиться однозначности в определении параметров зонного спектра, мы провели расчет температурной зависимости коэффициента Холла при использовании той же аппроксимации и различных по знаку значений k . Результаты этих расчетов показывают, что зависимость $R_H(T)$, рассчитанная при $k < 0$, соответствует экспериментальным данным для коэффициента Холла [2], т. е. $R_H > 0$ и $R_H(T) \propto T^{-1}$, в то время как в случае $k > 0$ значения R_H отрицательны во всем интервале температур. Таким образом, в случае ВТСП-материалов использование в модельных расчетах именно отрицательных значений k позволяет добиться качественного согласия результатов эксперимента и расчета не только для $Q(T)$, но и для температурных зависимостей других кинетических коэффициентов, включая коэффициент Холла. Следовательно, при подборе значений модельных параметров для описания зависимости $Q(T)$ необходимо полагать $k < 0$.

Следует отметить крайне сильную чувствительность коэффициента НЭ к деталям строения зонного спектра. Учет достаточно слабой асимметрии $\varepsilon(k)$ приводит к качественному изменению вида расчетных зависимостей $Q(T)$. При этом такая асимметрия не сказывается на характере зависимостей $\rho(T)$ и $S(T)$, поскольку модельная аппроксимация функций $D(\varepsilon)$ и $\sigma(\varepsilon)$, входящих в выражения для этих коэффициентов в рамках модели узкой зоны, остается неизменной и, как уже отмечалось, не приводит к изменению вида зависимостей $R_H(T)$, которые по-прежнему соответствуют экспериментальным данным, как и в рамках обычной симметричной модели узкой зоны. Таким образом, предложенная модельная аппроксимация функций плотности состояний, дифференциальной и холловской проводимости может быть использована не только для описания зависимостей $Q(T)$, но для комплексного анализа всей совокупности экспериментальных данных по температурным зависимостям удельного сопротивления, коэффициентов термоэдс, Холла и Нернста–Эттингсгаузена, полученных для образцов ВТСП системы $YBa_2Cu_3O_y$ различного состава.

Для количественного анализа температурных зависимостей коэффициента НЭ в случае узкой проводящей зоны необходимо воспользоваться формулами (5)–(8), выразив Q через значения параметров модели узкой зоны F, W, C, b, k, u . Дополнительно отметим следующее обстоятельство. Как уже указывалось выше, при совместном анализе экспериментальных данных о коэффициентах термоэдс и НЭ значения основных модельных параметров F, W, C (а при необходимости и b) могут быть однозначно определены на основе анализа зависимостей $S(T)$ и должны затем использоваться при анализе $Q(T)$ по формулам (7), (8). В результате поведение коэффициента НЭ определяется только двумя дополнительными параметрами — k и u . При этом величина подвижности, являясь множителем в (7), оказывается существенной только при расчете абсолютных значений коэффициента НЭ, не влияя на вид его температурной зависимости. Таким образом, при заранее известных значениях параметров F, W_D, W_σ и b характер зависимости $Q(T)$ полностью определяется величиной параметра k , а абсолютные значения Q — величиной параметра u , что позволяет однозначно находить значения этих параметров из анализа экспериментальных данных для $Q(T)$. Результаты анализа экспериментальных данных для легированных ВТСП системы $YBa_2Cu_3O_y$ будут приведены в другой работе.

4. Определение параметров системы носителей заряда на основе анализа зависимостей $Q(T)$ в рамках модели узкой зоны

Проведенный анализ влияния различных особенностей строения зонного спектра на поведение коэффициента НЭ показал, что в случае узкой проводящей зоны наиболее существенным оказывается характер дисперсионной кривой $\varepsilon(k)$. Другие детали строения зонного спектра и свойств системы носителей заряда (асимметрия функции плотности состояний, характер энергетической зависимости времени релаксации) оказываются менее существенными и в первом приближении могут не учитываться. В частности, даже при $\tau = \text{const}(\varepsilon)$ коэффициент Q не равен нулю. Это означает, что в применении к материалам с узкой проводящей зоной анализ коэффициента НЭ не может быть использован для получения информации о механизме рассеяния носителей заряда и характере зависимости $\tau(\varepsilon)$ в отличие от классического случая полупроводников и металлов, где измерения зависимостей $Q(T)$ и их анализ в рамках стандартной кинетической теории проводятся в основном именно с этой целью. В то же время анализ зависимостей $Q(T)$ для образцов с направленным изменением состава в рамках модели узкой зоны позволяет проследить за изменением степени асимметрии дисперсионной кривой.

При использовании анализа зависимостей $Q(T)$ для определения значения подвижности носителей заряда не-

обходимо учитывать следующее обстоятельство. В классическом случае широкой зоны диапазон энергий порядка нескольких $k_B T$, актуальный для рассмотрения явлений переноса, мал по сравнению с общей шириной зоны, что позволяет пренебречь зависимостью $m^*(\varepsilon)$ и, используя усредненное по зоне время релаксации $\langle \tau \rangle$, определить значение подвижности носителей заряда: $u = \langle \tau \rangle e / m^*$. В случае узкой зоны время релаксации можно, как и прежде, усреднить по энергии, однако зависимостью $m^*(\varepsilon)$ просто пренебрегать уже нельзя. В частности, в середине зоны эффективная масса вообще меняет знак, а рассмотрение именно этой области энергий имеет определяющее значение в случае ВТСП-материалов, степень заполнения зоны в которых близка к половинной. Если считать, что значения эффективной массы в верхней и нижней половинах зоны равны с точностью до знака, т.е. аппроксимировать зависимость $m^*(\varepsilon)$ прямоугольниками, то величина u может быть определена как среднее значение подвижности электронов в узкой зоне. Именно это значение подвижности входит в формулу (7) и может быть определено из анализа экспериментальной зависимости $Q(T)$ в рамках модели узкой зоны. Следовательно, как и в классическом случае, изучение эффекта НЭ в проводниках с узкой зоной может быть использовано для определения подвижности носителей заряда. Отметим при этом следующие обстоятельства. Во-первых, при исследовании поликристаллических образцов межкристаллитные прослойки существенно влияют на измеряемую величину удельного сопротивления, что приводит к погрешности в определении абсолютных значений σ . Во-вторых, для случая узкой зоны холловская концентрация не соответствует истинной концентрации носителей [8]. Оба этих факта оказываются весьма существенными при анализе экспериментальных данных для ВТСП-материалов и приводят к тому, что определение значения подвижности по результатам резистивных и холловских измерений как $u = \sigma R_H$ является некорректным. Поэтому экспериментальное исследование и анализ коэффициента НЭ в этом случае являются весьма эффективным и информативным методом определения подвижности носителей.

5. Анализ применимости кинетического уравнения

Поскольку при анализе зависимости $Q(T)$ мы использовали кинетическое уравнение Больцмана, решая его в приближении времени релаксации, необходимо выяснить, правомерен ли такой подход для случая материалов с узкой зоной вообще и применительно к ВТСП-материалам в частности.

Первое условие применимости кинетического уравнения основывается на предположении, что имеет смысл понятие времени свободного пробега, т.е. что столкновения происходят сравнительно редко. Поскольку пользоваться функцией распределения, которая сильно изме-

няется в интервале энергий порядка $k_B T$, можно только в том случае, если неопределенность в энергии $\Delta\varepsilon < k_B T$, а первое приближение теории возмущений, используемое при расчете интеграла столкновений, неприменимо, если электрон успеет испытать более одного соударения, время $\Delta t \approx \hbar/\Delta\varepsilon$ должно быть меньше τ . В результате приходим к необходимости выполнения неравенства

$$k_B T > \hbar/\tau, \quad (9)$$

которое можно рассматривать как условие малости продолжительности столкновения по сравнению со временем между двумя последовательными столкновениями. Воспользовавшись формулой $u = e\langle\tau\rangle/m^*$, где $\langle\tau\rangle$ — соответствующим образом усредненное время релаксации, критерий (9) можно представить в виде

$$k_B T > e\hbar/m^*u. \quad (10)$$

Условие (9) выполняется для широкого класса хорошо проводящих полупроводников. Если принять величину эффективной массы примерно равной массе свободного электрона, то в соответствии с (10) значение подвижности носителей заряда при $T = 300$ К должно быть более $40 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$. Однако в случае $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ оценка подвижности по формуле $u = R_H\sigma$ дает очень низкие значения $u = 1-10 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$. В результате длина свободного пробега l носителей может оказаться меньше межатомных расстояний, что лишает смысла предположение о свободном движении электрона на протяжении длины l .

Выход из создавшейся ситуации представляется в том, что для случая узкой зоны характерны большие эффективные массы носителей. Малые подвижности могут быть обусловлены не только малыми, противоречащими соотношению неопределенности, длинами свободного пробега, но и большими эффективными массами. При этом время релаксации может оставаться достаточно большим ($\tau > 10^{-14}-10^{-15}$ s), чтобы выполнялся критерий (9).

При достаточно узкой зоне может также оказаться, что неопределенность в энергии электрона в результате рассеяния становится больше ширины зоны, по которой осуществляется проводимость $W < \hbar/\tau$, что лишает смысла зонную картину. Оценки ширины узкой зоны для ВТСП-соединений дают значения $W \geq 100 \text{ meV}$ [8,33–36,39]. В этом случае при реализации критерия (9) условие $W \gg \hbar/\tau$ заведомо выполняется.

Другая возможная проблема заключается в том, что взаимодействие носителей тока с колебаниями решетки в случае очень узких проводящих полос, ширина которых $W < k_B\Theta_D$ (где Θ_D — температура Дебая), не может быть рассмотрено методом теории возмущений. В подобном случае электрон-фононное взаимодействие нельзя рассматривать как слабое возмущение, и электроны могут перейти в поляронные состояния. Для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ $\Theta_D \approx 400$ К [40], и условие $W > k_B\Theta_D$

заведомо выполняется. Кроме того, сверхпроводники на основе $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ являются сильно дефектными структурами, что позволяет предположить, что основным видом рассеяния в данном случае будет рассеяние на дефектах решетки.

Определенные ограничения на применимость кинетического уравнения накладывает рассмотрение явлений переноса в магнитном поле. Уравнение Больцмана является по существу классическим, о чем свидетельствует одновременное задание координаты и импульса в функции распределения. Условие применимости классической механики сводится, как известно, к следующему требованию для длины волны частицы: $\lambda < L$, где L — некоторая характерная длина, определяющая сферу действия сил, т. е. область пространства, где потенциальная энергия заметно изменяется. В магнитном поле такой характерной длиной является радиус орбиты электронов $r = V/\omega$. Поскольку $\lambda \approx \hbar/m^*V$, а $m^*V^2 \approx k_B T$, получаем условие $\hbar\omega < k_B T$, где частота вращения носителя тока в плоскости, перпендикулярной вектору магнитного поля H , равна $\omega = eH/m^*$. В рассматриваемом случае узкой зоны, когда масса носителей должна быть большой, условие $\hbar\omega < k_B T$ будет выполняться в широком диапазоне H , и даже при высоких значениях H квантования электронных орбит происходить не будет.

Таким образом, зонная теория и уравнение Больцмана, хотя и с известными оговорками, могут быть использованы при обсуждении экспериментальных данных для кинетических коэффициентов, включая коэффициент НЭ, в ВТСП-материалах.

В настоящей работе проведен детальный анализ эффекта НЭ в проводниках с узкой проводящей зоной, а также рассмотрены особенности применения результатов этого анализа к описанию температурных зависимостей коэффициента НЭ в высокотемпературных сверхпроводниках системы $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ в нормальной фазе. Получены следующие основные результаты и выводы.

1) Качественно проанализированы причины возникновения эффекта НЭ, а также особенности зависимости $Q(T)$, к появлению которых приводит условие узости проводящей зоны. Показано, что в этом случае значение коэффициента НЭ стремится к нулю как в низкотемпературном, так и в высокотемпературном пределах. Обоснована применимость используемого подхода для случая ВТСП-материалов.

2) На основании анализа коэффициента НЭ в рамках модели узкой зоны выявлен ряд особенностей в его поведении по сравнению с классическим случаем широкой зоны. Показано, что знак и вид температурной зависимости коэффициента НЭ определяются прежде всего не характером энергетической зависимости времени релаксации, а степенью отклонения дисперсионной зависимости $\varepsilon(k)$ от квадратичного закона. В симметричной узкой зоне независимо от характера энергетической зависимости времени релаксации и степени заполнения зоны электронами коэффициент НЭ принимает только положи-

тельные значения, при этом в случае $\tau = \text{const}(\varepsilon)$ коэффициент НЭ не равен нулю.

3) Выполнены расчеты зависимости $Q(T)$ в рамках модели узкой зоны. Анализ влияния различных особенностей строения зонного спектра показывает, что только учет асимметрии дисперсионной зависимости $\varepsilon(k)$ позволяет получить расчетные температурные зависимости $Q(T)$, качественно подобные наблюдаемым экспериментально в ВТСП системы $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$. Другие детали строения зонного спектра и свойств системы носителей заряда (асимметрия функции плотности состояний, характер зависимости $\tau(\varepsilon)$) оказываются менее существенными и могут в первом приближении не учитываться.

5) Показано, что модель узкой зоны может быть использована для совместного анализа температурных зависимостей четырех кинетических коэффициентов в ВТСП-материалах в нормальной фазе. При этом включение в анализ экспериментальных данных для коэффициента НЭ позволяет помимо основных параметров зонного спектра оценить степень асимметрии дисперсионной кривой и определить среднее значение подвижности носителей заряда в узкой зоне.

Список литературы

- [1] Y. Iye. In: Physical Properties of High Temperature Superconductors. III / Ed. D.M. Ginsberg. World Scientific, Singapore (1992).
- [2] N.P. Ong. In: Physical Properties of High Temperature Superconductors. II / Ed. D.M. Ginsberg. World Scientific, Singapore (1990).
- [3] A.B. Kaiser, C. Ucher. In: Studies of High Temperature Superconductors / Ed. A.V. Narlikar. Nova Sci. Publ., N.Y. (1991). V. 7.
- [4] S. Lambrecht, M. Ausloos. Phys. Rev. **B53**, 21, 14 047 (1996).
- [5] J.A. Clayhold. Phys. Rev. **B54**, 9, 6103 (1996).
- [6] P. Fournier, X. Jiang, W. Jiang, S.N. Mao, T. Venkatesan, C.J. Lobb, R.L. Greene. Phys. Rev. **B56**, 21, 14 149 (1997).
- [7] С.А. Казьмин, В.И. Кайданов, Г. Лейсинг. ФТТ **30**, 10, 2955 (1988).
- [8] V.E. Gasumyants, V.I. Kaidanov, E.V. Vladimirskaia. Physica **C248**, 2–3, 255 (1995).
- [9] S. Bar-Ad, B. Fisher, J. Ashkenazi, J. Genossar. Physica **C156**, 5, 741 (1988).
- [10] V.V. Moshchalkov. Solid State Commun. **73**, 11, 777 (1990).
- [11] B. Fisher, J. Genossar, L. Patlagan, G.M. Reisner. Phys. Rev. **B48**, 21, 16 056 (1993).
- [12] K.R. Krylov, A.I. Ponomarev, I.M. Tsidilkovski, V.I. Tsidilkovski, G.V. Basuev, V.L. Kozhevnikov, S.M. Cheshnitski. Phys. Lett. **A131**, 3, 203 (1988).
- [13] A.S. Alexandrov, A.M. Bratkovsky, N.F. Mott. Phys. Rev. Lett. **72**, 11, 1734 (1994).
- [14] M.A. van Veenendaal, G.A. Sawatzky, W.A. Groen. Phys. Rev. **B49**, 2, 1407 (1994).
- [15] C. Quitmann, D. Andrich, C. Jarchow, M. Fleuster, B. Beschten, G. Guntherodt, V.V. Moshchalkov, G. Mante, R. Manzke. Phys. Rev. **B46**, 18, 11 813 (1992).
- [16] M. Sato, R. Horida, K. Nagasaka. Phys. Rev. Lett. **70**, 8, 1175 (1993).
- [17] M. Boekholt, G. Guntherodt. Physica **C181**, 1–3, 179 (1991).
- [18] D.N. Aristov, A.G. Yashenkin. Physica **C248**, 1–2, 22 (1995).
- [19] G.V.M. Williams, J.T. Tallon, R. Michalak, R. Dupree. Phys. Rev. **B57**, 14, 8696 (1998).
- [20] H. Verweij, L.F. Feiner. Phys. Rev. **B41**, 7, 4302 (1990).
- [21] C.C. Tsuei, C.C. Chi, D.M. Newns, P.C. Pattnaik, M. Daumling. Phys. Rev. Lett. **69**, 14, 2134 (1992).
- [22] H. Jichu, T. Matsuura, Y. Kuroda. J. Phys. Soc. Jap. **59**, 8, 2820 (1990).
- [23] M. Tachiki, H. Matsumoto. J. Magn. Magn. Mater. **90–91**, 597 (1990).
- [24] G. Dopf, J. Wagner, P. Dieterich, A. Muramatsu, W. Hanke. Phys. Rev. Lett. **68**, 13, 2082 (1992).
- [25] S. Ishihara, H. Matsumoto, S. Odashima, M. Tachiki, F. Mancini. Phys. Rev. **B49**, 2, 1350 (1994).
- [26] T. Hotta. J. Phys. Soc. Jap. **64**, 8, 2923 (1995).
- [27] N. Bulut, D.J. Scalapino, S.R. White. Phys. Rev. **B50**, 10, 7215 (1994).
- [28] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. Rozenberg. Rev. Mod. Phys. **68**, 1, 13 (1996).
- [29] М.И. Клиnger, В.Г. Новикова, В.Н. Агаркова. ЖТФ **26**, 10, 2185 (1956).
- [30] V.E. Gasumyants, E.V. Vladimirskaia, I.B. Patrina. Physica **C235–240**, Pt. 2, 1467 (1994).
- [31] Н.В. Агеев, В.Э. Гасумянц, В.И. Кайданов. ФТТ **37**, 7, 2152 (1995).
- [32] V.E. Gasumyants, N.V. Ageev, E.V. Vladimirskaia, V.I. Smirnov, A.V. Kazanskiy, V.I. Kaidanov. Phys. Rev. **B53**, 2, 905 (1996).
- [33] В.Э. Гасумянц, Е.В. Владимирская, М.В. Елизарова, Н.В. Агеев. ФТТ **40**, 12, 2145 (1998).
- [34] В.Э. Гасумянц, Е.В. Владимирская, М.В. Елизарова, И.Б. Патрина. ФТТ **41**, 3, 389 (1999).
- [35] М.В. Елизарова, В.Э. Гасумянц. ФТТ **41**, 8, 1363 (1999).
- [36] V.E. Gasumyants, M.V. Elizarova, R. Suryanarayanan. Phys. Rev. **B61**, 18, 12 404 (2000).
- [37] V.E. Gasumyants, N.V. Ageev, I.E. Goldberg, V.I. Kaydanov. Physica **C282–289**, Pt. 3, 1279 (1997).
- [38] V. Gasumyants, N. Ageev, E. Vladimirskaia, V. Kaydanov. Superlatt. Microstruct. **24**, 6, 443 (1998).
- [39] M.V. Elizarova, V.E. Gasumyants. Phys. Rev. **B62**, 9, 5989 (2000).
- [40] J.P. Emerson, D.A. Wright, R.A. Fisher, N.E. Phillips. Czech. J. Phys. **46**, Suppl. S3, 1209 (1996).