

# Электропроводность слоистых зарядово-упорядоченных кристаллов в квантующем магнитном поле в области инверсии неосциллирующей части магнитосопротивления

© П.В. Горский

Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича,  
58012 Черновцы, Украина

(Получена 24 мая 2005 г. Принята к печати 30 июня 2005 г.)

Определена электропроводность слоистых зарядово-упорядоченных кристаллов в случае, когда электрическое и квантующее магнитное поле перпендикулярны слоям. Зарядовое упорядочение при этом рассматривается как чередование слоев с различной плотностью носителей тока. Электропроводность при рассеянии на акустических фононах вычисляется в приближении сильного квантования, когда межподзонные переходы можно считать подавленными. Показано, что при переходе слоистого кристалла из неупорядоченного состояния в почти полностью упорядоченное осцилляции электропроводности становятся дупериодическими, причем высокая основная частота определяется величиной эффективного притягивающего межэлектронного взаимодействия, отвечающего за зарядовое упорядочение, а низкая модулирующая — шириной узкой минизоны в направлении, перпендикулярном слоям. Показано также, что при переходе из неупорядоченного состояния в почти полностью упорядоченное продольная проводимость слоистого кристалла понижается на 2–3 порядка, а относительный вклад осцилляций резко возрастает, что находится в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными.

PACS: 73.61.At, 72.15.Gd

## 1. Введение Модель зонного спектра и уравнения самосогласования

Зарядовое упорядочение как внутри слоев, так и между слоями экспериментально обнаружено во многих слоистых соединениях. К ним относятся дихалькогениды переходных металлов [1], интеркалированные полупроводники со сверхрешеткой типа  $A^{IV}B^{VI}C^{VII}$  [2], соединения графита, интеркалированные щелочными металлами [3], и ряд других. Традиционно теоретические исследования физических характеристик этих соединений ведутся на основе модели структурного фазового перехода [4], которая предполагает, что волновой вектор волны зарядовой плотности (ВЗП) лежит в плоскости слоев. Однако в этом случае зарядовое упорядочение должно существенно влиять на плотность состояний носителей тока по аналогии с тем, как это происходит в магнитоупорядоченных кристаллах [5]. Однако эксперименты показывают, что такое влияние для многих слоистых соединений, по крайней мере в низкотемпературной области, не имеет места [1,2]. В то же время эти соединения обладают ярко выраженной анизотропией эффективных масс и электропроводности. Электропроводность в плоскости слоев на 4–6 порядков превышает их электропроводность в перпендикулярном направлении, а ее анизотропия при переходе в зарядово-упорядоченное состояние резко возрастает. Поэтому более реалистичной моделью их электронного спектра, на наш взгляд, является такая, в которой движение носителей тока в плоскости слоев описывается методом эффективной массы, а поперек — методом сильной

связи, либо им вовсе пренебрегается. В такой модели в силу малости ширины минизоны более вероятным является межслоевое зарядовое упорядочение. Как показано в работах [6,7], межслоевое зарядовое упорядочение может рассматриваться как простое чередование более или менее заполненных электронами слоев. В этом случае поверхностная плотность электронов на  $i$ -м слое может быть представлена в виде

$$n_i = n_0 a [1 + (-1)^i \delta], \quad (1)$$

где  $n_0$  — средняя объемная концентрация носителей тока,  $a$  — расстояние между соседними слоями, которые в неупорядоченном состоянии трансляционно эквивалентны,  $\delta$  — параметр упорядочения, пробегающий значения от нуля в неупорядоченном состоянии до единицы в полностью упорядоченном. Возможна также ситуация, когда период межслоевого зарядового упорядочения несоизмерим с периодом сверхрешетки, но важно то, что периодичность энергии межслоевого движения электронов при этом сохраняется. Тогда энергетический спектр носителей тока в таком кристалле может быть представлен в виде

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m^*} (k_x^2 + k_y^2) \pm \sqrt{\Delta^2 \cos^2 ak_z + W_0^2 \delta^2}, \quad (2)$$

где  $m^*$  — эффективная масса электронов в плоскости слоя, предполагаемая для простоты изотропной,  $\Delta$  — полуширина „затравочной“ узкой минизоны, определяющей межслоевое движение электронов,  $W_0$  — эффективная константа взаимодействия, приводящего к зарядовому упорядочению. Поскольку таковым является взаимодействие электронов с фононной модой, волновой

вектор которой перпендикулярен слоям и по абсолютной величине равен  $q_0 = \pi/a$ , по аналогии с [4] эта константа равна

$$W_0 = n_0 \left[ \frac{4|A_{q_0}|^2 v}{\hbar v_0} - V_{q_0} \right], \quad (3)$$

где  $A_{q_0}$  — эффективная константа электрон-фононного взаимодействия,  $v$  — объем элементарной ячейки,  $v_0$  — частота акустических фононов с волновым вектором  $\pi/a$ ,  $V_{q_0}$  — фурье-образ потенциала межэлектронного взаимодействия, которое с самого начала предполагается экранированным.

Из формулы (2) следует, что при переходе в зарядово-упорядоченное состояние рассматриваемого типа характер движения электронов в плоскости слоя не изменяется, а узкая „затравочная“ минizona, описывающая межслоевое движение электронов, расщепляется на две подзоны с меньшей шириной

$$\sqrt{\Delta^2 + W_0^2 \delta^2} < \Delta + W_0 \delta,$$

разделенные псевдощелью шириной  $2W_0 \delta$ .

Плотность электронных состояний в этом случае определяется формулами [8]:

$$g(\varepsilon) = \frac{4m^*}{ah^2} \times \begin{cases} \pi & \text{при } \varepsilon \geq \sqrt{\Delta^2 + W_0^2 \delta^2}, \\ \arccos\left(-\sqrt{\varepsilon^2 - W_0^2 \delta^2} / \Delta\right) & \text{при } W_0 \delta \leq \varepsilon \leq \sqrt{\Delta^2 + W_0^2 \delta^2}, \\ \pi/2 & \text{при } -W_0 \delta \leq \varepsilon \leq W_0 \delta, \\ \arccos\left(\sqrt{\varepsilon^2 - W_0^2 \delta^2} / \Delta\right) & \text{при } -\sqrt{\Delta^2 + W_0^2 \delta^2} \leq \varepsilon \leq -W_0 \delta, \\ 0 & \text{при } \varepsilon \leq -\sqrt{\Delta^2 + W_0^2 \delta^2}. \end{cases} \quad (4)$$

Система уравнений самосогласования, определяющих химический потенциал газа носителей тока  $\xi$  и параметр порядка  $\delta$ , имеет вид

$$\begin{cases} 1 = \frac{kT}{2\xi_0 \pi} \int_0^\pi dx \ln[(1 + A_+)(1 + A_-)], \\ \delta = \frac{kTW_0 \delta}{2\xi_0 \pi} \int_0^\pi \frac{dx}{R} \ln[(1 + A_+)(1 + A_-)], \end{cases} \quad (5)$$

где

$$R = \sqrt{W_0^2 \delta^2 + \Delta^2 \cos^2 x}, \\ A_+ = \exp \frac{\xi + R}{kT}, \\ A_- = \exp \frac{\xi - R}{kT},$$

$T$  — абсолютная температура,  $\xi_0 = \hbar^2 n_0 a_0 / 4\pi m^*$ .

Из системы уравнений (5) следует, что необходимым условием существования межслоевого зарядового упорядочения в рамках рассматриваемой в статье модели является положительность величины  $W_0$ , т.е. притягивающий характер эффективного взаимодействия. Зонное движение электронов, однако, препятствует возникновению описываемого зарядового упорядочения, поскольку, с одной стороны, неравномерное распределение электронов по слоям увеличивает ту часть кинетической энергии электронов, которая связана с их движением в плоскости слоев. С другой стороны, трансляционное движение электронов между слоями также стремится сгладить неравномерность их послойного распределения. Из системы уравнений (5) следует также, что волны зарядовой плотности, рассматриваемые в настоящей статье, устойчивы лишь при  $W_0/\xi_0 > 1$ , т.е. когда эффективное притягивающее взаимодействие превышает максимальную для заданной средней плотности электронов кинетическую энергию их движения в плоскости слоев.

Рассмотрим теперь специальный случай  $W_0/\xi_0 = 2$ . В этом случае при  $\xi \equiv 0$  и  $\delta \neq 0$  второе уравнение системы (5) превращается в тождество и параметр порядка  $\delta$  должен определяться из первого уравнения. Тогда, как следует из формулы (4), плотность состояний на уровне химического потенциала, а следовательно, низкотемпературная электронная теплоемкость и диамагнитная восприимчивость Ландау не зависят от параметра порядка, что согласуется с экспериментами [1,3]. Поэтому в дальнейшем нас будет интересовать случай, когда

$$-W_0 \delta < \xi < W_0 \delta,$$

т.е. согласно (4) плотность состояний  $g(\xi) = \text{const}$ .

Цель данной статьи заключается в таком расчете осциллирующей части продольной электропроводности этих кристаллов в квантующем магнитном поле, перпендикулярном слоям, который бы в явном виде учитывал непараболичность зоны проводимости и конечную протяженность поверхности Ферми (ПФ) вдоль направления магнитного поля. В рамках традиционных подходов, развитых Лифшицем и Косевичем для магнитной восприимчивости [9], а также Андреевым и Косевичем для кинетических коэффициентов [10], эти факторы явным образом не учитываются. Более того, традиционная теория [10] разработана для поперечных гальваномагнитных и термогальваномагнитных эффектов, причем для случая, когда в разрешенной минизоне проводимости укладывается много уровней Ландау. Следует отметить, что в квантующем магнитном поле меняется и вид системы уравнений самосогласования (5), но необходимость учета влияния магнитного поля на химический потенциал  $\xi$  и параметр порядка  $\delta$  возникает только тогда, когда величина энергии эффективного взаимодействия сравнима с расстоянием между уровнями Ландау.

## 2. Расчет электропроводности и обсуждение его результатов

Перейдем теперь к расчету электропроводности в квантующем магнитном поле, перпендикулярном слоям. В этом случае энергию электронов проводимости можно записать в виде

$$\varepsilon_{nk_z} = \mu^* H(2n + 1) \pm \sqrt{W_0^2 \delta^2 + \Delta^2 \cos^2 ak_z}, \quad (6)$$

где  $H$  — напряженность магнитного поля,  $n$  — номер уровня (подзоны) Ландау,  $\mu^* = \mu_B \frac{m_0}{m^*}$ ,  $\mu_B$  — магнетон Бора,  $m_0$  — масса свободного электрона.

При вычислении электропроводности будем пользоваться формулой Кубо в приближении времени релаксации [11]. В качестве механизма рассеяния рассмотрим рассеяние на акустических фононах в приближении, в котором время релаксации обратно пропорционально плотности состояний носителей в магнитном поле в расчете на одну подзону Ландау [12]. Такое приближение выбирается потому, что в отличие от осцилляций магнитной восприимчивости осцилляции электропроводности наиболее ярко выражены в условиях сильного квантования, когда традиционное квазиклассическое приближение [10], в котором время релаксации не зависит от магнитного поля, некорректно. Следует отметить, что осцилляции Шубникова–де-Гааза в отличие от осцилляций де-Гааза–ван-Альфена обнаружены главным образом в полуметаллах [13], где квантование действительно является сильным. Чтобы правильно учесть зависимость времени релаксации от магнитного поля и температуры и в то же время обеспечить правильную размерность конечных результатов, представим его в форме

$$\tau(\varepsilon) = \frac{\tau a^2 e H}{ch} \frac{\Delta}{kT} \frac{g_0}{g_H(\varepsilon)}, \quad (7)$$

где  $g_H(\varepsilon)$  — плотность состояний в магнитном поле в расчете на одну подзону Ландау,  $g_0 = 4m^* \pi / ah^2$ ,  $\tau$  — некоторая функция постоянных кристалла, магнитного поля и температуры, имеющая размерность времени, характеризующая интенсивность рассеяния и зависящая от конкретного закона дисперсии фононов и величины функции электрон-фононной связи. Прежде чем перейти непосредственно к формулам для электропроводности и их анализу, дадим обоснование законности формулы (7) в рассматриваемом случае и приведем некоторые конкретные выражения для  $\tau$ . В монографии [12] формула типа (7) приведена в допущении, что рассматриваются только внутризонные переходы „0 → 0“ (т.е. в нулевой подзоне Ландау), а закон дисперсии носителей в направлении, перпендикулярном слоям, является квадратичным. Однако сама по себе эта квадратичность при выводе формулы типа (7) нигде, кроме кинематических соотношений, не используется. Формула же для плотности состояний в магнитном поле  $g_H(\varepsilon)$  допускает естественное обобщение на случай произвольного закона

дисперсии носителей  $W(k_z)$  в направлении, перпендикулярном слоям:

$$g_H(\varepsilon) = \frac{|eH|}{\pi ch |W'(k_z)|}, \quad (8)$$

где  $W'(k_z)$  означает производную по  $k_z$ , а  $k_z$  определяется условием  $W(k_z) = \varepsilon$ , причем соотношение (8) учитывает спиновое вырождение.

Пренебрежение переходами между различными подзонами Ландау в условиях яркой выраженности эффекта Шубникова–де-Гааза (ШДГ) вполне законно, поскольку при низких температурах существенны акустические фононы с энергиями, не превышающими  $kT$ .

Для того чтобы эффект ШДГ был ярко выражен, необходимо выполнение условия  $\mu^* H \geq 10kT$ . Кроме того, для подавления межподзонных переходов в рассматриваемом в статье случае зарядово-упорядоченного кристалла необходимо, чтобы ширина каждой из разрешенных минизон, образовавшихся в результате зарядового упорядочения, была мала или, во всяком случае, не слишком велика по сравнению с расстоянием между уровнями Ландау. В противном случае даже при низких температурах продольное движение носителей заряда будет способствовать межподзонным переходам и правильным будет традиционное квазиклассическое приближение. Однако даже в этом приближении при учете анизотропии рассеяния время релаксации, используемое для вычисления продольной электропроводности при рассеянии на акустических фононах, останется пропорциональным продольной скорости носителей, т.е. величине  $W'(k_z)$ .

В условиях вымерзания межподзонных переходов выражение для  $\tau$  необходимо взять в виде

$$\tau = \tau_s = \frac{2\rho h}{\pi g_0 \Theta \Delta W} \left( \frac{hs^2}{2\pi kTa} \right)^2, \quad (9)$$

если рассеяние является спонтанным, и в виде

$$\tau = \tau_i = \frac{h^2 c \rho s^2}{2\pi^2 g_0 \Theta^2 \Delta W a^2 |eH|}, \quad (10)$$

если оно является индуцированным.

В формулах (9), (10)  $\rho$  — плотность кристалла,  $s$  — скорость звука в нем,  $\Theta$  — постоянная деформационного потенциала,  $W$  — число (вообще говоря, слабая функция  $q_z$ ), учитывающее отличие волновых функций электронов в слоистом кристалле от плоских волн [13]. Матричный элемент электрон-фононного взаимодействия, на основе которого получены формулы (9) и (10), взят из монографий [12,13].

То, какой из механизмов будет преобладающим, зависит от значения параметра

$$\kappa_0 = 2 \left( \frac{\pi kT}{hs} \right)^2 a_H^2,$$

где  $a_H^2 = hc / 2\pi eH$ . Если  $\kappa_0 \gg 1$ , рассеяние будет индуцированным, а если  $\kappa_0 \ll 1$  — спонтанным.

Представление (7) с коэффициентами (9) и (10) справедливо, если рассеяние квазиупруго. В нашем случае условия квазиупругости выглядят так:

$$\sqrt{\Delta^2 + W_0^2 \delta^2} - W_0 \delta > \hbar s / 2\pi a_H, \quad (11)$$

$$kT < \sqrt{\Delta^2 + W_0^2 \delta^2} - W_0 \delta \leq \mu^* H. \quad (12)$$

Если спектр электронов проводимости при произвольном законе дисперсии электронов в направлении С-оси представить в форме

$$\varepsilon_{nk_z} = \mu^* H(2n + 1) + W(ak_z), \quad (13)$$

то при оговоренном выше времени релаксации компонента  $\sigma_{zz}$  тензора электропроводности, которую мы и будем анализировать в дальнейшем, может быть представлена в виде

$$\sigma_{zz} = \sigma_0 + \sigma_{osc} + \sigma_{mr}, \quad (14)$$

где

$$\sigma_0 = \frac{32\pi e^2 (m^*)^2 a^3 \tau \bar{W}}{h^6 kT} \int_{\substack{W(x) \leq \xi \\ x \geq 0}} dx |W'(x)|^3, \quad (15)$$

$$\sigma_{osc} = \frac{64\pi e^2 (m^*)^2 a^3 \tau \bar{W}}{h^6 kT} \times \int_{\substack{W(x) \leq \xi \\ x \geq 0}} dx |W'(x)|^3 \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^\sigma \cos\left(\pi l \frac{\xi - W(x)}{\mu^* H}\right), \quad (16)$$

$$\sigma_{mr} = \frac{32\pi e^2 (m^*)^2 a^3 \tau \bar{W}}{h^6 kT} \times \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l h_l^\sigma \left[ \int_{\substack{W(x) \leq \xi \\ x \geq 0}} |W'(x)|^3 \exp\left(l \frac{W(x) - \xi}{kT}\right) dx - \int_{\substack{W(x) \geq \xi \\ x \geq 0}} |W'(x)|^3 \exp\left(l \frac{\xi - W(x)}{kT}\right) dx \right], \quad (17)$$

$$f_l^\sigma = \frac{\pi^2 l kT / \mu^* H}{\text{sh}(\pi^2 l kT / \mu^* H)}, \quad (18)$$

$$h_l^\sigma = \frac{\mu^* H l / kT}{\text{sh}(\mu^* H l / kT)}. \quad (19)$$

Эти формулы получаются, если в формуле Кубо [11] в приближении времени релаксации выполнить суммирование по номерам уровней Ландау с помощью формулы Пуассона. В данном случае такое суммирование может быть выполнено до конца в силу того, что время релаксации не зависит от номеров уровней Ландау, а энергия носителей заряда зависит от них линейно.

Формулы (15)–(17) выдерживают формальный предельный переход к случаю нулевого магнитного поля и к случаю невырожденного электронного газа, когда суммирование по уровням Ландау можно выполнить явно.

Для того чтобы вычислить электропроводность по формулам (14)–(19), необходимо подставить в них вместо  $W(x)$  выражения  $\pm \sqrt{W_0^2 \delta^2 + \Delta^2 \cos^2 x}$ . Затем выполнить интегрирование с учетом положения уровня Ферми  $\xi$  и разделить результат пополам, учитывая то обстоятельство, что каждая из минизон в данном случае вносит вклад с „весом“ 1/2. Интегрирование в данном случае может быть выполнено аналитически.

Выполняя его в области  $-W_0 \delta \leq \xi \leq W_0 \delta$ , получим

$$\sigma_0 = \frac{64\pi e^2 (m^*)^2 a^3 \tau \Delta}{3h^6 kT} (\Delta_\delta - W_0 \delta)^3, \quad (20)$$

$$\sigma_{mr} = \frac{64\pi e^2 (m^*)^2 a^3 \tau \Delta}{h^6 kT} \times \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} h_l^\sigma \text{sh} \frac{l\xi}{kT} \left\{ \frac{kT}{l} \left[ \Delta_\delta^2 A_W - W_0^2 \delta^2 A_\Delta \right] + 2 \left( \frac{kT}{l} \right)^2 (\Delta_\delta A_\Delta - W_0 \delta A_W) + 2 \left( \frac{kT}{l} \right)^3 (A_\Delta - A_W) + W_0^2 \delta^2 \Delta_\delta A_\Delta - W_0 \delta \Delta_\delta^2 A_W + \frac{l W_0^2 \delta^2 \Delta_\delta^2}{kT} \left[ \text{Ei} \left( -\frac{l \Delta_\delta}{kT} \right) - \text{Ei} \left( -\frac{l W_0 \delta}{kT} \right) \right] \right\}, \quad (21)$$

где

$$A_W = \exp\left(-\frac{l W_0 \delta}{kT}\right), \quad A_\Delta = \exp\left(-\frac{l \Delta_\delta}{kT}\right);$$

$$\sigma_{osc} = \frac{128\pi e^2 (m^*)^2 a^3 \tau \Delta}{h^6 kT} \times \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^\sigma \left\{ (W_0 \delta \Delta^2 - W_0^3 \delta^3) \cos B_W + \frac{W_0^4 \delta^4 - W_0^2 \delta^2 \Delta^2}{\Delta_\delta} \cos B_\Delta + \frac{\mu^* H}{\pi l} (W_0^2 \delta^2 \sin B_\Delta - \Delta_\delta^2 \sin B_W) - \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^2 (2\Delta_\delta \cos B_\Delta - 2W_0 \delta \cos B_W) + \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^3 (2 \sin B_\Delta - 2 \sin B_W) - \frac{\pi l}{\mu^* H} (W_0^4 \delta^4 - W_0^2 \delta^2 \Delta^2) \times \left[ \cos \frac{\pi l \xi}{\mu^* H} \left( \text{Si} \left( \frac{\pi l W_0 \delta}{\mu^* H} \right) - \text{Si} \left( \frac{\pi l \Delta_\delta}{\mu^* H} \right) \right) - \sin \frac{\pi l \xi}{\mu^* H} \left( \text{Ci} \left( \frac{\pi l \Delta_\delta}{\mu^* H} \right) - \text{Ci} \left( \frac{\pi l W_0 \delta}{\mu^* H} \right) \right) \right] \right\}, \quad (22)$$

где

$$B_W = \pi l \left( \frac{\xi + W_0 \delta}{\mu^* H} \right), \quad B_\Delta = \pi l \left( \frac{\xi + \Delta_\delta}{\mu^* H} \right).$$

В этих формулах  $\text{Si}(y)$ ,  $\text{Ci}(y)$  и  $\text{Ei}(y)$  — интегральные синус, косинус и экспонента соответственно,  $\Delta_\delta = \sqrt{\Delta^2 + W_0^2 \delta^2}$ .

Если не учитывать зависимости химического потенциала  $\xi$  и параметра порядка  $\delta$  от магнитного поля, то при  $W_0/\xi_0 = 2$  получается, что во всей докритической области  $\xi \equiv 0$  и, следовательно,  $\sigma_{mr} \equiv 0$ . Анализ выражения (21) показывает, что при  $-W_0 \delta \leq \xi \leq 0$  магнитопроводимость  $\sigma_{mr} \leq 0$ , а в области  $0 \leq \xi \leq W_0 \delta$   $\sigma_{mr} \geq 0$ . Поэтому область, где плотность состояний на уровне Ферми постоянна, является областью инверсии монотонной части магнитосопротивления.

Рассмотрим теперь более подробно осциллирующую часть электропроводности. В области магнитных полей, для которых  $W_0 \delta \gg 1$  и  $\Delta_\delta \gg 1$ , пользуясь асимптотическими разложениями интегрального синуса и интегрального косинуса при больших значениях аргумента, соотношение (22) можно переписать в следующем виде:

$$\sigma_{\text{osc}} = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^\sigma \left[ \sigma_l^{(1)} \cos \left( \frac{2\pi l h_1}{H} + \varphi_l^{(1)} \right) + \sigma_l^{(2)} \cos \left( \frac{2\pi l h_2}{H} + \varphi_l^{(2)} \right) \right], \quad (23)$$

где амплитуды, фазы и частоты осцилляций определяются по формулам:

$$\sigma_l^{(1)} = \frac{128\pi e^2 (m^*)^2 a^3 \tau \Delta}{h^6 k T} \left\{ 4 \left[ \frac{W_0^2 \delta^2 \Delta^2 - W_0^4 \delta^4}{\Delta_\delta} - \Delta_\delta \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^2 \right]^2 + \left[ 2 \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^3 + \frac{\mu^* H}{\pi l} W_0^2 \delta^2 \right]^2 \right\}^{1/2}, \quad (24)$$

$$\varphi_l^{(1)} = \pi + \text{arctg} \left\{ 2 \left[ \Delta_\delta \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^2 - \frac{W_0^2 \delta^2 \Delta^2 - W_0^4 \delta^4}{\Delta_\delta} \right] \times \left[ 2 \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^3 + \frac{\mu^* H}{\pi l} W_0^2 \delta^2 \right]^{-1} \right\}, \quad (25)$$

$$\sigma_l^{(2)} = \frac{128\pi e^2 (m^*)^2 a^3 \tau \Delta}{h^6 k T} \left\{ 4 \left[ W_0^3 \delta^3 - W_0 \delta \Delta^2 + W_0 \delta \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^2 \right]^2 + \left[ 2 \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^3 + \frac{\mu^* H}{\pi l} \Delta_\delta^2 \right]^2 \right\}^{1/2}, \quad (26)$$

$$\varphi_l^{(2)} = \text{arctg} \left\{ 2 \left[ W_0 \delta \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^2 + W_0^3 \delta^3 - W_0 \delta \Delta^2 \right] \times \left[ 2 \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^3 + \frac{\mu^* H}{\pi l} \Delta_\delta^2 \right]^{-1} \right\}, \quad (27)$$

$$h_1 = \frac{\xi + \Delta_\delta}{2\mu^*}, \quad (28)$$

$$h_2 = \frac{\xi + W_0 \delta}{2\mu^*}. \quad (29)$$

Из формул (23)–(29) следует, что частоты осцилляций ШДГ в зарядово-упорядоченном кристалле в области  $-W_0 \delta \leq \xi \leq W_0 \delta$  в „квазиклассическом“ приближении связаны, как в теориях Лифшица–Косевича [9] и Андреева–Косевича [10], с пятью экстремальными сечениями поверхности Ферми (ПФ) плоскостями, перпендикулярными полю. А именно трем максимальным сечениям (плоскостями  $k_z = 0$  и  $k_z = \pm \pi/a$ ) соответствуют частоты (28). Двум же минимальным сечениям (плоскостями  $k_z = \pm \pi/2a$ ) соответствуют частоты (29). Однако амплитуды и фазы осцилляций с точки зрения их зависимости от напряженности магнитного поля существенно отличаются от даваемых теориями Лифшица–Косевича и Андреева–Косевича. Такое отличие объясняется явным учетом зависимости функции  $W(x)$  от  $x$  и протяженности ПФ вдоль направления магнитного поля. Следует заметить, что межподзонные переходы в этих условиях могут быть подавленными, потому что условия  $W_0 \delta / \mu^* H \gg 1$ ,  $\Delta_\delta / \mu^* H \gg 1$  и  $(\Delta_\delta - W_0 \delta) / \mu^* H \leq 1$  при сильной анизотропии эффективных масс и яркой выраженности зарядового упорядочения могут выполняться одновременно.

Если же  $\Delta_\delta / \mu^* H \leq 1$  и  $W_0 \delta / \mu^* H \leq 1$ , то, представляя интегральные синус и косинус полиномами, соотношение (22) можно переписать в следующем виде:

$$\sigma_{\text{osc}} = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^\sigma \left[ \sigma_3^{(l)} \cos \left( \frac{2\pi l h_1}{H} + \varphi_3^{(l)} \right) + \sigma_4^{(l)} \cos \left( \frac{2\pi l h_2}{H} + \varphi_4^{(l)} \right) + \sigma_5^{(l)} \sin \left( \frac{2\pi l h_\xi}{H} \right) \right], \quad (30)$$

где

$$\sigma_3^{(l)} = \frac{128\pi e^2 m^{*2} a^3 \tau \Delta}{h^6 k T} \left\{ \left[ 2 \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^3 + \frac{\mu^* H}{\pi l} W_0^2 \delta^2 \right]^2 + \left[ \frac{W_0^4 \delta^4 - W_0^2 \delta^2 \Delta^2}{\Delta_\delta} - 2\Delta_\delta \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^2 \right]^2 \right\}^{1/2}, \quad (31)$$

$$\varphi_3^{(l)} = \pi + \text{arctg} \left[ \left( 2\Delta_\delta \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^2 - \Delta_\delta^{-1} (W_0^4 \delta^4 - W_0^2 \delta^2 \Delta^2) \right) \left( 2 \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^3 + \frac{\mu^* H}{\pi l} W_0^2 \delta^2 \right)^{-1} \right], \quad (32)$$

$$\sigma_4^{(l)} = \frac{128\pi e^2 m^{*2} a^3 \tau \Delta}{h^6 k T} \left\{ \left[ 2 \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^3 + \frac{\mu^* H}{\pi l} \Delta_\delta^2 \right]^2 + \left[ W_0^3 \delta^3 - W_0 \delta \Delta^2 - 2W_0 \delta \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^2 \right]^2 \right\}^{1/2}, \quad (33)$$

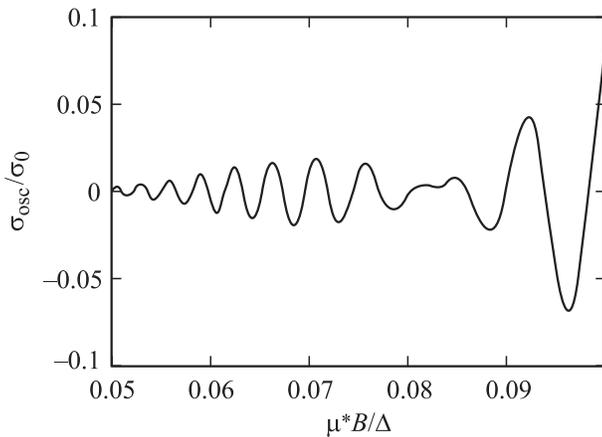
$$\varphi_4^{(l)} = \text{arccctg} \left\{ \left[ W_0 \delta \Delta^2 - W_0^3 \delta^3 + 2W_0 \delta \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^2 \right] \times \left[ 2 \left( \frac{\mu^* H}{\pi l} \right)^3 + \frac{\mu^* H}{\pi l} \Delta_\delta^2 \right]^{-1} \right\}, \quad (34)$$

$$\sigma_5^{(l)} = \frac{128 \pi e^2 m^{*2} a^3 \tau \Delta}{h^6 k T} (W_0^4 \delta^4 - W_0^2 \delta^2 \Delta^2) \frac{\pi l}{\mu^* H} \ln \left( \frac{\Delta_\delta}{W_0 \delta} \right), \quad (35)$$

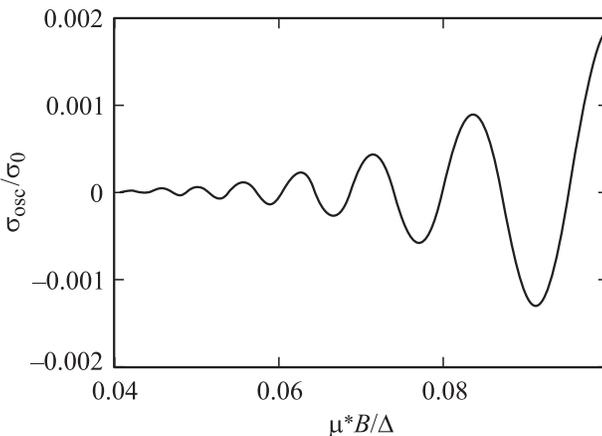
где

$$h_\xi = |\xi| / 2\mu^*. \quad (36)$$

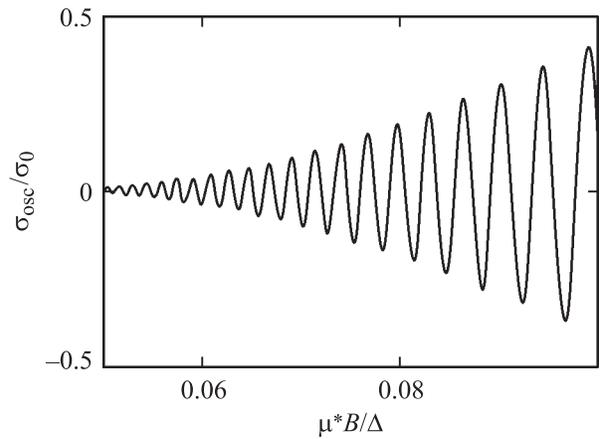
Из формул (30)–(36) видно, что в ультраквантовых магнитных полях наряду с квазиклассическими частотами  $h_1$  и  $h_2$  в спектре осцилляций ШДГ присутствует неквазиклассическая частота  $h_\xi$ , которая при  $\delta \neq 0$  не может быть отождествлена с каким-либо сечением ПФ плоскостью, перпендикулярной магнитному полю. Если  $\xi \equiv 0$ , то согласно (30) и (36) вклад этой частоты равен



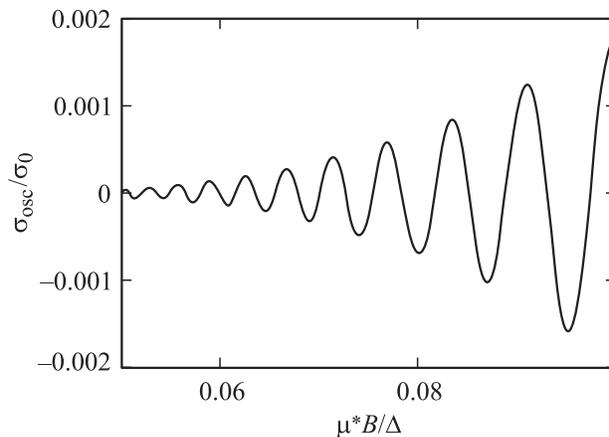
**Рис. 1.** Полевая зависимость осциллирующей части электропроводности зарядово-упорядоченного кристалла при  $W_0 \delta / \Delta = 2$  и  $kT / \Delta = 0.03$ .



**Рис. 2.** Полевая зависимость осциллирующей части электропроводности неупорядоченного кристалла при совпадении уровня химического потенциала с серединой минизоны ( $kT / \Delta = 0.03$ ).



**Рис. 3.** Полевая зависимость осциллирующей части электропроводности зарядово-упорядоченного кристалла при  $W_0 \delta / \Delta = 4$  и  $kT / \Delta = 0.03$ .



**Рис. 4.** Полевая зависимость осциллирующей части электропроводности неупорядоченного кристалла при совпадении уровня химического потенциала с потолком минизоны ( $kT / \Delta = 0.03$ ).

нулю. Но в сильных ультраквантовых полях даже при  $W_0 / \xi_0 = 2$  величина  $\xi \neq 0$ , и поэтому данная частота проявляется.

Обычно, однако, исследование эффекта Шубникова–де-Гааза проводится в магнитных полях, в которых справедлива формула (23), содержащая две частоты. И они действительно наблюдаются в резко анизотропных слоистых кристаллах с открытыми ПФ [14]. Именно для таких ПФ построена теория поперечных гальваномагнитных эффектов в слоистых проводниках [15], хотя она не опирается на концепцию межслоевого зарядового упорядочения.

Качественно эффекты, которые можно наблюдать в зарядово-упорядоченных слоистых кристаллах, иллюстрируются рис. 1–4. На рис. 1 изображена осциллирующая часть электропроводности в единицах  $\sigma_0$  в случае  $kT / \Delta = 0.03$ ,  $W_0 / \xi_0 = 2$  и  $W_0 \delta / \Delta = 2$ . Из него видно, что осцилляции в этом случае имеют двоякопериодическую

структуру, ибо на высокую „несущую“ частоту наложена низкая „модулирующая“. При этом мы полагаем, что в слабых полях при низких температурах  $\xi \equiv 0$ , а параметр порядка  $\delta$  близок к единице. Следовательно, согласно (28) и (29) при яркой выраженности зарядового упорядочения, когда  $W_0\delta$  и  $\Delta_\delta$  слабо отличаются друг от друга, „несущая“ частота  $h_0$  определяется по формуле

$$h_0 = W_0\delta/2\mu^*, \quad (37)$$

а „модулирующая“ — по формуле

$$h_M = \Delta^*/2\mu^*, \quad (38)$$

где

$$\Delta^* = (\Delta_\delta - W_0\delta)/2. \quad (39)$$

Величина  $\Delta^*$  есть перенормированная зарядовым упорядочением ширина минизоны. Относительный вклад осциллирующей части в полную проводимость в этом случае достигает 10%, в то время как в неупорядоченном состоянии при расположении уровня Ферми посередине разрешенной минизоны при тех же условиях этот вклад не превышает 0.2%, а осцилляции имеют однопериодическую структуру (рис. 2).

При большей величине эффективного взаимодействия, например при  $W_0\delta/\Delta = 4$ , „несущая“ частота возрастает, а „модулирующая“ уменьшается (рис. 3). Относительный вклад осциллирующей части в полную проводимость при этом увеличивается до 50%. Это происходит потому, что при уменьшении  $\Delta^*$  с ростом  $W_0\delta$  резко уменьшается  $\sigma_0$ , т.е. упорядочение увеличивает степень квазидвумерности структуры, что также согласуется с экспериментом [3] и может служить доказательством корректности выбора модели зонного спектра зарядово-упорядоченного слоистого кристалла. В то же время отношение  $\mu^*H/\Delta^*$  увеличивается, что и приводит к возрастанию относительного вклада осциллирующей части проводимости. В неупорядоченном же состоянии при совпадении уровня Ферми, например, с потолком минизоны частота осцилляций возрастает, но они остаются однопериодическими и их относительный вклад по-прежнему не превышает 0.2% (рис. 4).

Следует заметить, что даже слоистые кристаллы, ПФ которых в неупорядоченном состоянии являются замкнутыми, в упорядоченном состоянии приобретают свойства, присущие материалам с открытыми ПФ, что и приводит к появлению второго периода осцилляций ШДГ. В то же время два близких по величине периода осцилляций ШДГ могут наблюдаться и в отсутствие зарядового упорядочения, если ПФ кристалла изначально обладает большой степенью открытости. Но в кристаллах без зарядового упорядочения относительный вклад осцилляций значительно меньше, нежели в неупорядоченных кристаллах. Например, даже при отношении  $\xi/\Delta = 131$ , как в кристаллах  $\beta$ -ET<sub>2</sub>JVBr<sub>2</sub>, в квазиклассических магнитных полях относительный вклад осцилляций не превышает 0.2%.

Известно, что образование зарядово-упорядоченного состояния достаточно часто предшествует сверхпроводящему переходу при высокой температуре [16]. В то же время квазидвумерные кристаллы, не обнаруживающие склонности к зарядовому упорядочению, являются обычными низкотемпературными сверхпроводниками. Но и в нормальном состоянии у высокотемпературных сверхпроводников относительный вклад осцилляций ШДГ в полную проводимость гораздо больше, чем у низкотемпературных [17,18].

В заключение оценим порядки величин частот и амплитуд осцилляций электропроводности в слоистых кристаллах. При наличии упорядочения, принимая  $\xi = 0$ ,  $m^* = 0.01m_0$ ,  $\Delta = 0.01$  эВ,  $W_0\delta/\Delta = 2$ , получим  $h_0 = 1.83$  Тл,  $h_M = 0.102$  Тл, а при  $W_0\delta/\Delta = 4$   $h_0 = 3.51$  Тл,  $h_M = 0.053$  Тл. Что же касается амплитуд осцилляций, то величина  $\sigma_0$ , с которой они сравниваются, при  $T = 1$  К,  $\Theta = 10$  эВ,  $\rho = 5 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>,  $s = 5 \cdot 10^3$  м/с и выше оговоренных прочих параметрах модели составит в неупорядоченном состоянии, согласно формулам (7)–(9) и (22), величину  $1.15 \cdot 10^7$  См/м. В упорядоченном же состоянии при  $W_0\delta/\Delta = 2$  она составит  $1.51 \cdot 10^5$  См/м, т.е. уменьшится в 76 раз. При  $W_0\delta/\Delta = 4$  величина  $\sigma_0$  будет равна  $2.10 \cdot 10^4$  См/м, т.е. величине, в 547 раз меньшей, чем в неупорядоченном состоянии. Это не только качественно, но и количественно согласуется с экспериментами на дихалькогенидах переходных металлов и синтетических металлах на основе соединений внедрения в графит [3]. С другой стороны, если бы зарядовое упорядочение было внутрислоевым, то при переходе в упорядоченное состояние анизотропия проводимости слоистого кристалла должна была бы не возрастать, а падать.

### 3. Заключение

Таким образом, в статье показано, что при переходе в зарядово-упорядоченное состояние замкнутая поверхность Ферми слоистого кристалла может превращаться в открытую, что приводит к появлению дополнительной частоты в спектре осцилляций Шубникова–де-Гааза. Чем ярче выражено зарядовое упорядочение, тем ближе частоты осцилляций продольной проводимости друг к другу и тем больше относительный вклад осциллирующей части проводимости в полную проводимость. Поскольку переход в зарядово-упорядоченное состояние весьма часто характерен для высокотемпературных сверхпроводников, эти факты можно использовать для их диагностики.

Кроме того, показано, что при переходе в зарядово-упорядоченное состояние анизотропия проводимости слоистого кристалла резко возрастает, что может служить аргументом в пользу используемой модели зарядового упорядочения.

## Список литературы

- [1] J.M. Harper, T.H. Geballe. Phys. Lett. A, **54**, 27 (1975).
- [2] В.В. Павлович, Э.М. Эпштейн. ФТП, **19**, 1760 (1976).
- [3] C. Zeller, G.M.T. Foley, E.R. Falardeau, F.L. Vogel. Mater. Sci. Eng., **31**, 255 (1977).
- [4] А.И. Кононов, Ю.В. Копаев. ФТТ, **16**, 1122 (1974).
- [5] Ю.А. Изюмов, В.М. Лаптев, В.Н. Сыромятников. ФММ, **77**, 17 (1994).
- [6] Э.А. Пашицкий, А.С. Шпигель. ФНТ, **4**, 976 (1978).
- [7] П.В. Горский. Вестн. Харьков. ун-та „Внутренние и внешние задачи электродинамики“, № 227, 33 (1982).
- [8] П.В. Горский, И.Я. Кановский, М.В. Ницович. Физическая электроника, **27**, 102 (1983).
- [9] И.М. Лифшиц, А.М. Косевич. ЖЭТФ, **29**, 730 (1955).
- [10] В.В. Андреев, А.М. Косевич. ЖЭТФ **39**, 741 (1960).
- [11] А. Исихара. *Статистическая физика* (М., Мир, 1973).
- [12] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках* (М., Наука, 1984).
- [13] Ф.Г. Басс, А.А. Булгаков, А.П. Тетервов. *Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешеткой* (М., Наука, 1989).
- [14] М.В. Карцовник, П.А. Кононович, В.М. Лаухин, И.Ф. Щеголев. Письма ЖЭТФ, **48**, 498 (1988).
- [15] В.Г. Песчанский. ЖЭТФ, **121**, 1204 (2002).
- [16] F.J.Di Salvo. Ferroelectrics, **17**, 361 (1977).
- [17] J.H. Schon, Ch. Kloe, B. Battlog. Nature, **408**, 970 (2000).
- [18] J.H. Schon, Ch. Kloe, B. Battlog. Science, **293**, 2432 (2001).

Редактор Т.А. Полянская

## Conductivity of charge-ordered layered crystals in quantizing magnetic fields in the inversion region of the nonoscillating magnetoresistance component

*P.V. Gorskyi*

Yu. Fed'kovich National University,  
58012 Chernivtsi, Ukraine

**Abstract** The conductivity of charge-ordered layered crystals in electric and quantizing magnetic fields orthogonal to the layers has been calculated. Charge ordering is considered as an alternation of layers with different charge carrier densities. In the case of scattering by acoustic phonons, the conductivity is calculated in the approximation of profound quantization, so that the intersubband transitions can be assumed suppressed. It is shown that, in the transition of the layered crystal from the disordered to almost completely ordered state, the conductivity oscillations exhibit double periodicity. In this case, the high „carrier“ frequency is controlled by the effective attractive electron–electron interaction responsible for the charge ordering, whereas the low „modulation“ frequency is defined by the width of the narrow miniband in the direction orthogonal to the layers. It is also shown that, in the transition from the disordered to almost completely ordered state, the longitudinal conductivity of the layered crystals decreases by two or three orders of magnitude. At the same time, the relative contribution of oscillations sharply increases, in satisfactory agreement with the experimental data.