

*На правах рукописи*

**Дзедбисашвили Дмитрий Михайлович**

**НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ СВОЙСТВА  
И КУПЕРОВСКАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ  
СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ**

01.04.07 — физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

**Красноярск 2010**

Работа выполнена в Институте физики им. Л.В.Киренского СО РАН,  
г. Красноярск

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
член-кор. РАН Максимов Л.А.

доктор физико-математических наук,  
профессор Барабанов А.Ф.

доктор физико-математических наук,  
профессор Зиненко В.И.

Ведущая организация: Институт Физических Проблем  
им. П.Л.Капицы РАН, г. Москва

Защита состоится " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2010 года в \_\_\_\_ часов на засе-  
дании диссертационного совета Д 003.055.02 при Институте физики им.  
Л.В.Киренского СО РАН по адресу: 660036, г. Красноярск, Академгородок,  
Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, главный корпус.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института физики им.  
Л.В. Киренского СО РАН.

Автореферат разослан " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2010 года.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
доктор физико-математических наук

Втюрин А.Н.

## I. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы.

Системы с сильными электронными корреляциями (СЭК) не смотря на свою, почти пятидесятилетнюю, историю до сих пор остаются объектом пристального внимания как экспериментаторов, так и теоретиков. Сильно коррелированными называются системы в которых характерная энергия взаимодействия квазичастиц соизмерима, или превышает кинетическую энергию. Характерной особенностью соединений с СЭК является присутствие в их составе элементов с незаполненными  $3d$ - или  $4f(5f)$ -оболочками. Электроны таких орбиталей в твердотельной фазе проявляют известный дуализм, демонстрируя признаки как локализованных, так и коллективизированных состояний. Такой дуализм обуславливает сильную взаимосвязь зарядовых и спиновых степеней свободы и индуцирует разнообразие сценариев формирования основного состояния. В последнее десятилетие было открыто большое количество соединений, в которых наблюдаются магнитные и электронные переходы по различным параметрам (температура, магнитное поле, давление, химическое замещение). В настоящей диссертации решается комплекс задач, направленных на понимание механизмов реализации упорядоченных (сверхпроводящих, антиферромагнитных) состояний и особенностей низкотемпературной термодинамики систем с СЭК.

Микроскопическое описание физических свойств сильно коррелированных систем основывается на трех базовых моделях: модели Хаббарда, периодической модели Андерсона,  $s - f$ -обменной модели. Рассмотрение конкретной физической задачи включает три этапа: 1) получение эффективного низкоэнергетического гамильтониана на основе одной из базовых моделей в режиме СЭК; 2) выбор тех эффективных взаимодействий низкоэнергетического гамильтониана, которые актуальны для описания физических свойств системы; 3) разработка методов корректного описания этих эффективных взаимодействий. Важность третьей задачи обусловлена тем, что в режиме сильных корреляций теория возмущений по межэлектронному взаимодействию не применима. В этом случае для расчета физических параметров необходимо использовать либо непертурбативные методы, либо подходы, позволяющие строго описывать СЭК. Примером такой методики, как известно, является диаграммная техника для операторов Хаббарда (ДТХ). Развитие теории сильно коррелированных систем по всем трем отмеченным выше направлениям составляет предмет диссертационного исследования.

**Цель работы.** Целью диссертационной работы является изучение: i) особенностей квантовых осцилляций в магнитоупорядоченных сильно коррелированных электронных системах; ii) влияния статических и динамических магнитных флуктуаций на механизм куперовской неустойчивости сильно коррелированных систем; iii) спектральных и термодинамических свойств тяжелофермионных антиферромагнетиков в скошенной фазе.

**Основные задачи работы.** Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

1. Изучить условия реализации температурных квантовых осцилляций намагниченности носителей тока в ферромагнитных полупроводниках при учете сильных электронных корреляций;
2. Выяснить природу аномальных особенностей эффекта де Гааза-ван Альфена в окрестности спин-флип перехода в  $CeCu_2Si_2$ ;
3. Исследовать влияние магнитного порядка в антиферромагнитных полуметаллах на температурные и полевые квантовые осцилляции намагниченности носителей тока;
4. Рассчитать спектр магнитных поляронов валентной зоны монониктидов церия и на его основе рассмотреть особенности осцилляций дГВА в окрестности спин-флип перехода;
5. Изучить влияние трехцентровых взаимодействий эффективного гамильтониана модели Хаббарда на область реализации сверхпроводящей фазы с  $d$ -типом симметрии параметра порядка;
6. Рассмотреть модификацию фазовой диаграммы ВТСП купратов при учете совместного влияния трехцентровых взаимодействия и статических спиновых флуктуаций;
7. Для периодической модели Андерсона при учете процессов спин-флуктуационного рассеяния вычислить амплитуду рассеяния. На основе анализа полюсов этой амплитуды рассеяния в куперовском канале вывести уравнение на критическую температуру и построить фазовую диаграмму;
8. Методом диаграммной техники для операторов Хаббарда при учете аномальной компоненты силового оператора построить теорию сверхпроводящей  $s$ -фазы скуттерудита  $LaFe_4P_{12}$  в условиях развитых спиновых флуктуаций;

9. Исследовать модификацию функции распределения хаббардовских квазичастиц за счет процессов рассеяния носителей тока на спиновых флуктуациях;
10. Построить эффективный низкоэнергетический гамильтониан периодической модели Андерсона, пригодный для описания металлической фазы сильно коррелированных систем;
11. Для периодической модели Андерсона в режиме  $U = \infty$  разработать метод вычисления динамической магнитной восприимчивости, выходящий за рамки приближения среднего поля;
12. Рассчитать электронный спектр тяжелофермионных антиферромагнитных интерметаллидов в скошенной фазе. На основе полученного спектра исследовать влияние магнитного поля на низкотемпературную термодинамику тяжелофермионных антиферромагнетиков;

**Научная новизна и практическая ценность.** Все полученные в диссертационной работе результаты являются новыми. В работе впервые:

1. На примере модели электронного строения  $HgCr_2Se_4$  показана принципиальная возможность экспериментального наблюдения температурных квантовых осцилляций намагниченности в ферромагнитных полупроводниках;
2. Дано объяснение аномально быстрому нарастанию амплитуды осцилляций эффекта де Гааза – ван Альфена в правой окрестности спин-флип-перехода в тяжелофермионном антиферромагнетике  $CeCu_2Si_2$ ;
3. На основе учета  $s - f$ -обменной связи предложен сценарий резкой смены частоты осцилляций эффекта дГВА в антиферромагнитных полуметаллах в окрестности спин-флип-перехода;
4. Исследованы особенности температурных квантовых осцилляций намагниченности зонных электронов в антиферромагнитных полуметаллах;;
5. В рамках  $s - d(f)$ -обменной модели в режиме СЭК для узкозонных антиферромагнетиков вычислен спектр магнитных поляронов в условиях сильного скоса магнитных подрешеток;

6. На основе низкоэнергетического гамильтониана модели Хаббарда показано, что учет трехцентровых взаимодействий приводит к существенному подавлению температуры перехода в сверхпроводящую фазу с  $d$ -типом симметрии параметра порядка;
7. Получены решения с  $s$ -,  $p$ -, и  $d$ -типом симметрии сверхпроводящего параметра порядка при учете дальних взаимодействий из 2-ой и 3-ей координационных сфер;
8. Показано, что одновременный учет трехцентровых взаимодействий и статических спиновых флуктуаций приводит к формированию в плотности квазичастичных состояний дополнительной особенности ван Хова в области малого дырочного допирования  $x$ . Эта особенность смещает максимум концентрационной зависимости  $T_c$  в область малых, экспериментально наблюдаемых, значений  $x$ ;
9. Для периодической модели Андерсона в режиме СЭК вычислена амплитуда рассеяния  $f$ -электронов в куперовском канале с учетом спин-флуктуационных процессов. Из анализа полюсов этой амплитуды получено уравнение на  $T_c$  учитывающее процессы спин-флуктуационного рассеяния. Построена фазовая диаграмма периодической модели Андерсона. Показано, что область куперовской неустойчивости примыкает к границе магнитоупорядоченной фазы и не пересекается с ней;
10. Для периодической модели Андерсона в режиме СЭК методом диаграммной техники для операторов Хаббарда получены точные представления функций Грина сверхпроводящей фазы через нормальные и аномальные компоненты массового и силового операторов. Показано, что в однопетлевом приближении, введенные в теорию аномальные компоненты силового оператора, описывают динамические процессы спин-флуктуационного рассеяния. В этом же приближении получена бесконечная система уравнений для сверхпроводящего параметра порядка. Показано, что уравнение на критическую температуру, получаемое из этой системы в статическом приближении, совпадает с уравнением на  $T_c$ , найденным из амплитуды рассеяния в куперовском канале;
11. Рассчитана модификация функции распределения хаббардовских квазичастиц, обусловленная учетом динамических процессов рассеяния на спиновых флуктуациях;

12. Методом двух последовательных унитарных преобразований получен эффективный низкоэнергетический гамильтониан периодической модели Андерсона в режиме СЭК до 4-го порядка по отношению  $V_{12}/U$ , где  $V_{12}$ -амплитуда гибридизационных переходов в верхнюю Хаббардовскую подзону,  $U$ -энергия одноузельного кулоновского взаимодействия. Существенно, что полученный гамильтониан применим для описания систем с СЭК в металлической фазе;
13. Методом диаграммной техники для операторов Хаббарда в обобщенном приближении хаотических фаз получены аналитические выражения для динамической магнитной восприимчивости периодической модели Андерсона в режиме СЭК.
14. Для тяжелофермионных антиферромагнитных интерметаллидов находящихся в скошенной фазе вычислен фермиевский спектр и его модификация в широком интервале изменения температуры и магнитного поля. На основе полученного спектра рассчитана температурная зависимость теплоемкости и константы Зоммерфельда при различных значениях магнитного поля.

**На защиту выносятся следующие основные результаты:**

1. Развитие теории эффекта де Гааза-ван Альфена в сильно коррелированных системах с магнитным упорядочением. Обнаружение магнитного механизма подавления гибридизационного взаимодействия и увеличение амплитуды квантовых осцилляций. Выявление условий реализации температурных квантовых осцилляций в ферромагнитном полупроводнике  $HgCr_2Se_4$ . Объяснение anomalously быстрого увеличения амплитуды осцилляций дГВА в  $CeCu_2Si_2$ ;
2. Предсказание температурных квантовых осцилляций в широкозонных АФМ полуметаллах. Расчет спектра магнитных поляронов в скошенной АФМ фазе и полученные на этой основе условия резкой смены частоты осцилляций дГВА в монониктидах церия в окрестности спин-флип перехода;
3. Модификация области реализации сверхпроводящей  $d$ -фазы высокотемпературных сверхпроводников при учете i) трехцентровых взаимодействий; ii) дальних взаимодействий; а также iii) при одновременном учете трехцентровых взаимодействий и статических спиновых корреляций;

4. Описание сверхпроводящей  $s$ -фазы тяжелофермионных интерметаллидов при учете рассеяния  $f$ -электронов на спиновых флуктуациях. Введение аномальной компоненты силового оператора и выяснение ее роли в механизме куперовской неустойчивости;
5. Модификация функции распределения Хаббардовских квазичастиц при учете динамических процессов спин-флуктуационного рассеяния;
6. Вывод, в режиме сильных электронных корреляций, эффективного низкоэнергетического гамильтониана периодической модели Андерсона, пригодного для описания состояния с переменной валентностью;
7. Получение методом диаграммной техники для операторов Хаббарда в обобщенном приближении хаотических фаз для периодической модели Андерсона аналитического выражения для динамической магнитной восприимчивости;
8. Для скошенной фазы тяжелофермионных антиферромагнитных интерметаллидов вычисление спектра фермиевских возбуждений и низкотемпературной термодинамики во внешнем магнитном поле.

#### **Апробация работы и публикации.**

Основные результаты диссертационной работы неоднократно обсуждались на семинарах отдела теоретической физики Института физики им. Л.В.Киренского СО РАН, на семинарах отделения физики твердого тела Физического Института им.П.Н.Лебедева (2006г., и 2010г), а также на всероссийских и международных конференциях: 1) Всероссийской школы-семинара "Новые магнитные материалы микро-электроники", Москва, Россия (1996); 2) "Problems of condensed matter theory" Moscow, Россия (1997); 3) "International conference on strongly correlated electron systems" Paris, France (1998); 4) "33-ие совещание по физике низких температур", Екатеринбург, Россия (2003); 5) XXX международная зимняя школа физиков-теоретиков "Коуровка-2004", Екатеринбург-Челябинск, Россия (2004); 6) Euro-Asian Symposium "Trends in magnetism", Krasnoyarsk, Russia (2004); 7) "Фундаментальные проблемы сверхпроводимости", Москва-Звенигород, Россия (2004); 8) "International conference on strongly correlated electron systems", Vienna, Austria (2005); 9) XXXI международная зимняя школа физиков-теоретиков "Коуровка-2006", Кыштым, Челябинская обл., Россия (2006); 10) "International conference on magnetism", Kyoto, Japan (2006); 11) "Фунда-



ментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости", Москва-Звенигород, Россия (2006); 12) "34-ое совещание по физике низких температур", Ростов-на-Дону - п.Лоо, Россия (2006); 13) Euro-Asian symposium "Magnetism on nanoscale", Kasan, Russia, (2007); 14) XXXII международная зимняя школа физиков-теоретиков "Коуровка-2008", г.Новоуральск, Свердловской обл. Россия (2008); 15) "Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости", Москва ФИАН-Звенигород, Россия (2008); 16) "International conference on magnetism", Karlsruhe, Germany (2009); 17) "35-ое совещание по физике низких температур", Черногоровка, Россия (2009).

По результатам диссертации опубликовано 23 работы.

1. Вальков В.В., Дзедбисашвили Д.М. Влияние магнитного упорядочения на температурные квантовые осцилляции намагниченности носителей тока в сильнокоррелированных системах // ЖЭТФ. – 1997. – Т. 111. – №2. – С. 654-668.
2. Вальков В.В., Дзедбисашвили Д.М. Влияние антиферромагнитного упорядочения на эффект де Гааза-ван Альфена в полуметалле // ФТТ. – 1997. – Т. 39. – №2. – С. 204-210.
3. Вальков В.В., Дзедбисашвили Д.М. Влияние магнитополяронных состояний полуметаллических антиферромагнетиков на эффект де Гааза-ван Альфена // ФММ. – 1997. – Т. 84. – №3. – С. 30-43.
4. Вальков В.В., Дзедбисашвили Д.М. Магнитополяронные состояния сильно коррелированного антиферромагнетика в окрестности спин-флип-перехода // ФТТ. – 1998. – Т. 40. – №2. – С. 310-314.
5. Вальков В.В., Дзедбисашвили Д.М. Об аномальной  $H$ -зависимости дГВА-амплитуды в тяжелофермионном  $CeCu_2Si_2$  // Письма в ЖЭТФ. – 1998. – Т. 67. – №4. – С. 270-275.
6. Вальков В.В., Дзедбисашвили Д.М. Температурные квантовые осцилляции намагниченности в антиферромагнитных полуметаллах // ФТТ. – 1998. – Т. 40. – №9. – С. 1674-1680.
7. Вальков В.В., Валькова Т.А., Дзедбисашвили Д.М., Овчинников С.Г. Сильное влияние трехцентровых взаимодействий на формирование сверхпроводимости  $d_{x^2-y^2}$  - симметрии в  $t - J^*$ - модели // Письма в ЖЭТФ. – 2002. – Т. 75. – №8. – С. 450-454.

8. Вальков В.В., Дзедбисашвили Д.М. Модификация сверхпроводящего параметра порядка дальними взаимодействиями // Письма в ЖЭТФ. – 2003. – Т. 77. – №7. – С. 450-454.
9. Вальков В.В., Дзедбисашвили Д.М., Кравцов А.С. Спектральные представления и проблема описания сверхпроводящего состояния с S-типом симметрии параметра порядка // Письма в ЖЭТФ. – 2003. – Т. 77. – №9. – С. 604-608.
10. Val'kov V.V., Val'kova T.A., Dzebisashvili D.M., Ovchinnikov S.G. Three-center interactions and magnetic mechanism of superconductivity with  $d_{x^2-y^2}$ -symmetry in the  $t - J^*$ -Model // Modern Physics Letters B. – 2003. – V. 17. – №10-12. – P. 441-449.
11. Вальков В.В., Дзедбисашвили Д.М., Кравцов А.С. О вычислении спектральных интенсивностей аномальных средних в теории сверхпроводников с сильными электронными корреляциями // ДАН. – 2003. – Т. 393. – №2. – С. 176-179.
12. Вальков В.В., Дзедбисашвили Д.М. Электронный спектр и температура сверхпроводящего перехода сильно коррелированных фермионов с трехцентровыми взаимодействиями // ЖЭТФ. – 2005. – Т. 127. – №3. – С. 686-695.
13. Val'kov V.V., Dzebisashvili D.M. Energy Structure of Heavy-Fermion Antiferromagnets in a Magnetic Field // The Physics of Metals and Metallography. – 2005. – V. 99. – Suppl. 1. – P. S106-S109.
14. Val'kov V.V., Golovnya A.A., Dzebisashvili D.M. The role of anomalous strength operator in the high- $T_c$  superconductivity theory // Physica B: Condensed matter. – 2006. – V. 378-380. – P. 465-466.
15. Val'kov V.V., Dzebisashvili D.M. Canted phase of an antiferromagnetic Anderson lattice // Physica B: Condensed matter. – 2006. – V. 378-380. – P. 692-693.
16. Вальков В.В., Дзедбисашвили Д.М. О сверхпроводимости s-типа в тяжелофермионных соединениях // Письма в ЖЭТФ. – 2006. – Т. 84. – №4. – С. 251-255.

17. Вальков В.В., Дзедзисашвили Д.М. Сверхпроводимость  $s$ -типа в периодической модели Андерсона в режиме сильных электронных корреляций // Вестник НГУ, Серия: Физика. – 2007. – Т. 2. – №1. – С. 75-81.
18. Вальков В.В., Дзедзисашвили Д.М. Эффективные взаимодействия в периодической модели Андерсона в режиме смешанной валентности при сильных корреляциях // ТМФ. – 2008. – Т. 157. – №2. – С. 236-250.
19. Вальков В.В., Дзедзисашвили Д.М. Спин-флуктуационная ренормировка критической температуры сверхпроводящей  $s$ -фазы редкоземельных интерметаллидов // ЖЭТФ. – 2008. – Т. 134. – №4 С. 791-805.
20. Вальков В.В., Дзедзисашвили Д.М. Функция распределения хаббардовских квазичастиц в 2D-системах при учете динамических процессов спин-флуктуационного рассеяния // ФТТ. – 2009. – Т. 51. – №5. – С. 833-838.
21. Вальков В.В., Дзедзисашвили Д.М., Головня А.А. Спин-флуктуационные процессы в проблеме основного состояния фермионов Хаббарда // Научная сессия МИФИ-2009, сборник трудов. – Т 4. – С. 127-130.
22. Вальков В.В., Дзедзисашвили Д.М. Особенности спектра тяжелых фермионов в скошенной фазе антиферромагнитных интерметаллидов // ТМФ. – 2010. – Т. 162. – №1. – С. 125-149.
23. Вальков В.В., Дзедзисашвили Д.М. Электронный спектр и теплоемкость тяжелых фермионов в скошенной фазе антиферромагнитных интерметаллидов // ЖЭТФ. – 2010. – Т. 137. – №2. – С. 341-360.

### **Личный вклад автора.**

Личный вклад автора определяется участием в постановке задач, проведении всех аналитических и численных расчетов, а также в обсуждении полученных результатов.

### **Структура и объём работы.**

Диссертационная работа состоит из введения, шести глав, заключения, двух приложений и списка литературы. Работа содержит 305 страниц, 2 таблицы и 51 рисунок.

## II. ОБЗОР СОДЕРЖАНИЯ РАБОТЫ

Во введении дается определение систем с сильными электронными корреляциями. Делается краткий обзор физических свойств этих систем. Обсуждаются базовые модели теории сильнокоррелированных систем и методы их исследования. Обосновывается актуальность темы диссертации.

В первой Главе теоретически исследованы особенности эффекта дГВА и условия реализации ТКО в сильнокоррелированных магнитоупорядоченных интерметаллидах и широкозонных антиферромагнитных полуметаллах.

В начале главы изучается возможность наблюдения температурных квантовых осцилляций в вырожденных ферромагнитных полупроводниках в режиме смешанной валентности магнитоактивных ионов. Рассмотрение проведено в рамках многоэлектронной модели халькогенидных хромовых шпинелей, описывающей подсистему электронов проводимости и разновалентные локализованные состояния магнитоактивных ионов хрома. Связь между двумя группами электронов осуществлялась не только за счет  $s-d(f)$ -обменного взаимодействия, но и посредством гибридизации, наличие которой позволяет правильно описывать системы с переменной валентностью. Ферромагнитное взаимодействие спиновых моментов ионов хрома описывалось обычным обменным гамильтонианом Гейзенберга в приближении ближайших соседей.

Существенным обстоятельством, упрощающим решение задачи, была малая величина концентрации носителей тока. Вследствие этого влиянием коллективизированной подсистемы электронов на локализованную можно было пренебречь. При этом спектральные характеристики зонных электронов в существенной степени управлялись через механизм  $s-d(f)$ -обменного взаимодействия величиной параметра магнитного порядка, а через гибридизацию - одноузельными корреляциями. Отмеченные факторы позволили из анализа полюсов функций Грина в беспетлевом приближении получить миксонный спектр, содержащий перенормированный параметр гибридизации  $\tilde{V}^2 = K_\sigma |V|^2$ , где

$$K_\sigma = \frac{1}{3} \left( \frac{3}{2} - 2\sigma R \right), \quad R = \frac{1}{N} \sum_f \langle S_f^z \rangle. \quad (1)$$

Возникновение множителя  $K_\sigma$  отражает наличие одноузельных корреляций. Без учета корреляций  $K_\sigma \equiv 1$ . Из уравнения (1) легко видеть, что при  $T \rightarrow 0$   $K_\uparrow \rightarrow 0$  а  $K_\downarrow \rightarrow 1$ . Действительно, при  $T = 0$  ионы  $Cr^{3+}$  находятся в состоянии с проекцией спинового момента  $m = 3/2$ . Т.к. высокоспиновые состояния

обладают большей энергией, то в локализованное состояние может перейти только  $s$ -электрон с  $\sigma = -1/2$ . В результате, в области низких температур, гибридизация для  $s$ -электронов с  $\sigma = +1/2$  оказывается подавленной.

Для вычисления осциллирующей части большого термодинамического потенциала была применена идеология работы [1], авторы которой, предложили использовать методологию Латтинжера совместно с представлением гибридизационного пропагатора в виде контурного интеграла в комплексной плоскости. Из найденного  $\Omega_{\sim}$  определялось выражение для намагниченности:

$$M_{\sim} = - \sum_{\sigma} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\omega_n > 0} \frac{(-1)^k}{\sqrt{k}} A_{k\sigma}(\omega_n) \sin \left( 2\pi k \frac{\tilde{\mu}_{n\sigma}}{\hbar\omega_c} + \varphi_{\sigma} \right), \quad (2)$$

$$A_{k\sigma}(\omega_n) = \left( \frac{TVe\tilde{\mu}_{n\sigma}}{\pi\hbar^2c} \right) \left( \frac{m_{\parallel}}{\hbar\omega_c} \right)^{1/2} \exp \left( -\frac{2\pi k\omega_n\alpha_{n\sigma}}{\hbar\omega_c} \right),$$

$$\alpha_{n\sigma} = 1 + \Gamma_{n\sigma}, \quad \Gamma_{n\sigma} = K_{\sigma}|V|^2 \{ \omega_n^2 + (\tilde{\varepsilon}_{d\sigma} - \mu)^2 \}^{-1},$$

$$\tilde{\mu}_{n\sigma} = \mu + \sigma JR + (\tilde{\varepsilon}_{d\sigma} - \mu)\Gamma_{n\sigma}, \quad \varphi_{\sigma} = 2\pi\sigma k \left( \frac{m_c}{m_0} \right) - \frac{\pi}{4}.$$

Видно, что фазы осциллирующих функций содержат слагаемое  $JR/\hbar\omega_c$ . Поскольку в магнитных полупроводниках обычно  $J \gg \hbar\omega_c$ , то даже небольшие изменения  $R$  могут приводить к заметному изменению отмеченных фаз, приводя тем самым к ТКО. Рассчитанный на основе выражения (2), типичный вид ТКО, а также сильная чувствительность амплитуды ТКО к величине  $s - d(f)$ -обменного взаимодействия и гибридизации продемонстрированы на рисунках 1 и 2. Подчеркивается, что для наблюдения дГВА важны два фактора. С одной стороны, из-за сильных одноузельных корреляций происходит уменьшение эффективной гибридизации для одной из спиновых подзон и, тем самым, устраняется гибридизационное подавление амплитуды эффекта дГВА. С другой стороны, наличие  $s - d(f)$ -обменного взаимодействия обеспечило сильное движение дна зоны проводимости при изменении температуры. В условиях пиннинга химпотенциала такая динамика приводит к ТКО.

Очевидно, что наличие  $s - f$ -обменной связи обуславливает также и сильную полевую зависимость положения дна зоны проводимости. В параграфе 1.4. диссертации это обстоятельство используется для объяснения экспериментально обнаруженного аномально сильного увеличения амплитуды осцилляций дГВА в окрестности спин-флип перехода в тяжелофермионном антиферромагнитном сверхпроводнике  $CeCu_2Si_2$  [2]. Изучение этого эффекта в

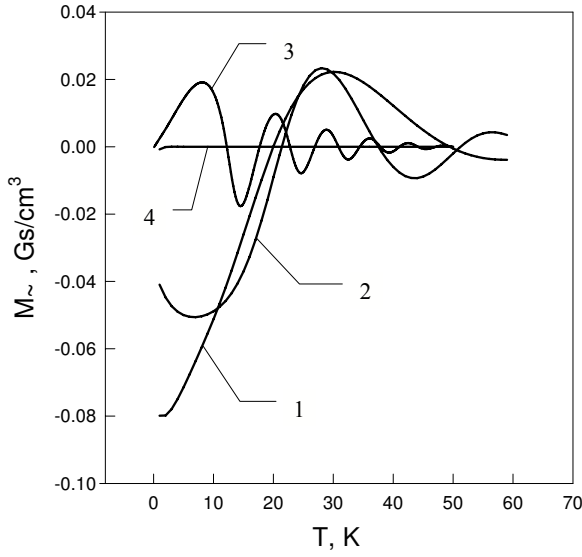


Рис. 1: Температурные квантовые осцилляции намагниченности при различных значениях параметра  $s - d(f)$ -обменного взаимодействия. 1)  $J = 0$ ; 2)  $J = 0.1$  эВ; 3)  $J = 0.8$  эВ; 4)  $J = -0.8$  эВ.  $V = 0.05$  эВ,  $H = 20$  кЭ,  $n = 3 \cdot 10^{18}$  см $^{-3}$ ,  $m = 0.01m_0$

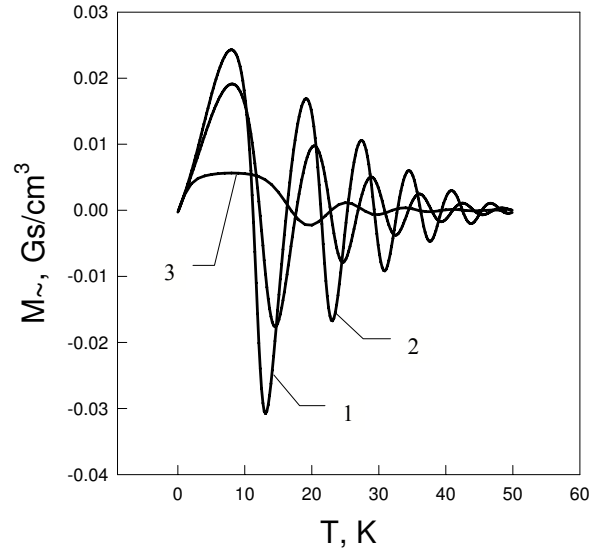


Рис. 2: Влияние гибридационного взаимодействия на температурные квантовые осцилляции намагниченности зонных электронов. 1)  $V = 0$ ; 2)  $V = 0.05$  эВ; 3)  $V = 0.1$  эВ.  $J = 0.8$  эВ,  $H = 20$  кЭ,  $n = 3 \cdot 10^{18}$  см $^{-3}$ ,  $m = 0.01m_0$

правой окрестности спин-флип перехода (когда система находится в ферромагнитной фазе), проводится в рамках периодической модели Андерсона (ПМА) в режиме СЭК. Для описания магнитного порядка в  $CeCu_2Si_2$  в гамильтониан ПМА добавлено также обменное взаимодействие между спинами локализованных  $f$ -электронов и  $s - d(f)$ -обменное взаимодействие между  $f$ - и  $s$ -электронами.

Вывод уравнений самосогласования, описывающих низкотемпературную термодинамику системы, проводится методом диаграммной техники для мацубаровских функций Грина. При этом, кроме обычной фермиевской диаграммной техники используется также диаграммная техника для операторов Хаббарда. Существенно, что в следствие учета сильных одноузельных корреляций в выражении для миксонного спектра возникает перенормировка эффективной константы гибридационного взаимодействия:  $V^2 \rightarrow \tilde{V}_\sigma^2 = K_\sigma V^2$ , где  $K_\sigma = \langle X^{00} \rangle + \langle X^{\sigma\sigma} \rangle$ . В предельном случае насыщенного ферромагнитного состояния:  $K_\uparrow = 1$ , а  $K_\downarrow = 0$ . В результате отмеченной перенормировки параметра  $V$ , изменение степени упорядоченности в подсистеме локализованных электронов будет приводить к изменению эффективной мас-

сы квазичастиц и таким образом сказываться на величине дГВА-амплитуды.

Результаты численных расчетов эффекта дГВА в правой окрестности спин-флип-перехода выполненные по формуле (2), представлены на рисунке 3. Осцилляции происходят только от одной спиновой подзоны с  $\sigma = \downarrow$ , для кото-

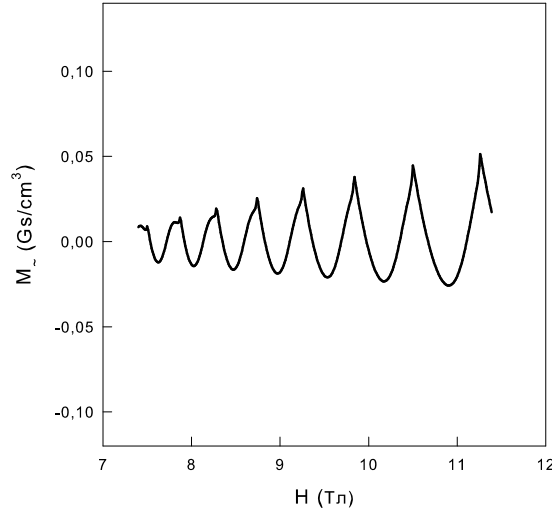


Рис. 3: Осциллирующая часть намагниченности в правой окрестности спин-флип-перехода тяжелофермионного антиферромагнетика. Параметры модели:  $J = 0.5 \text{ eV}$ ,  $V = 0.05 \text{ eV}$ ,  $T = 0.1 \text{ K}$ ,  $m = 0.1m_0$ ,  $I_0 = -8.1 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$ ,  $E_0 = 0.3 \text{ eV}$

рой гибридационный канал взаимодействия подавлен. Для подзоны с  $\sigma = \uparrow$  гибридизация велика, а значит амплитуда дГВА чрезвычайно мала. Видно, что при увеличении магнитного поля имеет место сильное нарастание амплитуды дГВА-осцилляций. Показывается, что физический механизм аномального нарастания амплитуды обусловлен зависимостью от магнитного поля средней заселенности локализованного уровня  $N_{\uparrow} = \langle X^{\uparrow\uparrow} \rangle$ , определяющей ренормировочный фактор ( $K_{\downarrow} = 1 - N_{\uparrow}$ ) параметра гибридизации.

В следующем параграфе изучается влияние антиферромагнитного порядка и квантовых флуктуаций намагниченности локализованной подсистемы на эффект дГВА в полуметаллах с низкой концентрацией носителей тока в окрестности спин-флип-перехода. Эти исследования стимулированы особенностями экспериментальных результатов по дГВА-эффекту в  $CeCu_2Si_2$  [2]. Другой класс соединений, обладающий антиферромагнитным порядком и проводящими свойствами, представляют монониктиды церия ( $CeAs$ ,  $CeSb$ ,

*CeP*). Электронная структура цериевых монопниктидов обусловливается наличием валентной зоны с потолком в  $\Gamma$ -точке зоны Бриллюэна, а также зоны проводимости, формируемой в окрестностях  $X$ -точек симметрии зоны Бриллюэна. Экспериментально установлена хорошая степень электрон-дырочной компенсации. Теоретически рассматривается модельная система, состоящая из двух зон (зоны проводимости и валентной зоны), которые через  $s - d(f)$ -обменное взаимодействие  $J_\lambda$  ( $\lambda = e$  - для электронов, и  $\lambda = h$  для дырок) связаны с магнитной подсистемой. Кроме этого, гамильтониан модели учитывает обменное взаимодействие локализованных спиновых моментов, а также энергию этих спинов в магнитном поле. При переходе в АФМ фазу, как известно, происходит модификация энергетического спектра носителей тока из-за существования  $s - d(f)$ -обменной связи. Для описания этого эффекта был совершен переход в представление Ванье с учетом двух ( $F$  и  $G$ ) подрешеток. В магнитном поле в изотропном АФМ имеет место скос подрешеток. В этом случае вектор ферромагнетизма ориентирован по полю, а вектор антиферромагнетизма перпендикулярен вектору  $\vec{H}$ . Поскольку в нашем случае подрешетки идентичны, то скашивание характеризовалось одним углом  $\theta$ . При этом существенно, что вследствие малости концентрации электронов и дырок равновесная конфигурация локализованных спинов определялась только взаимодействием внутри локализованной подсистемы. Для нахождения энергетического спектра электронов и дырок АФМ-полуметалла в магнитном поле был осуществлен переход в локальные системы координат для каждой из подрешеток. Смысл такого перехода заключался в ориентации равновесной намагниченности каждой подрешетки вдоль новой оси  $Oz'$ . В формальном отношении сказанному соответствовало проведение унитарного преобразования гамильтониана:  $\hat{\mathcal{H}} \rightarrow \hat{\mathcal{H}}' = U \hat{\mathcal{H}} U^+$ . Унитарный оператор  $U$  был выбран в виде:  $U = \prod_f \prod_g e^{i\theta(S_f^y + \sigma_f^y)} e^{-i\theta(S_g^y + \sigma_g^y)}$ . Используя законы преобразования для операторных величин (при поворотах на угол  $\theta$  для  $F$ - подрешетки и на  $-\theta$  для  $G$ - подрешетки) был получен электрон-дырочный гамильтониан в локальных координатах. Переход к новым координатам, при учете малой концентрации зонных квазичастиц и низких температур ( $T \ll T_N$ ), позволил провести обычное выделение слагаемых соответствующих учету среднего поля. Методом уравнений движения для мацубаровских функций Грина была получена система четырех уравнений и определен энергетический спектр квазичастиц. Учитывая малость концентрации носителей тока в рассматриваемых полуметаллах, а также малость параметра  $J_\lambda$  по сравнению с шириной



затравоочной зоны, электронный и дырочный спектры были представлены в виде:

$$E_{ek\sigma}^- = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \sigma(2\mu_B H + J_e R \cos \theta) \text{sign}(t_1^e),$$

$$E_{hk\sigma}^- = -\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} - \sigma(2\mu_B H + J_h R \cos \theta) \text{sign}(t_1^h), \quad \Delta = \varepsilon^h - 8|t_1^h| + 6t_2^h. \quad (3)$$

Из этих формул видна существенная особенность: в АФМ-фазе возникает дополнительное движение зон, обусловленное наличием слагаемых  $J_\lambda R \cos \theta$ . Продольная намагниченность  $R \cos \theta$  определялась с учетом квантовых флуктуаций, которые существенны в окрестности  $H_c$ . Используя полученные выражения для низкоэнергетического спектра выражение для осциллирующей части намагниченности носителей тока было записано в следующей форме:

$$M_\sim = - \sum_{\lambda\sigma} \left( \frac{\sqrt{2\mu_B} m_\lambda^{3/2} \tilde{\mu}_{\lambda\sigma} T}{2\pi \hbar^3 \sqrt{H}} \right) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k \sin(2\pi \tilde{\mu}_{\lambda\sigma} k / \hbar \omega_{c\lambda} - \pi/4)}{\sqrt{k} \sinh(2\pi^2 k T / \hbar \omega_{c\lambda})}, \quad (4)$$

Влияние магнитного порядка проявлялось через перенормированное выражение для химпотенциала, которое в скошенной АФМ-фазе, с учетом отмеченных квантовых флуктуаций намагниченности локализованной подсистемы имело вид:

$$\tilde{\mu}_{\lambda\sigma} = \mu_\lambda + \Delta_\lambda + \sigma \left[ 2\mu_B H + J_\lambda \left( S - \frac{\alpha}{2} \right) \left( \frac{g\mu_B H}{2SK_0} \right) \right] + \sigma \left( \frac{\alpha}{2} \right) J_\lambda \left( \frac{g\mu_B H}{2SK_0} \right)^3.$$

В области полей  $H < H_c \cos \theta < 1$  и зависимость аргумента синуса в выражении для намагниченности представима в виде:  $\varphi(H) = \varphi_0 + a/H + bH^2$ , где  $\varphi_0$ ,  $a$  и  $b$  постоянные величины. Последнее слагаемое в этом выражении, целиком определяемое квантовыми флуктуациями, привело к тому, что  $M_\sim$  потеряло строгую периодичность по  $1/H$ . Справа от точки спин-флип-перехода (при  $H > H_c$ ) периодичность осциллирующих слагаемых по  $1/H$  восстанавливается. Это приводит к резкой смене частоты осцилляций дГВА при переходе из скошенной АФМ- фазы в коллинеарную (рис. 4). Кроме того на рисунке 4 хорошо видны нелинейности в периоде осцилляций слева от спин-флип-точки, что целиком обусловлено учетом квантовых флуктуаций. Приводятся соотношения, связывающие скорости изменения фаз осциллирующих слагаемых в  $M_\sim$  и параметры  $s - d(f)$ -обменного взаимодействия  $J_\lambda$ . Показывается, что

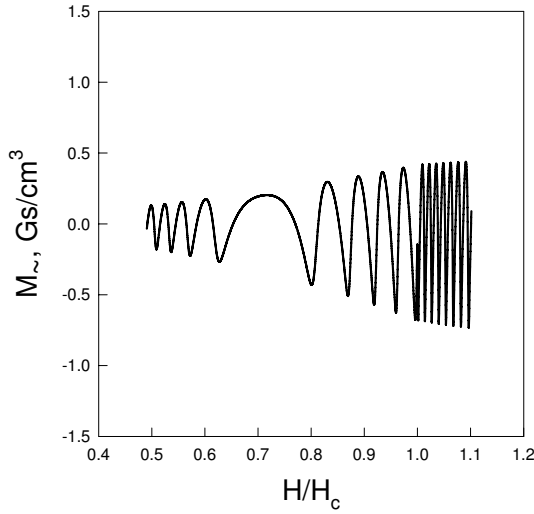


Рис. 4: Осциллирующая часть намагниченности зонных носителей в квантующем магнитном поле в АФМ-полуметалле

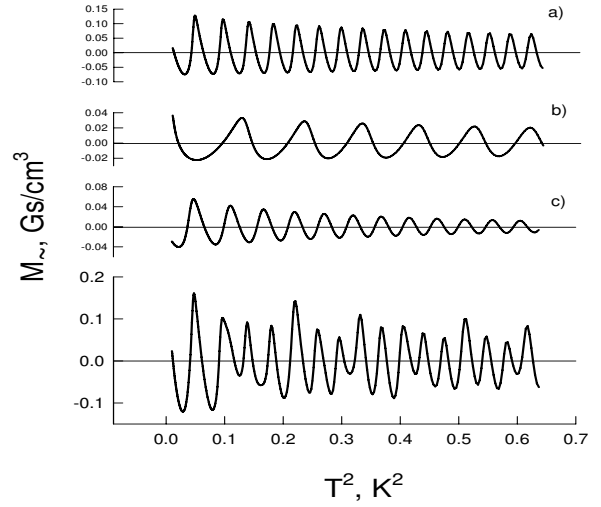


Рис. 5: ТКО антиферромагнитного полуметалла. Заполнены две электронные и одна дырочная подзоны.

эти соотношения могут оказаться полезными при экспериментальном изучении электронной структуры антиферромагнитных полуметаллов.

В заключении главы 1 исследуются температурные квантовые осцилляции намагниченности в широкозонных АФМ полуметаллах. Теоретическое рассмотрение ТКО в ферромагнитных полупроводниках, осуществленное в начале этой Главы, показало, что одним из главных факторов, определяющих возможность наблюдения ТКО, является  $s - d(f)$ -обменное взаимодействие. Поскольку, однако, температура Кюри в этих соединениях достаточно велика ( $T_c = 106$  К для  $HgCr_2Se_4$ ), то много всплесков намагниченности (прежде, чем они успевали затухнуть) наблюдать не удалось. Очевидно, что использование веществ с низкими температурами магнитного упорядочения ( $1 \div 10$  К), например, монониктидов церия, должно привести к увеличению числа всплесков ТКО. При изучении ТКО в АФМ полуметаллах были использованы результаты предыдущего параграфа. Осцилляции намагниченности, в этом случае, обуславливались сильной температурной зависимостью ферромагнитного параметра порядка  $R$ , который в свою очередь определял  $T$ -зависимость эффективного химпотенциала входящего в выражение (4) для  $M_{\sim}$ . Для нахождения температурной зависимости величины  $R$  в спин-волновом приближении строится низкотемпературная термодинамика локализованной подсистемы в условиях сильного скоса антиферромагнитных подрешеток. Вычисляются две ветви спиновых возбуждений и определяются

полевые и температурные зависимости магнитных параметров порядка. Далее проводятся численные расчеты которые показывают, что даже в области низких температур, где спин-волновое приближение является оправданным, изменение температуры приводит к большому числу всплесков в осцилляционной зависимости намагниченности зонных электронов. Анализируются вклады от отдельных электронных и дырочных спиновых подзон в ТКО и показывается, что эти вклады являются слабозатухающими и периодическими по  $T^2$  функциями (Рис. 5). Отмечается, что данное обстоятельство позволяет применить Фурье-анализ при исследовании ТКО и развить эффективную методику тестирования электронной структуры антиферромагнитных полуметаллов.

Во **второй главе** изучается эффект дГВА в узкозонных антиферромагнитных полуметаллах в окрестности точки спин-флип-перехода. Интерес к рассмотрению узкозонного варианта задачи ( $J \gg W$ ) обусловлен предположением о реализации магнитополяронных состояний в упоминавшихся выше цериевых монопниктидах. Формирование магнитных поляронов, в этом случае, происходит при участии  $s - d(f)$ -обменной связи, причем считается, что ширина затравочной валентной зоны мала по сравнению с характерной энергией  $s - d(f)$ - обменного взаимодействия. Описание электронной структуры валентной зоны узкозонных АФМ-полуметаллов проводится в рамках  $s - d(f)$ -обменной модели. Кроме этого, гамильтониан модели учитывает кинетическую энергию дырок валентной зоны, обменную энергию локализованных спиновых моментов в приближении Гейзенберга, зеемановскую энергию спинов в магнитном поле, а также кулоновское взаимодействие двух дырок на одном узле. В дальнейшем предполагалось  $U \rightarrow \infty$ , поэтому состояния с двумя дырками на узле исключены из рассмотрения. Формирование атомного спинового момента, в случае одной дырки на узле, происходит при участии как локализованного спинового момента  $S$ , так и спина дырки  $\sigma$ . Таким образом, в базис атомных состояний включены только состояния с одной дыркой и состояния без дырок. Поскольку энергия обменного взаимодействия предполагается самым большим параметром модели,  $s - d(f)$ -связь локализованной и коллективизированной подсистем учитывается точно. С математической точки зрения задача состоит в вычислении спектра магнитополяронных состояний в левой окрестности спин-флип-перехода, когда система находится в скошенной антиферромагнитной фазе. Для этого строится базис одноионных состояний, и затем, рассматривая кинетическую энергию как возмущение, методом диаграммной техники для операторов Хаббарда (ДТХ), определяется

дисперсионное уравнение, из которого, с необходимой точностью, вычисляется спектр низкоэнергетических фермиевских возбуждений (магнитных поляронов) в скошенной АФМ фазе в окрестности спин-флип-перехода. В главном приближении этот спектр имеет вид:

$$E_h(\vec{k}) = -\Delta(H) + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_{hc}} \cos \theta, \quad (5)$$

где  $\Delta(H) = \Delta_c + W_s(\cos \theta - 1) + \mu_B(H_c - H \cos \theta) - 2K_0S \sin \theta / (2S + 1)$ ,  $W_s = 16S|t_1^h| / (2S + 1)$ ,  $t_1^h$ - матричный элемент интеграла перескока между ближайшими соседями,  $m_{hc} = ((2S + 1)/2S)m_h$ ,  $m_h$ - эффективная масса свободной дырки,  $\Delta_c$ - значение  $\Delta(H)$  в точке спин-флип-перехода.

Из уравнения (5) видно, что в скошенной фазе кроме сильного движения дна магнитополяронной зоны при изменении  $H$  возникает дополнительное увеличение эффективной массы дырочных носителей тока  $\sim 1/\cos \theta$  в следствие полевой зависимости результирующих интегралов перескока. В коллинеарной фазе формула (5) остается справедливой, если положить  $\cos \theta = 1$  при всех  $H > H_c$ .

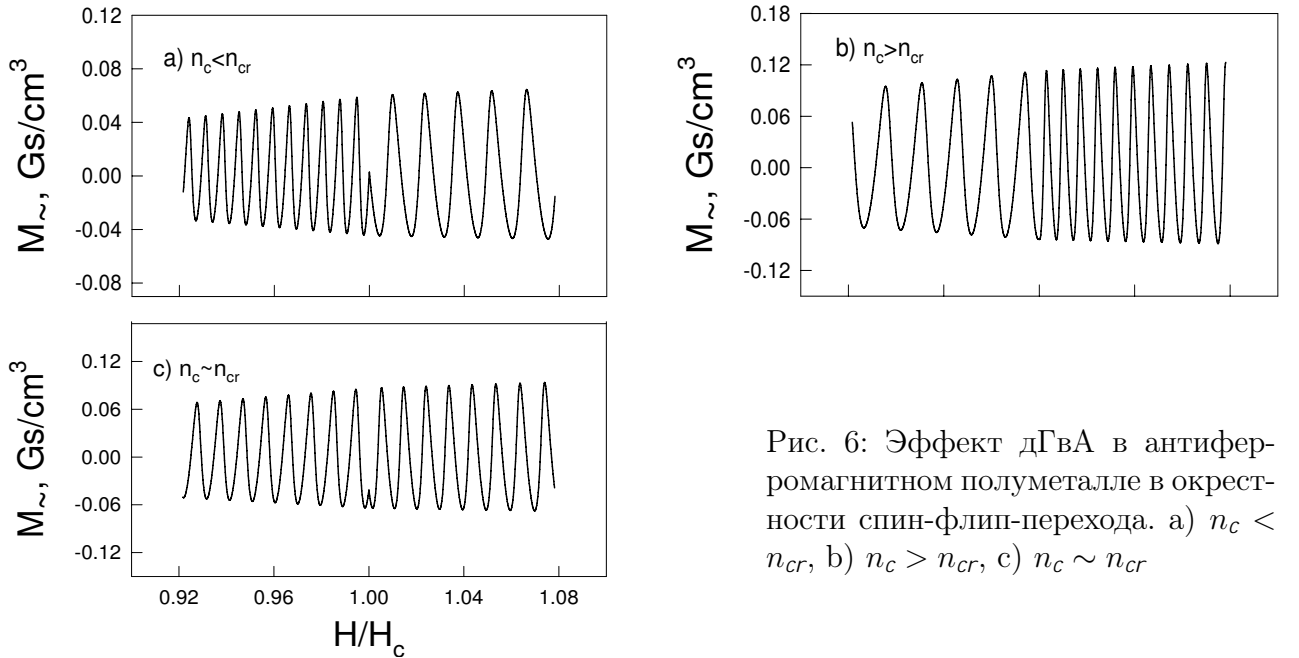


Рис. 6: Эффект дГВА в антиферромагнитном полуметалле в окрестности спин-флип-перехода. а)  $n_c < n_{cr}$ , б)  $n_c > n_{cr}$ , в)  $n_c \sim n_{cr}$

Изучение эффекта дГВА в узкозонных АФМ полуметаллах проводится в предположении, что валентная зона описывается квазичастицами со спектром (5), а спектр зоны проводимости записывается в приближении эффективной массы. Отмечается, что такая ситуация характерна для церие-

вых монопниктидов. Осцилляциями намагниченности от дырочной подзоны пренебрегается, поскольку масса дырок много больше массы электронов. Осциллирующая же часть намагниченности для электронов описывается обычным выражением (4). Из условия электронейтральности определяется зависимость химпотенциала от магнитного поля в АФМ-фазе:  $\mu(H) = \Delta(H)/(1 + \chi \cos \theta)$ , где  $\chi = 2^{2/3}m_e/m_{hc}$ . В коллинеарной же фазе химпотенциал постоянен. Установлено, что при низких концентрациях носителей тока, справа от точки спин-флип-перехода фаза осциллирующих множителей в (4) уменьшается с ростом  $H$  тогда как слева увеличивается. Получено критическое значение концентрации зонных носителей  $n_{cr}$  в точке  $H_c$ , разделяющей антиферромагнитные полуметаллы с качественно различным поведением эффекта дГВА в окрестности спин-флип-перехода:

При значениях концентрации носителей тока  $n$  меньших  $n_{cr}$  период осцилляций слева от  $H_c$  меньше, чем справа. Такая ситуация экспериментально наблюдалась в соединении  $CeCu_2Si_2$ . Если же концентрация носителей относительно велика ( $n > n_{cr}$ ), то осцилляции слева от точки перехода происходят реже, чем справа. Отмеченные особенности продемонстрированы на рисунке 6.

**Третья глава** посвящена изучению роли трехцентровых и дальних взаимодействий, а также статических спиновых флуктуаций на область реализации сверхпроводящей фазы с  $d$ - типом симметрии параметра порядка. Актуальность отмеченных задач связана с интенсивным применением модели Хаббарда для теоретического описания свойств высокотемпературных сверхпроводников (иногда изучение механизмов ВТСП проводится на основе эффекта Кона-Латтинжера [4, 5]). Модель Хаббарда [6] содержит два энергетических параметра: интеграл электронного перескока  $t_{fm}$  между узлами  $f$  и  $m$ , а также энергию кулоновского отталкивания  $U$  двух электронов, находящихся на одном узле (двойки). В режиме СЭК ( $U \gg |t|$ ), когда вероятность реализации двоечных состояний крайне мала, методом унитарных преобразований или по операторной форме теории возмущений, можно получить низкоэнергетический эффективный гамильтониан модели Хаббарда действующий на подпространстве не содержащем двойки  $\hat{\mathcal{H}}_{t-J^*}$ . В эффективном гамильтониане остаются перескоки электронов только по нижней Хаббардовской зоне и появляются эффективные взаимодействия:

$$\hat{V}_{eff} = \sum_{fmg\sigma} \left( \frac{t_{fm}t_{mg}}{U} \right) (X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} X_g^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma}) = \hat{\mathcal{H}}_{exch} + \hat{\mathcal{H}}_{(3)}. \quad (6)$$

При  $g = f$  взаимодействие  $\hat{V}_{eff}$  дает обменное слагаемое  $\hat{\mathcal{H}}_{exch}$ , ответственное за магнитный механизм ВТСП. Константой связи в этом случае является  $J_{fm} = 2t_{fm}^2/U$ . Если в качестве взаимодействия оставить только это слагаемое то полученный эффективный гамильтониан соответствует известной  $t - J$ -модели. Вторая часть  $\hat{V}_{eff}$ , обозначаемая посредством  $\hat{\mathcal{H}}_{(3)}$ , получается при разных  $f$  и  $g$ , и описывает трехцентровые взаимодействия. Взаимодействием  $\hat{\mathcal{H}}_{(3)}$  как правило пренебрегают, что оправдано при низкой концентрации носителей тока [7]. В данной главе диссертации показывается, что появление эффективных взаимодействий  $\hat{V}_{eff}$  обязано наличию конечного числа двоек в системе. Действительно при работе в гильбертовом пространстве гамильтониана  $\hat{\mathcal{H}}_{t-J^*}$  оператор двоек должен определяться выражением:  $\tilde{N}_2 = \exp(iS)\hat{N}_2 \exp(-iS)$ , где  $S$ -оператор задающий унитарное преобразование:  $\hat{\mathcal{H}}_{t-J^*} = \exp(iS)\hat{\mathcal{H}}_{Hub} \exp(-iS)$ . Вычисление с квадратичной по  $(t/U)$  точностью, дает:  $\tilde{N}_2 = -\hat{V}_{eff}/U$ , что и доказывает сделанное выше утверждение.

В данной главе, в рамках эффективного гамильтониана модели Хаббарда в режиме СЭК  $\hat{\mathcal{H}}_{t-J^*}$  впервые рассматривается влияние трехцентровых взаимодействий на область реализации SC-фазы в ВТСП купратах. При решении задачи применяются два метода. В первом случае используется диаграммная техника для операторов Хаббарда, обобщенная на случай учета трехцентровых взаимодействий. Во втором подходе применяется аппарат двухвременных неприводимых функций Грина. Уравнения самосогласования, полученные в рамках обоих методов, совпадают. Так, уравнение для параметра порядка (ПП) имеет вид:

$$\Delta_{\vec{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left\{ 2t_{\vec{q}} + \frac{n}{2} (J_{\vec{k}+\vec{q}} + J_{\vec{k}-\vec{q}}) + 4 \left( 1 - \frac{n}{2} \right) \frac{t_{\vec{k}} t_{\vec{q}}}{U} - n \left( \frac{t_{\vec{q}}^2}{U} - \frac{J_0}{2} \right) \right\} \left( \frac{\Delta_{\vec{q}}}{2E_{\vec{q}}} \right) \text{th} \left( \frac{E_{\vec{q}}}{2T} \right). \quad (7)$$

Для  $d$ -типа симметрии ПП, отличие уравнения (7) от соответствующего уравнения для  $t - J$  - модели состоит в перенормировке второго слагаемого в фигурных скобках, по сценарию  $J \rightarrow J [1 - (1 - n/2)] = (n/2) J$ , а также в появлении дополнительных слагаемых, которые легко определить по явной зависимости от  $U$ . Используя решение уравнения (7) с  $d$  типом симметрии ПП:  $\Delta_{\vec{k}} = \Delta_0 (\cos k_x - \cos k_y)$  выводится уравнение для определения крити-

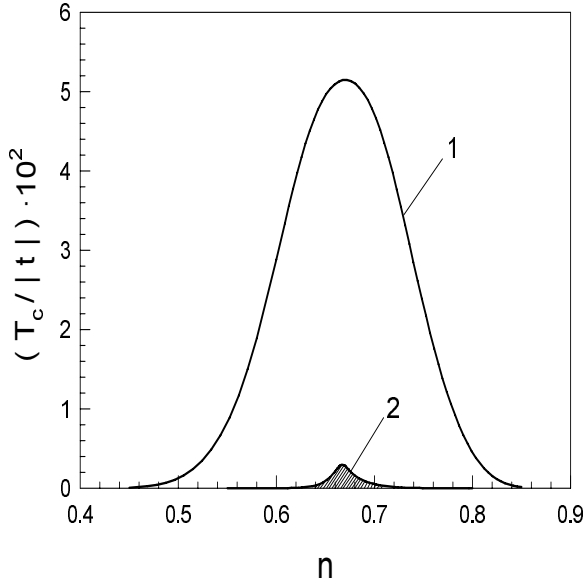


Рис. 7: Области сверхпроводящего состояния в  $t - J$ -и  $t - J^*$ -моделях.

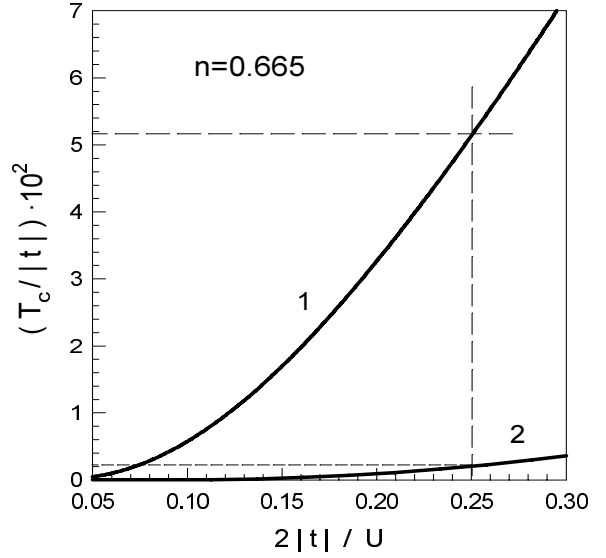


Рис. 8: Влияние  $\mathcal{H}_{(3)}$  на зависимость  $T_c$  от параметра  $2|t|/U$ .

ческой температуры  $T_c$ :

$$1 = \frac{nJ}{2N} \sum_{\vec{q}} \frac{(\cos q_x - \cos q_y)^2}{\tilde{\varepsilon}_{\vec{q}} - \mu} \text{th} \left( \frac{\tilde{\varepsilon}_{\vec{q}} - \mu}{2T_c} \right). \quad (8)$$

Результаты численного решения уравнения (8) при различных  $n$  для  $t - J^*$ -модели приводятся на рисунке 7 (кривая 2). Для сравнения, там же, показана зависимость  $T_c$  от  $n$ , полученная без учета  $\mathcal{H}_{(3)}$  (кривая 1). Численные расчеты проводились в предположении, что:  $2|t|/U = 0.25$ . Видно, что включение  $\mathcal{H}_{(3)}$  приводит к существенному уменьшению температуры перехода в сверхпроводящее состояние (заштрихованная область). Показывается, что уменьшение критической температуры за счет  $\mathcal{H}_{(3)}$ , обусловлено главным образом перенормировкой константы связи. Вторым фактором, проявляющийся посредством дополнительной перенормировки электронного энергетического спектра, не существенен. На рисунке 8 демонстрируется зависимость  $T_c$  от отношения  $2|t|/U$ , полученные без учета трехцентровых взаимодействий (кривая 1) и при их учете (кривая 2). Значение концентрации электронов соответствует оптимальному допированию ( $n = 0.665$ ). Видно, что при  $2|t|/U = 0.25$  (пунктирные линии)  $T_c$ , полученная при учете влияния  $\mathcal{H}_{(3)}$ , в 25 раз меньше  $T_c$ , вычисленной без учета отмеченных взаимодействий.

Известно, что для достижения адекватного описания дисперсионных за-

висимостей наблюдаемых в ARPES– экспериментах необходимо учитывать перескоки носителей тока, как минимум, во вторую и третью координационные сферы. Важным следствием учета дальних перескоков, в рамках эффективного гамильтониана модели Хаббарда  $\hat{\mathcal{H}}_{t-J^*}$ , является индуцирование обменных взаимодействий между узлами решетки следующими за ближайшими соседями. В данной Главе диссертации впервые исследуется влияние взаимодействий из 2-ой ( $J_2$ ) и 3-ей ( $J_3$ ) координационной сферы как на функциональный вид ПП, так и на условия реализации сверхпроводящего состояния. Рассматриваются по отдельности решения уравнения (7) с  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -типом симметрии ПП.

Так, для  $d$ -типа симметрии ПП включение дальних перескоков ( $t_2, t_3 \neq 0$ ) приводит к тому, что решение уравнения (7) может быть представлено только в двухпараметрическом виде:

$$\Delta_{\vec{k}} = \Delta_1 \varphi_1(\vec{k}) + \Delta_2 \varphi_2(\vec{k}), \quad \varphi_l(\vec{k}) = (\cos(lk_x) - \cos(lk_y)), \quad l = 1, 2, \quad (9)$$

при этом амплитуды  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  должны являться решением двух уравнений:  $\Delta_i = \lambda_i \sum_{j=1}^{j=2} \Phi_{ij} \Delta_j$ , где  $\Phi_{nm} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\varphi_n(\vec{q}) \varphi_m(\vec{q})}{2E_{\vec{q}}} \text{th} \left( \frac{E_{\vec{q}}}{2T} \right)$ ,  $\lambda_1 = nt_1^2/U$ ,  $\lambda_2 = nt_3^2/U$ . Видно, что при  $t_3 \neq 0$  всегда  $\Delta_1 \neq 0$ . Условие совместности этой системы приводит к уравнению на  $T_c$ :

$$(1 - \lambda_1 \Phi_{11})(1 - \lambda_2 \Phi_{22}) = \lambda_1 \lambda_2 \Phi_{12}^2. \quad (10)$$

Приводятся результаты численного анализа по влиянию дальних перескоков на характеристики SC-состояния для  $d$ -типа симметрии  $\Delta_{\vec{k}}$ . Кривые 1

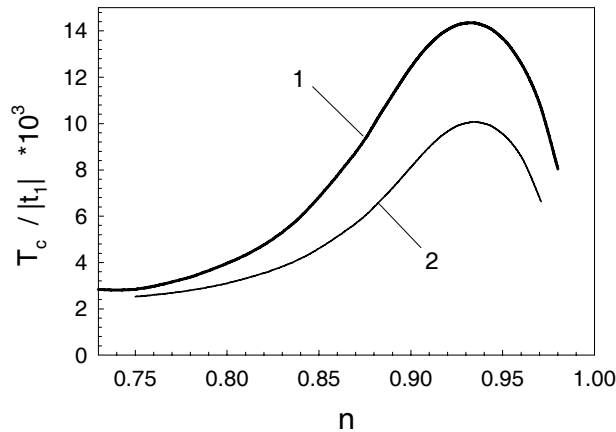


Рис. 9: Концентрационная зависимость  $T_c(n)$ :  $t_2/t_1 = 0.4$ ,  $t_3/t_1 = 0.3$ ,  $|t_1|/U = 0.2$ .

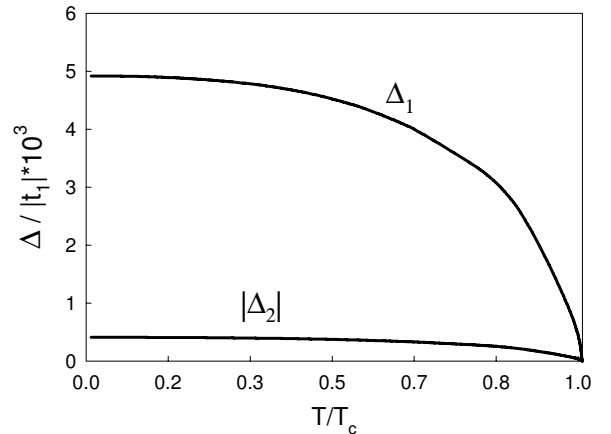


Рис. 10: Температурная зависимость амплитуд  $\Delta_1$  и  $|\Delta_2|$  при  $n = 0.84$ .



и 2 рисунка 9 демонстрируют влияние модификации уравнения (10) за счет дальних обменных взаимодействий на значение критической температуры. Первая кривая построена на основе решения полного уравнения (10), тогда как вторая кривая получена в предположении, что  $\lambda_2 = 0$ . В сверхпроводящей фазе ( $T < T_c$ ) амплитуды  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  отличны от нуля и изменяются синхронно при изменении температуры (рисунок 10).

Далее в Главе 3 исследуется одновременное влияние магнитных корреляций и трехцентровых взаимодействий на ренормировки спектра фермиевских квазичастиц и на условия реализации  $d$ -сверхпроводимости. Актуальность этих исследований обусловлена тем, что условия реализации ВТСП с  $d$ -симметрией ПП в существенной степени определяются особенностями энергетического спектра фермиевских квазичастиц. Изменением соотношений интегралов перескока  $t_1$ ,  $t_2$  и  $t_3$ , можно влиять на положение особенностей ван-Хова и, таким образом, смещать точку максимума зависимости  $T_c(n)$ . В этой связи отмечается важная роль  $\hat{\mathcal{H}}_{(3)}$ , которая проявляется в индуцировании дальних перескоков. Так, например, если в исходной модели Хаббарда учитываются перескоки только между ближайшими соседями, то в результирующем фермиевском спектре трехцентровые взаимодействия генерируют перескоки во 2-ю и 3-ю координационные сферы. Принимая во внимание важность ренормировок эффективных интегралов дальних перескоков, фермиевский спектр  $\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}$  вычисляется теперь с учетом вкладов от спиновых и кинематических корреляционных функций.

Вычисление  $\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}$  проводится в рамках эффективного гамильтониана модели Хаббарда  $\hat{\mathcal{H}}_{t-J^*}$  методом неприводимых функций Грина, построенных на операторах Хаббарда. При учете трехцентровых взаимодействий выписывается первое точное уравнение движения для антикоммутирующей функции Грина  $\langle\langle X_f^{0\sigma} | X_g^{\sigma 0} \rangle\rangle_{\omega}$ . После этого проводится линеаризация уравнения с введением аномальной функции  $\langle\langle X_f^{\bar{\sigma} 0} | X_g^{\sigma 0} \rangle\rangle$ . Далее составляется уравнение движения для  $\langle\langle X_f^{\bar{\sigma} 0} | X_g^{\sigma 0} \rangle\rangle$  и повторяется схема линеаризации. Возникающие при этом средние  $\langle X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\sigma'\sigma'} \rangle$  расписываются по приближенной формуле:  $\langle X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\sigma'\sigma'} \rangle = n^2/4 + \eta(\sigma)\eta(\sigma')\langle S_f^z S_g^z \rangle$ , где  $\eta(\sigma) = +1, -1$ ,  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ . После перехода к квазиимпульсному представлению, получается замкнутая система уравнений для нахождения нормальной и аномальной функции Грина (ФГ). Из решений этой системы определяются выражения для ПП  $\Delta_{\vec{k}}$  в виде (7), а также для спектра  $\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}$  учитывающего ренормировки от кинетических и квазиспиновых корреляторов:  $K_{\vec{q}} = \langle X_{\vec{q}\sigma}^+ X_{\vec{q}\sigma} \rangle$  и  $C_{\vec{q}} = \sum_f e^{-i(\vec{R}_f - \vec{R}_m)\vec{q}} \{ \langle S_f^z S_m^z \rangle + \langle S_f^+ S_m^- \rangle \}$ .

При учете в гамильтониане  $\hat{\mathcal{H}}_{t-J^*}$  перескоков только между ближайшими соседями с интенсивностью  $t$ , эффективный спектр записывается в виде:

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_{tJ^*}(\vec{k}) = & -4|t| \left[ \left(1 - \frac{n}{2}\right) + \frac{(4 - 3n/2)\lambda K_1 + C_1}{(1 - n/2)} \right] \gamma_1(\vec{k}) - \\ & -2|t|\lambda \left[ n \left(1 - \frac{n}{2}\right) - 4C_1 + \frac{nC_2}{(1 - n/2)} \right] \gamma_2(\vec{k}) - \\ & -|t|\lambda \left[ n \left(1 - \frac{n}{2}\right) - 4C_1 + \frac{nC_3}{(1 - n/2)} \right] \gamma_3(\vec{k}), \end{aligned} \quad (11)$$

где  $C_1$ ,  $C_2$  и  $C_3$  - магнитные корреляторы для первой, второй и третьей координационных сфер соответственно [8]. Вводятся инварианты:  $\gamma_1(\vec{k}) = \frac{1}{2}(\cos(k_x) + \cos(k_y))$ ,  $\gamma_2(\vec{k}) = \cos(k_x)\cos(k_y)$ ,  $\gamma_3(\vec{k}) = \frac{1}{2}(\cos(2k_x) + \cos(2k_y))$ .

Для вычисления квазиспинового коррелятора используя идеология квантовой спиновой жидкости [8, 9]. При проведении численных расчетов реша-

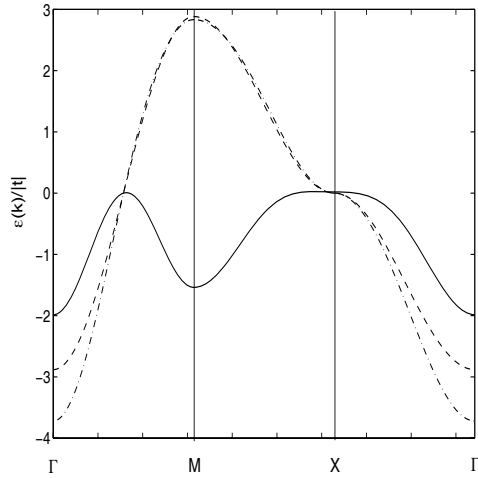


Рис. 11: Спектр фермиевских возбуждений модели Хаббарда для различных аппроксимаций в режиме сильных электронных корреляций.

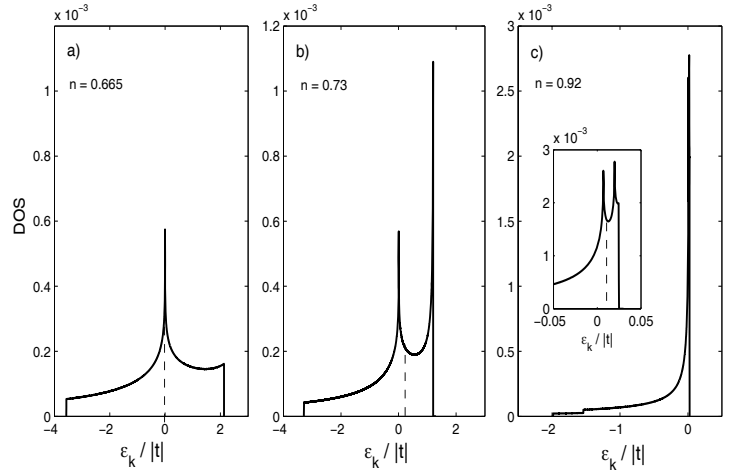


Рис. 12: Эволюция плотности состояний  $t - J^*$ -модели при изменении  $n$ . На вставке рис.12с в мелком масштабе показана структура плотности при  $n = 0.92$ . Вертикальной пунктирной линией показано положение химпотенциала.

лась система из десяти самосогласованных трансцендентных уравнений. Результаты расчетов, выполненные с энергетическим спектром (11) представлены на рисунках 11, 12 и 13. Сплошной кривой на рис. 11 показана квазиимпульсная зависимость энергетического спектра  $\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}$  для  $n = 0.92$ . Для сравнения на этом же рисунке представлены две дисперсионные кривые рассчитанные без учета магнитных корреляторов: для  $t - J^*$  - штрих-пунктирная

кривая и для  $t - J$  – штриховая кривая. Главная особенность, качественно отличающая спектр  $\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}$  от двух других, заключается в наличии минимума в  $M$ -точке зоны Бриллюэна. Этот минимум имеет место только при  $n$  большем некоторого  $n_1$ , значение которого зависит от параметров модели. Для спектра (11) с  $\lambda = 0.25$   $n_1 \approx 0.72$ .

На рисунке 12а показана плотность состояний для  $n = 0.665$ . Поскольку  $n < n_1$ , то имеется лишь одна особенность Ван-Хова, соответствующая седловым  $X$ -точкам зоны Бриллюэна. Она проявляется для всех спектров и при всех  $n$ . С этим фактом связаны максимумы на зависимостях  $T_c(n)$  при  $n \approx 0.66$  (см. рисунок 13). При  $n > n_1$  (рис.12b) в окрестности потолка зоны появляется вторая особенность Ван-Хова. Она формируется при появлении минимума спектральной кривой в  $M$ -точках зоны Бриллюэна как только  $n = n_1$ . Показывается, что именно возникновение локального минимума при  $n \simeq n_1$  и индуцирует новую логарифмическую особенность в плотности состояний. При дальнейшем увеличении  $n$  эта новая особенность Ван-Хова, сохраняясь вплоть до  $n = 1$ . На рис.12с структура плотности состояний соответствует концентрации, при которой значение  $T_c$  максимально (см. сплошную кривую рис.13). Отмечается, что новый пик в плотности состояний в приближении ближайших соседей возникает лишь при **одновременном** учете как спиновых корреляций, так и трехцентровых взаимодействий. Концентрационная зависимость  $T_c(n)$  для  $t - J^*$  модели с учетом магнитных корреляторов демонстрируется сплошной кривой на рисунке 13. Видно, что положение максимумов  $T_c(n)$  в этом случае соответствует обсуждавшемуся ранее положению особенностей ван-Хова плотности состояний.

В **четвертой главе** диссертации изучается влияние процессов спин-флуктуационного рассеяния (СФР) носителей тока на реализацию сверхпроводящей  $s$ -волновой фазы в тяжелофермионных интерметаллидах. Интерес к постановке данной задачи вызван недавними экспериментальными исследованиями тяжелофермионного скуттерудита  $LaFe_4P_{12}$  [10], являющегося сверхпроводником при  $T < T_C = 4.1K$ . В то время как классические ТФ-сверхпроводники характеризуются анизотропным ПП, исследования на  $LaFe_4P_{12}$  показали, что в условиях с развитыми спиновыми флуктуациями в этом соединении формируется сверхпроводимость с  $s$ -типом симметрии ПП.

Изучение роли процессов СФР при формировании сверхпроводящей  $s$ -фазы проводится в рамках кинематического механизма Зайцева на основе ПМА в режиме  $U = \infty$  методом ДТХ. Определяются 4-ре  $s$ -электронные мацубаровские ФГ – нормальные и аномальные, а также 4-ре ФГ для локализо-

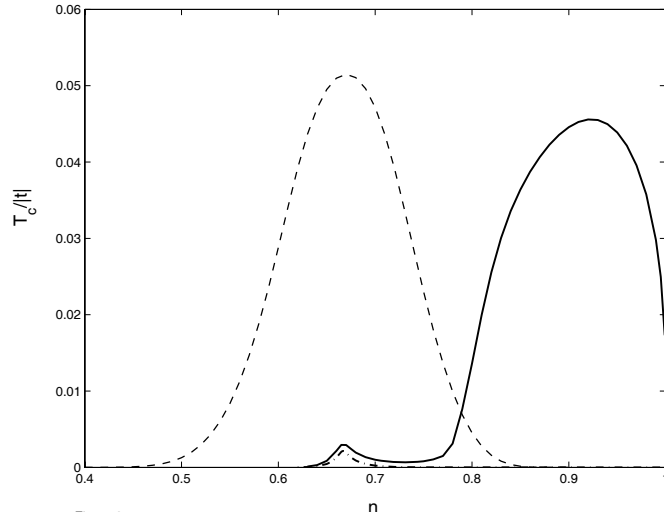


Рис. 13: Концентрационные зависимости критической температуры для различных приближений.

ванных электронов, определенные на операторах Хаббарда. При нахождении этих ФГ по методу ДТХ учитываются особенности, обусловленные наличием силового оператора. На основе диаграммного представления устанавливается связь между  $s$ - и  $f$ -электронными ФГ. Показывается, что поскольку спаривание  $s$ - и  $X$ -операторов проводится независимо, то в режиме  $U = \infty$  задача нахождения ФГ  $f$ -подсистемы периодической модели Андерсона сводится к задаче нахождения фермионных ФГ модели Хаббарда, если считать, что роль интеграла перескока  $t_{\vec{k}}$  играет величина  $\tilde{t}_{\sigma}(k) = |V_{\vec{k}}|^2 G_{\vec{k}\sigma}^{(0)}(i\omega_n)$ , где  $V_{\vec{k}}$ -гибридизация, а  $G^{(0)}$ -  $s$ -электронный пропагатор. Для несверхпроводящей фазы впервые такая эквивалентность была получена в работе [11]. Методом ДТХ определяется точное представление  $f$ -электронных ФГ через нормальные и аномальные компоненты массового ( $\hat{\Sigma}_{\sigma}$ ) и силового ( $\hat{P}_{\sigma}$ ) оператора. Отмечается, что аномальные компоненты силового оператора в теории сверхпроводимости для ПМА вводятся впервые. До этого времени описание SC-фазы тяжелофермионных интерметаллидов осуществлялось только на основе аномальной компоненты массового оператора. Вывод уравнений самосогласования для SC-фазы при учете эффектов СФР проводится в однопетлевом приближении. Оказывается, что в этом приближении компоненты  $\hat{\Sigma}_{\sigma}$  не зависят от импульса  $k$  и частоты  $\omega_n$ . Выражения для компонент  $\hat{P}_{\sigma}$  содержат квазиспиновые ФГ и неприводимые ФГ, учитывающие зарядовые флуктуации. Показывается, что благодаря этой особенности открывается канал влияния магнитных степеней свободы на сверхпроводящие

свойства системы. Используя правила ДТХ, выводится замкнутая система интегральных уравнений относительно аномальных компонент массового и силового операторов. Квазиспиновая ФГ вычисляется в однопетлевом приближении. Показывается, что для динамической магнитной восприимчивости  $f$ -электронов  $\chi(k, i\omega_m)$  можно воспользоваться часто применяемым приближением:  $\chi(k, i\omega_m) \Rightarrow \bar{\chi}(i\omega_m) = \frac{1}{N} \sum_k \chi(k, i\omega_m)$ , при котором  $P$  становится функцией только мацубаровской частоты.

Вводится аномальная функция  $\rho(i\omega_n)$ , определяемая как отношение аномальных компонент массового и силового оператора, и находится система уравнений для одновременного нахождения  $\rho(i\omega_n)$  и критической температуры:

$$\rho(i\omega_n) = -T \sum_{\omega_m} \bar{\chi}(i\omega_{n-m}) \Phi(i\omega_m), \quad 1 = -2T \sum_{\omega_m} \Phi(i\omega_m), \quad (12)$$

где

$$\Phi(i\omega_m) = \frac{1}{N} \sum_q \frac{|V_q|^2 (i\omega_m + \xi_q) + \rho(i\omega_m) |V_q|^4}{|(i\omega_m - \xi_q)(i\omega_m - \tilde{\varepsilon}_f) - P_{0\sigma,0\sigma}(i\omega_m) |V_q|^2|^2}.$$

Результаты самосогласованных численных расчетов полученных уравнений, приводятся на рисунке 14. При расчетах спектр зонных электронов за-

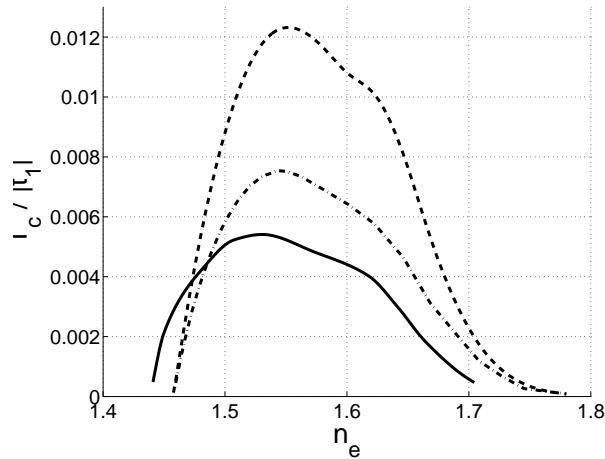


Рис. 14: Концентрационные зависимости температуры перехода в сверхпроводящее состояние с  $s$ -симметрией параметра порядка

писывался в приближении сильной связи:  $\varepsilon_k = 2t_1(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)$ . Ширина зоны  $W = 12|t_1|$  ( $t_1 < 0$ ),  $V/|t_1| = 1.2$ . Локализованный уровень:  $E_0/|t_1| = -2$ . Сплошной линией представлены результаты самосогла-

сованных расчетов, учитывающих динамический характер спиновых флуктуаций. Особенность этой зависимости заключается в том, что область куперовской неустойчивости реализуется только при тех концентрациях электронов  $n_e \geq n_{cr}$ , когда химпотенциал находится в верхней. Для сравнения проводятся концентрационные зависимости  $T_c$ , рассчитанными в более простых приближениях: а) в приближении, не учитывающем динамику спиновых флуктуаций – статическое приближение (штрих-пунктирная линия) при котором  $\bar{\chi}(\omega_n) = \chi\delta_{0n}$ ; б) в приближении среднего поля (штриховая линия) когда  $\bar{\chi}(\omega_n) \equiv 0$ . Из сравнения пунктирной и штрих-пунктирной линий видно, что включение процессов рассеяния даже в статическом приближении приводит к существенному уменьшению значений критической температуры по сравнению со значениями этой величины, найденными в среднеполевом приближении. Учет динамики процессов СФР приводит не только к дальнейшему понижению  $T_c$ , но и к смещению границы SC-фазы.

Далее в 4-ой главе в рамках ПМА при учете спин-флуктуационных вкладов методом ДТХ вычисляется амплитуда рассеяния  $f$ -электронов в куперовском канале. Решение задачи о куперовской неустойчивости сводится к определению условий, при которых в амплитуде рассеяния  $f$ -электронов с противоположными проекциями спиновых моментов появляется полюс. При этом снова используется отмечавшаяся выше эквивалентность модели Хаббарда и периодической модели Андерсона при введении эффективного интеграла перескока  $\tilde{t}_\sigma(k)$ . В графической форме уравнение для этой амплитуды записывается в виде:

$$\begin{array}{c} \begin{array}{c} \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \end{array} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \end{array} , \quad (13)$$

где темным квадратам соответствует искомая амплитуда  $\Gamma$ . Затравочная амплитуда  $\Gamma^{(0)}$  изображена посредством светлого квадрата. Линия со светлой (темной) стрелкой обозначает ФГ  $f$ -электрона  $G_\sigma(k)$  с проекцией спинового момента  $\sigma = +1/2$  ( $-1/2$ ). Затравочная амплитуда определяется графиками:

$$\begin{array}{c} \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \\ \text{---}k \text{---} \end{array} . \quad (14)$$

Здесь первые два графика ответственны за кинематический механизм сверхпроводимости, предложенный Зайцевым, а последние два графика описывают процессы СФР, впервые также изученные Зайцевым в модели Хаббарда.

Далее вычисляется амплитуда  $\Gamma$  и после определения ее полюса, находится уравнение на температуру перехода в SC-фазу с  $s$ -типом симметрии ПП:

$$1 + T \sum_{\omega} \frac{\Phi_1(\omega)}{1 + \alpha \Phi_2(\omega)} = 0, \quad \Phi_1(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} 2\xi_{\vec{q}} l(q), \quad \Phi_2(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} |V_{\vec{q}}|^2 l(q),$$

$$l(q) = |V_{\vec{q}}|^2 |(i\omega - \xi_{\vec{q}})(i\omega - E_0 - \Sigma - \mu) - P(\omega)|V_{\vec{q}}|^2|^{-2}.$$

Здесь  $\alpha = 3\chi T - C_n/4$ ,  $\chi$  - статическая магнитная восприимчивость  $f$ -подсистемы,  $C_n = \langle \Delta \hat{n}_f \Delta \hat{n}_f \rangle$  - коррелятор плотность-плотность. Показывается, что именно это уравнение получается из системы (12) в статическом приближении. Таким образом устанавливается, что включение аномальных компонент силового оператора в SC-фазе соответствует учету спин-флуктуационных вкладов в амплитуду рассеяния.

При построении фазовой диаграммы периодической модели Андерсона (рис. 15) осуществляется самосогласованное нахождение  $G(k)_\sigma$ . Компоненты массового и силового операторов вычислялись в однопетлевом приближении в рамках ДТХ. Затравочная электронная зона описывается полуэллиптической плотностью состояний. Значение  $\chi$  принимается равной восприимчивости ТФ соединений. На рисунке 15 показана область существования ферро-

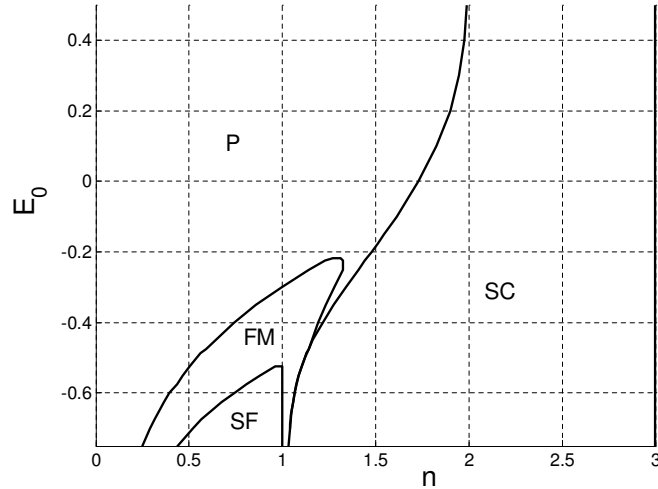


Рис. 15: Фазовая диаграмма периодической модели Андерсона.  $V = 0.125W$

магнитного упорядочения (FM), установленная в работе [12]. Посредством SF обозначена область насыщенного ферромагнитного состояния, а через P - парамагнитная фаза. Граница области SC-фазы для периодической модели Андерсона в данной диссертации рассчитывается впервые. Показывается,

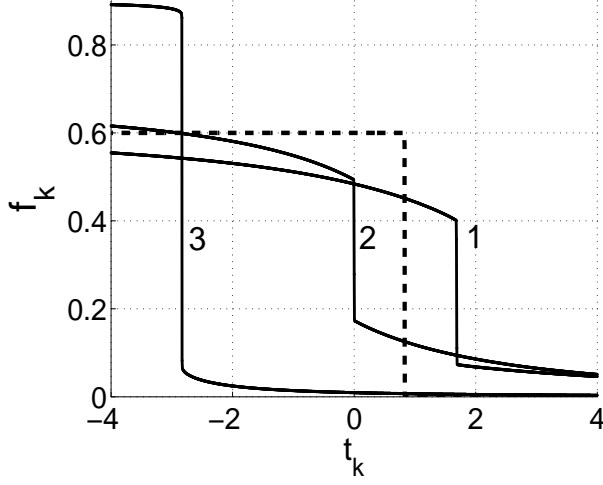


Рис. 16: Функция распределения хаббардовских квазичастиц при различных значениях концентрации: 1)  $n = 0.8$ ,  $\tilde{\mu} = 0.626$ ; 2)  $n = 0.667$ ,  $\tilde{\mu} = 5.2 \cdot 10^{-4}$ ; 3)  $n = 0.2$ ,  $\tilde{\mu} = -2.51$ . Пунктирной линией показана  $f_{\vec{k}}$ , вычисленная в приближении Хаббард-I для  $n = 0.8$ .  $T = 5 K$

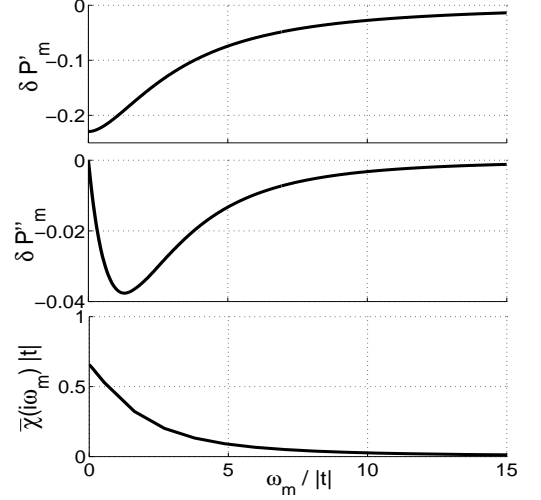


Рис. 17: Зависимость реальной и мнимой частей силового оператора и динамической восприимчивости от мацубаровской частоты при  $n = 0.8$

что область SC-фазы примыкает к границе FM- фазы, но не пересекается с ней. Отмечается, что факт непересечения является важным в контексте конкуренции магнитных и сверхпроводящих фаз и укладывается в общую концепцию об антогонизме сверхпроводимости и магнетизма.

В заключении четвертой Главы рассматривается модификация функции распределения хаббардовских квазичастиц при учете процессов СФР. Изучение этого вопроса проводится в рамках модели Хаббарда при  $U = \infty$ . Учитывая точное представление электронной ФГ через массовый и силовой операторы записывается выражение для функции распределения хаббардовских квазичастиц ( $\delta \rightarrow +0$ ):

$$f_{\vec{k},\sigma} = T \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n \delta} \frac{1 - N_{\bar{\sigma}} + \delta P_{0\sigma,0\sigma}(k)}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_{\vec{k},\sigma} + \mu - \delta P_{0\sigma,0\sigma}(k)t_{\vec{k}} - \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(k)}, \quad (15)$$

где  $\tilde{\varepsilon}_{\vec{k},\sigma} = \varepsilon_{\sigma} - (1 - N_{\bar{\sigma}})t_{\vec{k}}$ . Для нахождения однопетлевых поправок для  $\delta P_{0\sigma,0\sigma}(k)$  вычисляются бозевские ФГ  $D_{\bar{\sigma}\sigma,\bar{\sigma}\sigma}(k)$ , описывающую спиновые флуктуации. Эти бозевские ФГ рассчитываются также в однопетлевом приближении. На рисунке 16 представлены результаты численных расчетов. Используется приближение ближайших соседей:  $t_{\vec{k}} = -2|t|(\cos k_x + \cos k_y)$ . Все энергии указаны в единицах  $|t|$ . Видно, что: 1) включение динамиче-



ских процессов СФР приводит к конечной вероятности заполнения состояний выше импульса Ферми  $k_F$ ; 2) в области энергий, меньших  $\tilde{\mu}$  возникает сильная, зависящая от отклонения энергии квазичастиц от  $\tilde{\mu}$  ренормировка функции распределения; 3) положение скачка функции распределения, за счет однопетлевых поправок в массовый оператор, значительно изменяется. На рисунке 17 показаны частотные зависимости силового оператора  $\delta P_{0\sigma,0\sigma}(i\omega_m) = \delta P'_m + i\delta P''_m$  и динамической восприимчивости. Видно, что на масштабе ширины зоны  $W \approx 4|t|$  ренормировки силового оператора за счет учета однопетлевых поправок весьма существенны и, именно с ними связана сильная модификация функции  $f_{\vec{k}}$ .

**Пятая Глава** посвящена решению двух проблем: 1) получению эффективного низкоэнергетического гамильтониана периодической модели Андерсона в режиме смешанной валентности и 2) вычислению динамической магнитной восприимчивости ДМВ периодической модели Андерсона в обобщенном приближении хаотических фаз. Актуальность первой задачи обусловлена интенсивным применением расширенной, обменными энергиями, периодической модели Андерсона, для описания магнитного состояния тяжелофермионных интерметаллидов. Появление операторов обменной и  $s - f$ -обменной энергий принято обосновывать преобразованием Шриффера-Вольфа [13]. При этом, однако, забывается, что отмеченное преобразование не применимо в режиме смешанной валентности, поскольку обменные интегралы в этом случае расходятся [14].

Ключевой момент предлагаемого в диссертации метода построения эффективного гамильтониана ПМА заключается в разбиении оператора гибридационного взаимодействия в атомном представлении на два слагаемых. Первое слагаемое  $\hat{V}_{01}$  отражает процессы, приводящие к смешиванию  $s$ - и  $f$ -электронов без изменения числа двоечных состояний в локализованной подсистеме (низкоэнергетический сектор гильбертова пространства). Второе слагаемое  $\hat{V}_{12}$  описывает гибридационные процессы с изменением числа двоек (переходы в высокоэнергетический сектор гильбертова пространства). Далее проводится двухэтапное унитарное преобразование суть которого состоит в исключении только тех процессов гибридации которые идут с участием двоек:  $\hat{V}_{12}$ . При этом процессы описываемые  $\hat{V}_{01}$  остаются. Поскольку энергия одноузельного кулоновского отталкивания  $U$  в режиме СЭК много больше ширины зоны проводимости, то возникающие при этом константы эффективных взаимодействий не проявляют сингулярного поведения даже в условия смешанной валентности. На первом этапе оператор унитарного пре-

образования  $\hat{S}$  подбирается из требования исключения высокоэнергетических процессов  $\hat{V}_{12}$  в первом порядке по параметру  $V$ . Оператор второго унитарного преобразования  $\hat{S}_1$  определяется условием исключения процессов гибридизации  $\hat{V}_{12}$  во втором порядке по  $V$ . Поскольку в этом случае оператор  $S_{12}$  имеет также 2-ой порядок по  $V$  то этого преобразования оказывается достаточно для того, что бы результирующий эффективный низкоэнергетический гамильтониан ПМА  $\hat{\mathcal{H}}_{eff}$  имел четвертый порядок по параметру малости  $V/U$ . Приводится окончательный результат:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{eff} = & \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{f\sigma} (E_0 - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \\
& + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k f \sigma} [V_k e^{-ikf} c_{k\sigma}^+ X_f^{0\sigma} + H.C.] + \frac{1}{N} \sum_{q p f \sigma} A_f(q, p) [c_{q\bar{\sigma}}^+ X_f^{\sigma\bar{\sigma}} - c_{q\sigma}^+ X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}] c_{p\sigma} + \\
& + \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_{f m k \sigma} [\eta_k t_{fm} e^{-ikf} (c_{k\bar{\sigma}}^+ X_f^{\sigma\bar{\sigma}} - c_{k\sigma}^+ X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) X_m^{0\sigma} + H.C.] + \\
& + \frac{1}{2N^{3/2}} \sum_{k q p f} [\eta_q \Delta_f^*(k, p) e^{-iqf} (X_f^{\downarrow 0} c_{q\uparrow}^+ - X_f^{\uparrow 0} c_{q\downarrow}^+) (c_{k\downarrow} c_{p\uparrow} - c_{k\uparrow} c_{p\downarrow}) + H.C.] + \\
& + \frac{1}{N} \sum_{k q f m \sigma} \left[ \frac{\eta_q}{8} B_k^*(f, m) e^{-iqm} (c_{q\bar{\sigma}}^+ X_m^{\sigma\bar{\sigma}} - c_{q\sigma}^+ X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) (c_{k\bar{\sigma}} X_f^{\bar{\sigma}\sigma} - c_{k\sigma} X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) + H.C. \right] - \\
& - \frac{1}{N^2} \sum_{p k q k_1 f \sigma} \left[ \frac{1}{4} \eta_{k_1} C_f^*(k, q, p) e^{-ik_1 f} c_{p\bar{\sigma}}^+ (c_{k_1\bar{\sigma}}^+ X_f^{\sigma\bar{\sigma}} - c_{k_1\sigma}^+ X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) c_{k\bar{\sigma}} c_{q\sigma} + H.C. \right] + \\
& + \frac{1}{N} \sum_{k p f m} \left\{ \left[ \frac{\Delta_f(k, p)}{\varepsilon_k + \varepsilon_p - U - 2E_0} \right] t_{fm} (c_{k\uparrow}^+ c_{p\downarrow}^+ - c_{k\downarrow}^+ c_{p\uparrow}^+) \times \right. \\
& \quad \left. \times (X_f^{0\downarrow} X_m^{0\uparrow} - X_f^{0\uparrow} X_m^{0\downarrow}) + H.C. \right\} + \\
& + \frac{1}{N^2} \sum_{k p f k_1 p_1} \left[ \frac{\Delta_f(k, p) \Delta_f^*(k_1, p_1)}{\varepsilon_k + \varepsilon_p - U - 2E_0} \right] X_f^{00} (c_{k\uparrow}^+ c_{p\downarrow}^+ - c_{k\downarrow}^+ c_{p\uparrow}^+) (c_{p_1\downarrow} c_{k_1\uparrow} - c_{p_1\uparrow} c_{k_1\downarrow}) + \\
& + \sum_{f m} J_{fm} \left( \vec{S}_f \vec{S}_m - \frac{1}{4} \hat{N}_f \hat{N}_m \right) + \sum_{\substack{f m g \sigma \\ (f \neq g)}} \left( \frac{t_{fm} t_{mg}}{U} \right) (X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma} \sigma} X_g^{0 \bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}} X_g^{0 \sigma}),
\end{aligned}$$

где:  $A_f(q, p) = \frac{1}{2} e^{-if(q-p)} [\eta_q V_p^* + \eta_p^* V_q]$ ,  $t_{fm} = \frac{1}{N} \sum_q \eta_q V_q^* e^{iq(f-m)}$ ,  $\Delta_f(k, p) = \eta_k V_p e^{-if(k+p)}$ ,  $\eta_k = V_k (U + E_0 - \varepsilon_k)$ ,  $J_{fm} = 2(t_{fm} t_{mf})/U$ ,  $B_k(f, m) =$

$$\eta_k 2t_{fm} e^{-ikf} + \frac{2}{N} \sum_p \eta_p A_f(k, p) e^{-ipm}, \quad C_f(k, q, p) = \eta_k A_f(q, p) e^{-ikf} + \eta_q A_f(k, p) e^{-iqf}. \text{ Остальные обозначения стандартные.}$$

Отмечается, что в этом гамильтониане первые две строчки содержат операторы описывающие ПМА при  $U = \infty$  и  $s - f$ -обменные взаимодействия. Два последних слагаемых описывают обменную связь в локализованной подсистеме, а также трехцентровые взаимодействия. Происхождение этих слагаемых аналогично тому, как они появляются при выводе  $t - J^*$  - модели из модели Хаббарда. Обменное взаимодействие  $\sim J_{fm}$ , как и в теории ВТСП, имеет важное значение для описания конкуренции между магнитной фазой и сверхпроводящей. Кроме того, в полученном эффективном гамильтониане имеются операторы, описывающие динамику синглетных пар (при конкретных значениях импульса превращающихся в куперовские пары), как в локализованной, так и в коллективизированной подсистемах. Это означает, что с хорошей степенью точности исследование сверхпроводящей фазы, а также конкуренции между магнитной и сверхпроводящей фазами можно проводить в рамках простейшего приближения среднего поля.

Рассматривается вопрос, касающийся величин обменных взаимодействий в рамках полученных представлений. Кроме сверхобменного взаимодействия с параметром  $J_{fm}$  обменная связь формируется еще одним слагаемым четвертого порядка. Его интенсивность зависит от  $B_k^*$ . После усреднения по состояниям  $s$ -подсистемы получается выражение, описывающее косвенное обменное взаимодействие в  $f$ -подсистеме с интенсивностью:  $I_{fm} = \frac{1}{4N} \sum_k \eta_k B_k^*(f, m) e^{-ikm} n_k$ . На основе численных расчетов показано, что значения  $J_{fm}$  и  $I_{fm}$  для ближайших и следующих за ближайшими соседями отличаются на незначительную величину порядка 30 %. Поскольку оба значения положительны, а значит существенны эффекты фрустрированных взаимодействий, то следует ожидать подавления тенденции к магнитоупорядоченной фазе и формирования основного состояния системы локализованных спиновых моментов по типу сценария спиновой жидкости.

Актуальность второй задачи (вычисление ДМВ), определяется в частности вскрытым в четвертой главе механизмом сильного влияния процессов СФР на свойства (как нормальные так и сверхпроводящие) систем с СЭК. Полная поперечная мацубаровская динамическая магнитная восприимчивость периодической модели Андерсона в режиме СЭК определяется выражением:  $\chi_{\perp}(\tau - \tau') = \langle T_{\tau} \tilde{M}_f^+(\tau) \tilde{M}_f^-(\tau') \rangle$ , где  $M_f^+ = g\mu_B X_f^{\uparrow\downarrow} + 2\mu_B \sigma_f^+$ ,  $M_f^- = g\mu_B X_f^{\downarrow\uparrow} + 2\mu_B \sigma_f^-$ , а  $\sigma_f^{\pm}$  - оператор переворота спина электрона проводимости.

Поэтому для вычисления  $\chi_{\perp}$ , следует найти четыре ФГ: 1) спиновую функцию Грина локализованных электронов  $D_{dd}^{+-}(x-x') = -\langle T_{\tau} \tilde{X}^{\uparrow\downarrow}(x) \tilde{X}^{\downarrow\uparrow}(x') \rangle$ , которая в главе 4 рассматривалась в однопетлевом приближении; 2) спиновую ФГ коллективизированных электронов  $D_{cc}^{+-}(x-x') = -\langle T_{\tau} \tilde{\sigma}^{+}(x) \tilde{\sigma}^{-}(x') \rangle$ ; и 3,4) две смешанные ФГ  $D_{dc}^{+-}(x-x') = -\langle T_{\tau} \tilde{X}^{\uparrow\downarrow}(x) \tilde{\sigma}^{-}(x') \rangle$  и  $D_{cd}^{+-}(x-x') = -\langle T_{\tau} \tilde{\sigma}^{+}(x) \tilde{X}^{\downarrow\uparrow}(x') \rangle$ .

Предлагается метод вычисления динамической магнитной восприимчивости ПМА в обобщенном приближении хаотических фаз (ОПХФ). Идея метода основана на, уже обсуждавшейся выше эквивалентности в режиме  $U = \infty$  модели Хаббарда и ПМА, а также на том, что для модели Хаббарда при  $U = \infty$  разработана методика вычисления ДМВ методом ДТХ [15, 16]. В этих работах суммирование рядов для спиновых ФГ проводилось в ОПХФ, что на диаграммном языке соответствует учету всех кольцевых диаграмм.

Отмечается, что поскольку диаграммные ряды для  $f$ -электронных ФГ ПМА эквивалентны рядам для ФГ модели Хаббарда, то вычисление  $D_{dd}^{+-}$  можно провести непосредственно следуя алгоритму, предложенному в [15, 16]. При этом необходимо иметь в виду, что конкретные аналитические выражения сопоставляемые диаграммам теперь совершенно другие. Так, например, диаграммный ряд для  $D_{dd}^{+-}$  может быть представлен в следующем виде:

$$D_{dd}^{+-} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \text{diagram 7} + \text{diagram 8} + \text{diagram 9} + \text{diagram 10} + \text{diagram 11} + \text{diagram 12} + \text{diagram 13} + \text{diagram 14} + \text{diagram 15} + \text{diagram 16} + \text{diagram 17} + \text{diagram 18} + \text{diagram 19} + \text{diagram 20} + \text{diagram 21} + \text{diagram 22} + \text{diagram 23} + \text{diagram 24} + \text{diagram 25} + \text{diagram 26} + \text{diagram 27} + \text{diagram 28} + \text{diagram 29} + \text{diagram 30} + \text{diagram 31} + \text{diagram 32} + \text{diagram 33} + \text{diagram 34} + \text{diagram 35} + \text{diagram 36} + \text{diagram 37} + \text{diagram 38} + \text{diagram 39} + \text{diagram 40} + \text{diagram 41} + \text{diagram 42} + \text{diagram 43} + \text{diagram 44} + \text{diagram 45} + \text{diagram 46} + \text{diagram 47} + \text{diagram 48} + \text{diagram 49} + \text{diagram 50} + \text{diagram 51} + \text{diagram 52} + \text{diagram 53} + \text{diagram 54} + \text{diagram 55} + \text{diagram 56} + \text{diagram 57} + \text{diagram 58} + \text{diagram 59} + \text{diagram 60} + \text{diagram 61} + \text{diagram 62} + \text{diagram 63} + \text{diagram 64} + \text{diagram 65} + \text{diagram 66} + \text{diagram 67} + \text{diagram 68} + \text{diagram 69} + \text{diagram 70} + \text{diagram 71} + \text{diagram 72} + \text{diagram 73} + \text{diagram 74} + \text{diagram 75} + \text{diagram 76} + \text{diagram 77} + \text{diagram 78} + \text{diagram 79} + \text{diagram 80} + \text{diagram 81} + \text{diagram 82} + \text{diagram 83} + \text{diagram 84} + \text{diagram 85} + \text{diagram 86} + \text{diagram 87} + \text{diagram 88} + \text{diagram 89} + \text{diagram 90} + \text{diagram 91} + \text{diagram 92} + \text{diagram 93} + \text{diagram 94} + \text{diagram 95} + \text{diagram 96} + \text{diagram 97} + \text{diagram 98} + \text{diagram 99} + \text{diagram 100} + \dots \quad (16)$$

Ряды для трех- и четырех- полюсников записываются также ОПХФ:

$$\begin{aligned} \text{diagram 1} &= \text{diagram 2} + \text{diagram 3}, & \text{diagram 4} &= \text{diagram 5} + \text{diagram 6}, \\ \text{diagram 7} &= \text{diagram 8} + \text{diagram 9} + \text{diagram 10} + \text{diagram 11} + \text{diagram 12} + \text{diagram 13} + \text{diagram 14} + \text{diagram 15} + \text{diagram 16} + \text{diagram 17} + \text{diagram 18} + \text{diagram 19} + \text{diagram 20} + \text{diagram 21} + \text{diagram 22} + \text{diagram 23} + \text{diagram 24} + \text{diagram 25} + \text{diagram 26} + \text{diagram 27} + \text{diagram 28} + \text{diagram 29} + \text{diagram 30} + \text{diagram 31} + \text{diagram 32} + \text{diagram 33} + \text{diagram 34} + \text{diagram 35} + \text{diagram 36} + \text{diagram 37} + \text{diagram 38} + \text{diagram 39} + \text{diagram 40} + \text{diagram 41} + \text{diagram 42} + \text{diagram 43} + \text{diagram 44} + \text{diagram 45} + \text{diagram 46} + \text{diagram 47} + \text{diagram 48} + \text{diagram 49} + \text{diagram 50} + \text{diagram 51} + \text{diagram 52} + \text{diagram 53} + \text{diagram 54} + \text{diagram 55} + \text{diagram 56} + \text{diagram 57} + \text{diagram 58} + \text{diagram 59} + \text{diagram 60} + \text{diagram 61} + \text{diagram 62} + \text{diagram 63} + \text{diagram 64} + \text{diagram 65} + \text{diagram 66} + \text{diagram 67} + \text{diagram 68} + \text{diagram 69} + \text{diagram 70} + \text{diagram 71} + \text{diagram 72} + \text{diagram 73} + \text{diagram 74} + \text{diagram 75} + \text{diagram 76} + \text{diagram 77} + \text{diagram 78} + \text{diagram 79} + \text{diagram 80} + \text{diagram 81} + \text{diagram 82} + \text{diagram 83} + \text{diagram 84} + \text{diagram 85} + \text{diagram 86} + \text{diagram 87} + \text{diagram 88} + \text{diagram 89} + \text{diagram 90} + \text{diagram 91} + \text{diagram 92} + \text{diagram 93} + \text{diagram 94} + \text{diagram 95} + \text{diagram 96} + \text{diagram 97} + \text{diagram 98} + \text{diagram 99} + \text{diagram 100} + \dots \end{aligned}$$

В написанных графиках тонкая линия со светлой (темной) стрелкой соответствует электронной ФГ  $G_{\sigma}(k)$  при  $\sigma = +1/2$  ( $-1/2$ ). Волнистой линии со стрелкой сопоставляется эффективное взаимодействие:  $\tilde{t}_{\sigma}(k) = |V_{\vec{k}}|^2 G_{\vec{k}\sigma}^{(0)}(i\omega_n)$ , а не  $t_{\vec{k}}$  как в работах [15, 16]. Пунктирной линии отвечает спиновый пропагатор  $G_{\uparrow\downarrow}$ . Существенно, что аналитические уравнения, соответствующие приведенным графикам для трех- и четырех- полюсников удастся разрешить в явном виде благодаря расщепленному характеру их ядра,

и, таким образом, получить компактное выражение для  $D_{dd}^{+-}$ , удобное для проведения численных расчетов:

$$D_{dd}^{+-}(q) = \left[ \Pi(q) + B_0 \tilde{D}^{(0)}(\omega_m) \right] \cdot \left[ d_{\perp}(q) - \Phi(q) B_0 \tilde{D}^{(0)}(\omega_m) \right]^{-1}. \quad (17)$$

Определение, входящих сюда функций, имеется в тексте диссертации.

Алгоритм вычисления оставшихся трех спиновых ФГ предлагается впервые. Суть его состоит в предварительном проведении спаривания по теореме Вика  $s$ -операторов, входящих определение спиновой ФГ. Тогда, спиновая ФГ, например  $D_{dc}^{+-}(q)$ , оказывается выраженной через высшую функцию  $F_{\Pi}$ :

$$D_{dc}^{+-}(q) = \frac{T}{N} \sum_{k_1} V_{\vec{k}_1} G_{k_1 \uparrow}^{(0)} V_{\vec{k}_1 + \vec{q}}^* G_{k_1 + q, \downarrow}^{(0)} F_{\Pi}(q; k_1 + q, k_1), \quad (18)$$

которая определена только через  $X$ -операторы. Показывается, что для  $F_{\Pi}$  можно составить диаграммный ряд в ОПХФ:

$$F_{\Pi} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} \text{diagram 1} \\ \text{diagram 2} \\ \text{diagram 3} \\ \text{diagram 4} \\ \text{diagram 5} \\ \text{diagram 6} \\ \text{diagram 7} \\ \text{diagram 8} \\ \text{diagram 9} \\ \text{diagram 10} \end{array} \\ + \\ \begin{array}{c} \text{diagram 11} \\ \text{diagram 12} \\ \text{diagram 13} \\ \text{diagram 14} \\ \text{diagram 15} \\ \text{diagram 16} \\ \text{diagram 17} \\ \text{diagram 18} \\ \text{diagram 19} \\ \text{diagram 20} \end{array} \end{array}, \quad (19)$$

содержащий введенные выше трех- и четырех- полюсники и, используя его, получить компактное выражение для  $D_{dc}^{+-}(q)$ :

$$D_{dc}^{+-}(q) = \frac{(\chi_{1,\downarrow}(q) + \chi_{3,\downarrow}(q) F^{0\downarrow}) \left[ \Pi(q) + B_0 \tilde{D}^{(0)}(\omega_m) \right] + \chi_{2,\downarrow}(q) F^{0\downarrow} (1 - Q(q))}{d_{\perp}(q) - \Phi(q) B_0 \tilde{D}^{(0)}(\omega_m)}.$$

Аналогичным образом выражается  $D_{cd}^{+-}(q)$ :

$$D_{cd}^{+-}(q) = \frac{T}{N} \sum_{k_1} V_{\vec{k}_1} G_{k_1 \downarrow}^{(0)} V_{\vec{k}_1 - \vec{q}}^* G_{k_1 - q, \uparrow}^{(0)} F_{\Lambda}(k_1 - q, k_1; q), \quad (20)$$

через функцию  $F_{\Lambda}$  для которой имеется графическое представление:

$$F_{\Lambda} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} \text{diagram 1} \\ \text{diagram 2} \\ \text{diagram 3} \\ \text{diagram 4} \\ \text{diagram 5} \\ \text{diagram 6} \\ \text{diagram 7} \\ \text{diagram 8} \\ \text{diagram 9} \\ \text{diagram 10} \end{array} \\ + \\ \begin{array}{c} \text{diagram 11} \\ \text{diagram 12} \\ \text{diagram 13} \\ \text{diagram 14} \\ \text{diagram 15} \\ \text{diagram 16} \\ \text{diagram 17} \\ \text{diagram 18} \\ \text{diagram 19} \\ \text{diagram 20} \end{array} \end{array}, \quad (21)$$

используя которое находим:  $D_{cd}^{+-}(q) =$

$$= \frac{(\chi_{1,\uparrow}(-q) + \chi_{3,\uparrow}(-q)F^{0\uparrow}) \left[ \Pi(q) + B_0 \tilde{D}^{(0)}(\omega_m) \right] + \chi_{2,\uparrow}(-q)F^{0\uparrow} (1 - \Lambda(q))}{d_{\perp}(q) - \Phi(q)B_0 \tilde{D}^{(0)}(\omega_m)}.$$

По описанному алгоритму вычисляется и спиновая ФГ коллективизированных электронов ПМА:

$$D_{cc}^{+-}(q) = \frac{T}{N} \sum_{k_1} G_{k_1-q,\uparrow}^{(0)} G_{k_1\downarrow}^{(0)} [1 + t_{\downarrow}(k_1)D_{\downarrow}(k_1) + t_{\uparrow}(k_1 - q)D_{\uparrow}(k_1 - q)] +$$

$$+ \left( \frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1, k_2} V_{\vec{k}_1 - \vec{q}}^* G_{k_1-q,\uparrow}^{(0)} V_{\vec{k}_1} G_{k_1\downarrow}^{(0)} V_{\vec{k}_2 + \vec{q}}^* G_{k_2+q,\downarrow}^{(0)} V_{\vec{k}_2} G_{k_2\uparrow}^{(0)} F(k_1 - q, k_1; k_2 + q, k_2).$$

Здесь высшая ФГ  $F$  также определена только на  $X$ -операторах и имеет графическое представление:

Окончательное выражение для спиновой ФГ коллективизированных электронов на периодической модели Андерсона в режиме СЭК получается в виде:

$$D_{cc}^{+-}(q) = \frac{T}{N} \sum_{k_1} G_{k_1-q,\uparrow}^{(0)} G_{k_1\downarrow}^{(0)} [1 + t_{\downarrow}(k_1)D_{\downarrow}(k_1)] \cdot [1 + t_{\uparrow}(k_1 - q)D_{\uparrow}(k_1 - q)] +$$

$$+ \left( \frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1, k_2} V_{\vec{k}_1 - \vec{q}}^* G_{k_1-q,\uparrow}^{(0)} V_{\vec{k}_1} G_{k_1\downarrow}^{(0)} V_{\vec{k}_2 + \vec{q}}^* G_{k_2+q,\downarrow}^{(0)} V_{\vec{k}_2} G_{k_2\uparrow}^{(0)} \frac{G_{\downarrow}(k_1)G_{\uparrow}(k_2)}{d_{\perp}(q) - \Phi(q)B_0 \tilde{D}^{(0)}(\omega_m)} \times$$

$$\times \{ D_{\downarrow}(k_2 + q) (1 - Q(q)) + D_{\uparrow}(k_1 - q) (1 - \Lambda(q)) +$$

$$+ \left[ \Pi(q) + B_0 \tilde{D}^{(0)}(\omega_m) \right] [1 + D_{\uparrow}(k_1 - q)t_{\uparrow}(k_1 - q)] [1 + D_{\downarrow}(k_2 + q)t_{\downarrow}(k_2 + q)] +$$

$$+ D_{\uparrow}(k_1 - q)D_{\downarrow}(k_2 + q) [\Phi(q) + t_{\uparrow}(k_1 - q) (1 - Q(q)) + t_{\downarrow}(k_2 + q) (1 - \Lambda(q))] \},$$

Найденные выражения для спиновых функций Грина  $D_{dd}^{+-}$ ,  $D_{cd}^{+-}$ ,  $D_{dc}^{+-}$  и  $D_{cc}^{+-}$  решают задачу о вычислении полной динамической восприимчивости ПМА в обобщенном приближении хаотических фаз.

В заключительной **шестой Главе** на основе эффективного гамильтониана ПМА в режиме сильных электронных корреляций вычисляется спектр тяжелых фермионов в скошенной внешним магнитным полем антиферромагнитной фазе. На основе полученного спектра проводится изучение влияния магнитного поля на температурную зависимость теплоемкости и константу Зоммерфельда в тяжелофермионных антиферромагнетиках. Актуальность данной задачи обусловлена тем, что большинство систем с тяжелыми фермионами являются антиферромагнетиками с  $T_N$  порядка 10 К. Малая величина температуры Нееля означает, что магнитные поля в которых происходит значительный скос магнитной структуры (вплоть до спин-флип перехода) в настоящее время легко достижимы. Скос векторов намагниченности локализованной подсистемы, влияющий по средством  $s - f$ -обменной связи на магнитный порядок  $s$ -электронов, в условиях гибридизационного смешивания приводит к значительной модификации фермиевского спектра и низкотемпературных свойств системы. Между тем описание энергетического спектра тяжелофермионных антиферромагнитных металлов, в возникающей при наложении внешнего магнитного поля скошенной фазе, в настоящее время отсутствует. Имеется лишь несколько работ, например [17], где спектр фермиевских возбуждений вычисляется в рамках симметричной ПМА (применяемой обычно для описания Кондо-изоляторов, не металлов), и только в строго коллинеарной АФМ фазе (в отсутствие внешнего магнитного поля).

Теоретическое изучение эффектов, связанных с наличием дальнего АФМ порядка, проводится в рамках эффективного гамильтониана периодической модели Андерсона, который кроме обычных для этой модели операторов энергии:  $f$ -,  $s$ -электронов и их гибридизации, учитывает также обменные взаимодействия в подсистеме  $f$ -электронов и  $s - f$ -обменные взаимодействия между спинами коллективизированных и локализованных электронов. Для описания АФМ порядка гамильтониан записывается в двухподрешеточном представлении. Рассмотрение обменных и  $s - f$ -обменных взаимодействий проводится в приближении, игнорирующем релаксационные процессы, когда влияние локализованной подсистемы на коллективизированную описывается в среднеполевом подходе. Отсутствие двоичных состояний в локализованной подсистеме исходного гамильтониана обеспечивается алгеброй операторов Хаббарда. Далее гибридизационные процессы учитываются в рамках

слэив-бозонного представления с последующим использованием усредненно-го констрейна [18]. В результате рассматриваемый гамильтониан приобретает вид квадратичной формы: восьмого порядка: 2-подсистемы, 2-подрешетки и 2-проекции спина. Условно полученный гамильтониан может быть разбит на три оператора:  $\hat{\mathcal{H}}_c$  и  $\hat{\mathcal{H}}_L$  – операторы описывающие коллективизированные и локализованные электроны и  $\hat{\mathcal{H}}_{mix}$  – описывающий их смешивание. Некол-линеарность геометрии задачи, а также наличие обменного и гибридизаци-онного смешивания, приводит к тому, что нахождение спектра сопряжено с решением системы уравнений восьмого порядка.

Существенным упрощением проблемы нахождения фермиевского спектра, явилась возможность сведения задачи о вычислении детерминанта 8-ой сте-пени к задаче о вычислении двух детерминантов 4-ой степени. Причем в дис-сертации это было сделано двумя способами.

1) Первый способ заключался в проведении последовательности пяти уни-тарных преобразований. Первыми двумя преобразованиями операторов  $c$ -подсистемы осуществлялась диагонализация  $\hat{\mathcal{H}}_c$ . Третьим преобразованием, проведенным над операторами  $f$ -подсистемы, диагонализировывался  $\hat{\mathcal{H}}_L$ . При этом  $\hat{\mathcal{H}}_{mix}$  – по прежнему замешивал все восемь независимых операторов. Далее было найдено четвертое преобразование  $f$ -операторов, которое, не на-рушая диагональности  $\hat{\mathcal{H}}_L$ , приводило к тому, что  $\hat{\mathcal{H}}_{mix}$  (а значит и полный гамильтониан) представлялся в виде двух квадратичных форм 4-го порядка. Последнее пятое преобразование 4-го порядка, диагонализующее формы 4-го порядка, проводилось по методу Боголюбова.

2) Второй способ состоял в том, что предварительно осуществлялся пере-ход к локальным осям координат, таким образом, что бы равновесные направ-ления намагниченностей  $f$ -подсистемы ( $R$ ) и  $c$ -подсистем ( $m$ ) были направле-ны вдоль новых осей квантования. При этом для  $f$ - и  $c$ - подсистемы углы вы-бирались разные:  $\theta$  и  $\varphi$  соответственно. На основе полученного таким образом гамильтониана составлялась система уравнений движений для запаздываю-щих ФГ. Для энергетической матрицы  $\hat{M}_k(\varphi, \theta)$  этой системы было найдено унитарное преобразование которое приводило  $\hat{M}_k(\varphi, \theta)$  к блочно диагональ-ному виду:  $\hat{M}_k(\varphi, \theta) = diag \left\{ \hat{M}_{k,+1/2}^{(4)}, \hat{M}_{k,-1/2}^{(4)} \right\}$ , где  $\hat{M}_{k,\sigma}^{(4)}$  – матрицы четвертого порядка. Далее спектр рассчитывался численно по формуле Декарта-Эйлера.

В обоих методах сведение задачи о диагонализации матрицы 8-го порядка, к диагонализации матрицы 4-го порядка привело к значительному упроще-нию как аналитической части (вывод формул для термодинамических сред-



них) так и расчетной.

Результаты самосогласованных расчетов по влиянию температуры и магнитного поля на спектр тяжелых фермионов в АФМ фазе демонстрируются на рис. 18 и 19, где показана только непосредственная окрестность локализованного уровня  $E_0$ . Видно, что наиболее существенная особенность представленного спектра заключается в наличии узкой зоны тяжелых квазичастиц, отделенной как снизу, так и сверху энергетическими щелями. Ширина узкой зоны определяется величиной эффективного среднего поля. Отмечается, что представленная картина спектра принципиально отличается от структуры спектра тяжелых фермионов в парамагнитной фазе, когда энергетический спектр тяжелых квазичастиц только с одной стороны отделен энергетической щелью.

Из сравнения рисунков 18с–18f, с рисунками 18а и 18b, показывается, что по мере увеличения температуры ширина узкой зоны постепенно уменьшается, а химпотенциал, первоначально лежавший внутри этой зоны, опускается ниже ее дна. При температуре порядка  $19\text{ K}$  узкая зона вырождается в уровень, а с дальнейшим увеличением температуры эта зона инвертируется (рисунок 18с). В результате инверсии максимуму дисперсии узкой зоны ( $E_{2k\sigma}$ ) соответствует состояние в центре зоны Бриллюэна. Инверсия узкой зоны сопровождается значительным уменьшением средней намагниченности  $R$ . По мере приближения температуры к  $T_N$  нижняя щель (между зонами с  $\lambda = 1$  и  $\lambda = 2$ ) уменьшается и обращается в нуль (рисунки 18е, 18f), а верхняя (гибридизационная щель парафазы) остается.

На рисунке 19 демонстрируется характер изменений дисперсионных кривых в окрестности  $f$ -уровня при включение магнитного поля  $H$ . Видно, что при включении  $H$  снимается вырождение по квантовому числу  $\sigma$ . Кроме того, для  $\sigma = -1/2$  на первой ( $\lambda = 1$ ) и второй ( $\lambda = 2$ ) ветви спектра выделяются области, которые сближаются при увеличении магнитного поля. То же самое происходит для второй ( $\lambda = 2$ ) и третьей ( $\lambda = 3$ ) ветви при  $\sigma = +1/2$ . По мере увеличения  $H$  отмеченное сближение участков спектра усиливается (рисунок 19b). При  $H = H_c$  (рисунок 19с), происходит касание отмеченных ветвей. В результате получается структура спектра, соответствующая спектру ферромагнитной фазы, когда расщепление по проекции спинового момента  $\sigma$ , индуцируется действием эффективного поля.

Далее в шестой Главе показывается, что в важном для практических приложений случае, когда характерная энергия расщепления много меньше ширины затравочной зоны проводимости выражения для спектра тяжелых фер-

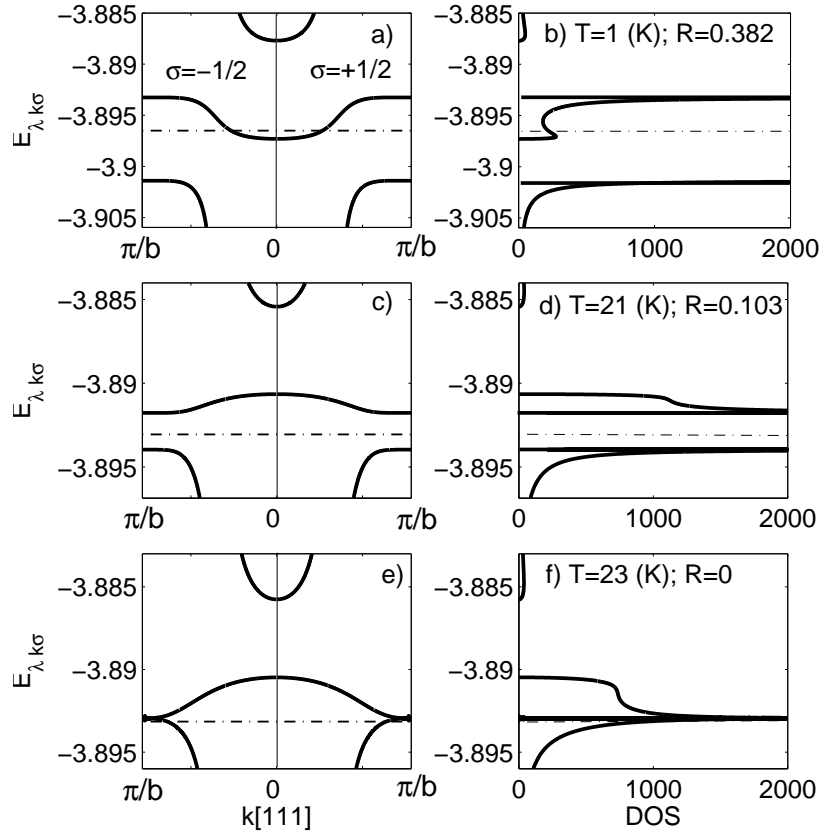


Рис. 18: Температурная эволюция фермиевского спектра а), с), е) и плотности электронных состояний б), д), ф) для ПМА в антиферромагнитной фазе в окрестности локализованного уровня. Штрих-пунктирной линией обозначен химпотенциал. Температура Нееля  $T_N \approx 23$  K

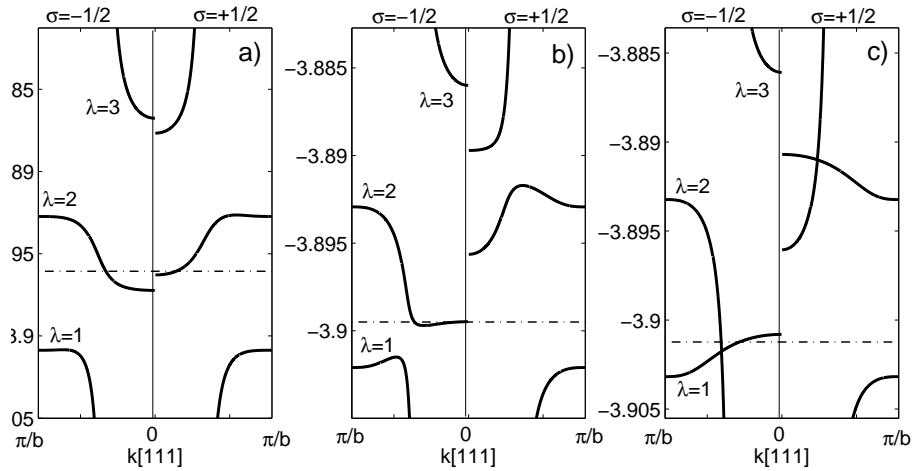


Рис. 19: Спектр квазичастиц ТФ-антиферромагнетика в скошенной фазе в окрестности локализованного уровня при различных значениях магнитного поля: а)  $H/H_c = 0.214$ ,  $R = 0.379$ ; б)  $H/H_c = 0.821$ ,  $R = 0.391$ ; в)  $H/H_c = 1$ ,  $R = 0.393$ ;

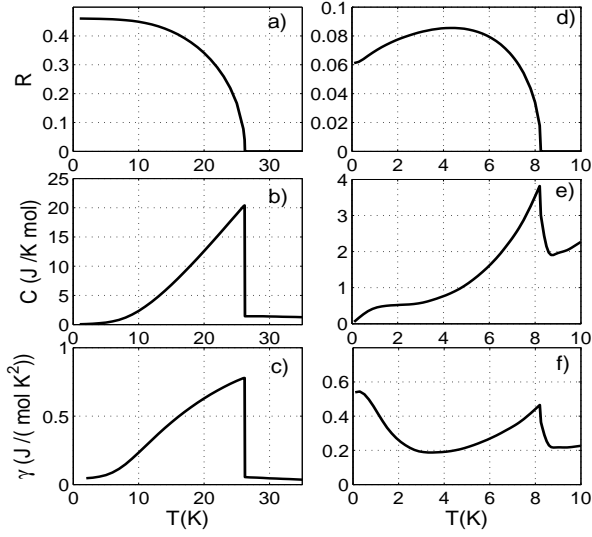


Рис. 20: Температурная зависимость магнитного момента  $R$   $f$ -электронов, теплоемкости  $C$  и константы Зоммерфельда  $\gamma$  при двух значениях концентрации электронов:  $n = 2.4$  (рисунки 20a-20c) и  $n = 2.2$  (рисунки 20d-20f).

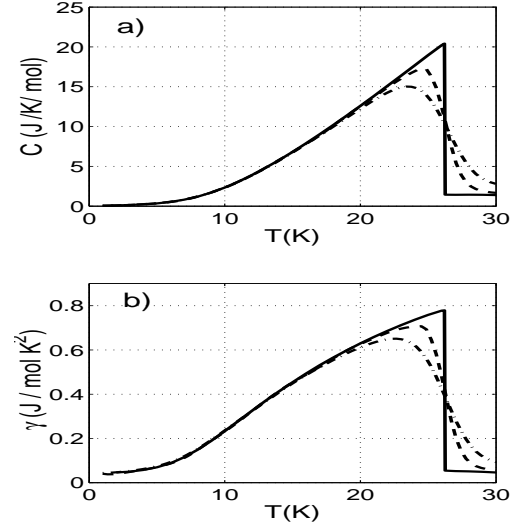


Рис. 21: Температурная зависимость теплоемкости и  $\gamma$  для  $n = 2.4$  при трех значениях магнитного поля:  $H = 0$  (сплошная линия),  $\mu_B H = 5.79 \cdot 10^{-4}$  (пунктирная линия) и  $\mu_B H = 1.16 \cdot 10^{-3}$  (штрих-пунктирная линия).

мионов, описываемых ветвями  $E_{2k\sigma}$ , могут быть получены в аналитическом виде. Полученное аналитическое выражение для спектра  $E_{2k\sigma}$  хорошо аппроксимирует этот спектр в широком интервале температур и магнитных полей. В частности представленные на рисунках 18 и 19 расчетные дисперсионные кривые для узкой зоны хорошо описываются аналитическим выражением.

На рисунке 20 приводятся зависимости намагниченности  $R$ , теплоемкости системы  $C$  и константы Зоммерфельда  $\gamma = C/T$  в нулевом магнитном поле. Эти зависимости получены при разных значениях концентрации электронов и демонстрируют два, характерных для данной систем, АФМ состояния: случай сильного (большое  $R$ ) антиферромагнетизма (рис. 20 a,b,c); и случай слабого (малое  $R$ ) антиферромагнетизма (рис. 20 d,e,f).

Рисунки 20b и 20e демонстрируют резкое изменение теплоемкости системы в окрестности точки перехода из антиферромагнитной в парамагнитную фазу. Величина  $\gamma$  вычисленная из рис. 20c примерно в 50 раз превышает константу Зоммерфельда газа свободных электронов  $\gamma_0$ . Такие квазичастицы считаются тяжелыми, а порядок величины их эффективной массы соответствует, например, массе носителей тока в ТФ скуттерудите  $LaFe_4P_{12}$  [10].

Для случая слабого антиферромагнетизма константа  $\gamma$  превышает  $\gamma_0$  в 500 раз (рис. 20f). Это означает, что эффективная масса тяжелых квазичастиц в указанном режиме достигает примерно 500 масс свободного электрона. Такие значения массы квазичастиц уже характерны для "классических" систем с тяжелыми фермионами.

На рисунке 21 демонстрируются результаты самосогласованных расчетов температурной зависимости теплоемкости и параметра  $\gamma$  для трех значений напряженности магнитного поля ниже точки спин-флип перехода. Видно, что включение магнитного поля, помимо размытия области фазового перехода, приводит к уменьшению значения температуры  $T_{max}$ , соответствующей максимуму теплоемкости на зависимости  $C(T)$ . Это означает уменьшение температуры Нееля поскольку именно  $T_{max}$  экспериментально интерпретируется как температура АФМ перехода. Отмечается, что полученная модификация зависимости  $\gamma(H)$  согласуется с соответствующими экспериментальными зависимостями, полученными на системах:  $PuGa_3$ ,  $Ce_2Au_2Cd$ ,  $YbNiSi_3$ ,  $PuPd_5Al_2$ .

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Суммируя итоги выполненного диссертационного исследования можно выделить следующие основные результаты.

1. На основе интегрального представления гибридационного пропагатора в комплексной плоскости развита теория эффекта де Гааза-ван Альфена в сильно коррелированном ферромагнитном полупроводнике. Показано, что наличие дальнего магнитного порядка подавляет гибридационные эффекты и улучшает условия для реализации осцилляционных явлений, а в условиях пиннинга химпотенциала изменение магнитного поля и температуры индуцирует температурные квантовые осцилляции. Использование этих факторов позволило объяснить экспериментально наблюдаемое в тяжелофермионном антиферромагнетике  $CeCu_2Si_2$  аномальное возрастание амплитуды осцилляций в правой окрестности точки спин-флип-перехода.
2. Показано, что в широкозонных антиферромагнитных полуметаллах осциллирующая по  $H$  часть зоной намагниченности  $M_{\sim}$  может немонотонным образом зависеть от температуры и экспериментально проявляться в виде температурных квантовых осцилляций намагниченности.

При этом намагниченность подзоны как функция  $T^2$  имеет вид слабо затухающих периодических осцилляций. Для цериевых монониктидов на основе спин-поляронного представления в скошенной фазе развита теория эффекта де Гааза-ван Альфена. Показано, что при переходе через спин-флип точку происходит резкое изменение частоты осцилляций дГвА. Найдено характерное значение концентрации зонных носителей  $n_c$  в точке  $H_c$ , разделяющее антиферромагнитные полуметаллы с качественно различным поведением эффекта дГвА в окрестности спин-флип-перехода.

3. Методами диаграммной техники для операторов Хаббарда и неприводимых функций Грина в атомном представлении показано, что трехцентровые взаимодействия  $t - J^*$ -модели существенно ренормируют концентрационную зависимость критической температуры перехода в сверхпроводящую фазу с  $d_{x^2-y^2}$  симметрией параметра порядка. Для типичных значений параметров модели в точке оптимального допирования  $T_c$  уменьшается в десятки раз по сравнению со случаем  $t - J$  - модели.
4. Показано, что одновременный учет трехцентровых взаимодействий и статических магнитных флуктуаций при характерных значениях параметров модели приводит к качественным изменениям структуры энергетического спектра и индуцированию в плотности состояний новой особенности Ван-Хова, ренормирующей концентрационную зависимость температуры перехода  $T_c(n)$  в сверхпроводящую фазу с  $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии.
5. В рамках модели Андерсона на основе точного представления функций Грина через нормальные и аномальные компоненты массового и силового операторов развита теория сверхпроводящего состояния с  $s$ -типом симметрии параметра порядка. При учете спин-флуктуационных процессов вычислена амплитуда рассеяния  $f$ -электронов и из ее рассмотрения в куперовском канале получено уравнение, определяющее критическую температуру перехода. Результаты теории применены для интерпретации сверхпроводящей фазы в тяжелофермионных скуттерудитах.
6. Показано, что спин-флуктуационное рассеяние в ансамбле сильно коррелированных электронов  $CuO_2$  плоскости высокотемпературных сверхпроводников существенно модифицирует функцию распределения хаббардовских квазичастиц. Математически спиновые флуктуации учиты-

ваются через зависящую от мацубаровской частоты поправку к силовому оператору. Эта добавка, по разному ренормируя спектральную интенсивность на различных энергетических масштабах, определяет зависимость скачка Мигдала от концентрации электронов в системе.

7. Для периодической модели Андерсона в условиях смешанной валентности редкоземельных ионов получен эффективный гамильтониан, описывающий обменное взаимодействие между спиновыми моментами в локализованной подсистеме, а также взаимодействия, индуцирующие куперовскую неустойчивость. Показано, что изменения обменных интегралов с расстоянием соответствуют наличию фрустрированных связей и инициируют подавление антиферромагнетизма с формированием состояния спиновой жидкости.
8. Методом диаграммной техники для операторов Хаббарда в обобщенном приближении хаотических фаз для периодической модели Андерсона в режиме сильных электронных корреляций получены замкнутые интегральные уравнения, определяющие ренормированные трех- и четырех-полюсные вершины. Решение этих интегральных уравнений позволило получить выражение для динамической магнитной восприимчивости периодической модели Андерсона.
9. Для скошенной фазы тяжелофермионных интерметаллидов вычислен спектр фермиевских возбуждений и низкотемпературное поведение теплоемкости. Ключевой момент решения задачи заключался в использовании совокупности унитарных преобразований, позволивших свести детерминант восьмого порядка к двум детерминантам четвертого порядка. Показано, что спектр тяжелых фермионов в скошенной фазе антиферромагнитных интерметаллидах описывается узкой зоной, отделенной энергетическими щелями. При этом магнитное поле приводит к ренормировке эффективной массы не только по величине, но и по знаку. Обнаруженные изменения электронной теплоемкости в магнитном поле хорошо коррелируют с экспериментальными данными по антиферромагнитным тяжелофермионным интерметаллидам.

## Список цитируемой литературы

- [1] Wasserman A., Bharatiya N. Quasiparticle approach to the de Haas- van Alphen effect // Phys.Rev.B. – 1979. – V. 20. – №6. – P. 2303-2306.
- [2] Hunt M., Meeson P., Probst P.A., Reinders P., Springford M., Assmus W., Sun W. Magnetic oscillations in the heavy-fermion superconductor  $CeCu_2Si_2$  // J.Phys.: Condens. Matter. – 1990. – V. 2. – №32. – P. 6859-6864.
- [3] Нагаев Э.Л. Физика магнитных полупроводников. – Москва: Наука, 1979. – 432 с.
- [4] Chubukov A.V., Kagan M.Yu. On the superfluid transition in dense electron systems // J.Phys.:Condens.Matter. – 1989. – V. 1. – P. 3135-3138.
- [5] Белявский В.И., Копаев Ю.В., Nguyen Ngoc Tuan, Tran Van Luong. Топология сверхпроводящего порядка при спаривающем отталкивании // ЖЭТФ. – 2009. – Т. 135. – №2. – С. 340-350.
- [6] Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands // Proc.Roy.Soc. – 1963. – V. A276. – P. 238.
- [7] Kagan M.Yu., Rice T.M. Superconductivity in the two-dimensional  $t - J$ -model at low electron density // J.Phys.: Condens.Matter. – 1994. – V. 6. – №20. – P. 3771-3780.
- [8] Барабанов А.Ф., Березовский В.М. Фазовые переходы второго рода в сферически симметричной теории  $2D$  гейзенберговского фрустрированного антиферромагнетика // ЖЭТФ. – 1994. – Т. 106. – №4, С. 1156-1168.
- [9] Shimahara H., Takada. S. Fragility of the antiferromagnetic long-rang-order and spin correlations in the two dimensional  $t - J$  model // JPSJ. – 1992. – V. 61. – №3. – P. 989-997.
- [10] Nakai Y., Ishida K., Kikuchi D., Sugawara H., Sato H. Evidence for s-wave superconductivity with antiferromagnetic fluctuations in filled skutterudite  $LaFe_4P_{12}$ :  $^{139}La$  and  $^{31}P$ -NMR studies // JPSJ. – 2005. – V. 74. – №12. – P. 3370-3374.
- [11] Москаленко В.А. Теория возмущений для периодической модели Андерсона // ТМФ. – 1997. – Т. – 110. – №2. – С. 308-322.

- [12] Изюмов Ю.А., Чащин Н.И., Алексеев Д.С. Теория сильнокоррелированных систем. Метод производящего функционала. – Москва-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2006. – 384 с.
- [13] Schrieffer J.R., Wolff P.A. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians // Phys.Rev. – 1966. – V. 149. – №2. – P. 491-492.
- [14] Liang-Jian Z., Qing-Qi Z. The effect of charge fluctuation and transfer on the exchange interaction in rare-earth and actinide systems // JMMM. – 1992. – V. 109. – №2-3. – P. 237-242.
- [15] Izyumov Yu.A., Letfulov B.M. A diagram technique for Hubbard operators: the magnetic phase diagram in the (t-J) model // J.Phys.:Condens.Matter. – 1990. – V. 2. – №45. – P. 8905-8923.
- [16] Izyumov Yu.A., Letfulov B.M., Shipitsyn E.V., Bartkowiak M., Chao K.A. Theory of strongly correlated electron systems on the basis of a diagrammatic technique for Hubbard operators // Phys.Rev.B. – 1992. – V. 46. – №24. – P. 15697-15711.
- [17] Dorin V., Schlottmann P. Magnetic instabilities in Kondo insulators // Phys.Rev.B. – 1992. – V. 46. – №17. – P. 10800-10807.
- [18] Coleman P. New approach to the mixed-valence problem // Phys.Rev.B. – 1984. – V. 29. – №6. – P. 3035-3044.



