

УДК 538.945 537.611.45

## ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА АНТИФЕРРОМАГНИТНОЕ И СВЕРХПРОВОДЯЩЕЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В СИСТЕМАХ С ТЯЖЕЛЫМИ ФЕРМИОНАМИ

© 2012 г. В. В. Вальков<sup>1,2</sup>, А. О. Злотников<sup>1</sup>

*E-mail: vvv@iph.krasn.ru*

Учет сверхобменного взаимодействия между спиновыми моментами локализованных состояний в периодической модели Андерсона позволил описать характеристики сверхпроводящей и антиферромагнитной фаз тяжелофермионных интерметаллидов. Показано, что приложение внешнего давления, изменяющее затравочную энергию примесного уровня, может приводить к резкому разрушению дальнего антиферромагнитного порядка. Развитие куперовской неустойчивости вблизи такого перехода индуцирует экспериментально наблюдаемое состояние, в котором сверхпроводимость сосуществует с антиферромагнитным упорядочением.

### ВВЕДЕНИЕ

В последнее время активизировались исследования редкоземельных интерметаллидов, в которых приложение внешнего давления при нулевом магнитном поле и достаточно низких температурах вызывает серию фазовых переходов. Например, соединение CeRhIn<sub>5</sub> при атмосферном давлении является антиферромагнетиком с температурой Нееля  $T_N = 3.8$  К [1]. При относительно небольшом возрастании давления температура Нееля изменяется незначительно. Однако в окрестности критического давления  $P_c = 1.75$  ГПа происходит резкое разрушение дальнего антиферромагнитного порядка [2]. На основе ЯКР-экспериментов [3] и данных по нейтронной дифракции [4] было продемонстрировано, что при давлениях ниже критического реализуется микроскопически однородная фаза сосуществования сверхпроводимости (СП) и антиферромагнетизма (АФМ).

В связи с этими экспериментальными данными актуально на основе часто используемой периодической модели Андерсона (ПМА) проанализировать изменение характера основного состояния тяжелофермионных (ТФ) систем под влиянием внешнего давления. Решение поставленной задачи реализовано в рамках расширенной ПМА, в которой явно учитывается сверхобменное взаимодействие в подсистеме локализованных электронов. Мотивация такого подхода обусловлена тем, что  $4f$ -электроны Ce принимают участие в формировании как сверхпроводяще-

го, так и антиферромагнитного упорядочения [3]. Следует заметить, что возможность реализации смешанной фазы, в которой СП развивается на фоне АФМ, ранее [5] была обнаружена для ансамбля коллективизированных электронов, обменным образом взаимодействующих между собой.

### МОДЕЛЬ АНДЕРСОНА СО СВЕРХОБМЕННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Исследование условий реализации фазы сосуществования СП и АФМ в ТФ интерметаллидах проведем на основе следующего гамильтониана:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{ef}} = & \sum_{m\sigma} (\varepsilon_0 - \mu) c_{m\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + \sum_{m \neq l} t_{ml} c_{m\sigma}^\dagger c_{l\sigma} + \\
 & + \sum_{m\sigma} (E_0 - \mu) X_m^{\sigma\sigma} + \sum_{ml\sigma} \{ (V_{ml} c_{m\sigma}^\dagger X_l^{0\sigma}) + (\text{э.с.}) \} + \quad (1) \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{m \neq l} J_{ml} \left( S_m S_l - \frac{1}{4} N_m N_l \right).
 \end{aligned}$$

Первое и второе слагаемые гамильтониана описывают в представлении Ванье подсистему коллективизированных электронов с одноузельной энергией  $\varepsilon_0$  и матричным элементом  $t_{ml}$  перескоков электронов с узла  $l$  на узел  $m$ . Третье слагаемое отражает наличие в системе локализованных состояний  $4f$ -электронов с энергией  $E_0$ . Гибридизационные процессы с амплитудой  $V_{ml}$  между двумя подсистемами описываются четвертым членом гамильтониана. Последнее слагаемое связано с учетом сверхобменного взаимодействия,  $J_{ml}$  — параметр обменной связи между локализованными фермионами Хаббарда. Приведенный вид сверхобменного взаимодействия был получен по теории возмущения для ПМА с большим, но конечным параметром кулоновского отталкивания в [6]. Скалярное произведение квазиспиновых век-

<sup>1</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики имени Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск.

<sup>2</sup> Сибирский государственный аэрокосмический университет, Красноярск.

торных операторов  $S_m$  и  $S_l$  выражается через хаббардовские операторы:

$$S_m S_l = \frac{1}{2} \times \\ \times (X_m^{\uparrow\downarrow} X_l^{\downarrow\uparrow} + X_m^{\downarrow\uparrow} X_l^{\uparrow\downarrow} + (X_m^{\uparrow\uparrow} - X_m^{\downarrow\downarrow})(X_l^{\uparrow\uparrow} - X_l^{\downarrow\downarrow})/2).$$

Оператор числа локализованных электронов на узле  $m$  имеет вид  $N_m = X_m^{\uparrow\uparrow} + X_m^{\downarrow\downarrow}$ . Гильбертово подпространство для хаббардовских операторов локализованных электронов строится на следующих состояниях: одно состояние  $|0\rangle$  без локализованных электронов на узле, два  $|\sigma\rangle$  – состояния с одним локализованным электроном, обладающим проекцией спинового момента  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ;  $\mu$  – химпотенциал системы. Воздействие внешнего давления отражается через изменение энергии  $E_0$ . Увеличению внешнего давления соответствует возрастание этой величины. Это связано с тем, что церий входит в состав соединения  $\text{CeRhIn}_5$  в качестве иона  $\text{Ce}^{3+}$  с большим суммарным положительным зарядом. Под действием давления энергия локализованного  $4f$ -электрона Ce за счет кулоновского взаимодействия с эффективно отрицательным окружением увеличивается.

Решение задачи проведено в рамках метода неприводимых двухвременных запаздывающих функций Грина с использованием проецирования Цванцига–Мори на базис операторов  $\{X_f^{0\sigma}, Y_g^{0\sigma}, a_{f\sigma}, b_{g\sigma}, X_f^{\bar{\sigma}}, Y_g^{\bar{\sigma}}, a_{f\bar{\sigma}}, b_{g\bar{\sigma}}\}$  ( $\bar{\sigma} = -\sigma$ ). При выборе базиса учитывалось существование двух антиферромагнитных подрешеток. Нормировочные множители проецирования имеют вид  $\alpha_\sigma = 1 - n_L/2 + \eta_\sigma R$  ( $\eta_\sigma = \pm 1$  при  $\sigma = \pm 1/2$  соответственно), где концентрация локализованных квазичастиц  $n_L$  и намагниченность антиферромагнитной подрешетки  $R$  определяются следующим образом:

$$n_L = \langle X_f^{\uparrow\uparrow} \rangle + \langle X_f^{\downarrow\downarrow} \rangle, \quad R = (\langle X_f^{\uparrow\uparrow} \rangle - \langle X_f^{\downarrow\downarrow} \rangle)/2. \quad (2)$$

При выводе уравнений самосогласования существенное значение имеет явная структура числителей нормальной  $\langle\langle X_{p\sigma} | X_{p\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega$  и аномальной  $\langle\langle Y_{-p\bar{\sigma}} | X_{p\sigma} \rangle\rangle_\omega$  функций Грина. В среднеполевом приближении для таких функций, взятых с обратным знаком, получаем соответственно

$$\alpha_\sigma S_{p\sigma}(\omega) = \alpha_\sigma d_{3\bar{\sigma}}(p, -\omega) d_{4\sigma}(p, \omega) + \\ + \alpha_\sigma \left( \frac{\Delta_p}{\alpha_\sigma} \right)^2 \left[ (\omega - \xi_p)^2 - \Gamma_p^2 \right] d_{3\sigma}(p, \omega), \quad (3)$$

$$\alpha_\sigma A_{p\bar{\sigma}}(\omega) = \alpha_\sigma \eta_{\bar{\sigma}} \left[ \Delta_p Q_{p\bar{\sigma}}(\omega) + \Delta_p^3 R_{p\bar{\sigma}}(\omega) \right]. \quad (4)$$

Здесь введены обозначения

$$d_{3\sigma}(p, \omega) = (\omega + E_\sigma) \left[ (\omega + \xi_p)^2 - \Gamma_p^2 \right] - \\ - \alpha_\sigma (\omega + \xi_p) (V_p^2 + W_p^2) + 2\alpha_\sigma \Gamma_p V_p W_p, \\ d_{4\sigma}(p, \omega) = (\omega + E_{\bar{\sigma}}) d_{3\sigma}(p, \omega) + (\omega + E_\sigma) d_{3\bar{\sigma}}(p, \omega) - \\ - (\omega + E_\sigma)(\omega + E_{\bar{\sigma}}) \left[ (\omega + \xi_p)^2 - \Gamma_p^2 \right] + \\ + \alpha_\sigma \alpha_{\bar{\sigma}} (V_p^2 - W_p^2)^2, \\ f_3(p, \omega) = 2(\omega + \xi_p) V_p W_p - \Gamma_p (V_p^2 + W_p^2), \\ Q_{p\sigma}(\omega) = \alpha_{\bar{\sigma}} f_3(p, \omega) f_3(p, -\omega) + \\ + d_{3\sigma}(p, \omega) d_{3\sigma}(p, -\omega) / \alpha_{\bar{\sigma}}, \\ R_{p\sigma}(\omega) = \frac{1}{\alpha_{\bar{\sigma}} \alpha_\sigma^2} \left[ (\omega + \xi_p)^2 - \Gamma_p^2 \right] \left[ (\omega - \xi_p)^2 - \Gamma_p^2 \right].$$

Для энергии локализованного уровня, ренормированной за счет существования обменного поля локализованных электронов и отсчитываемой от химпотенциала, введено обозначение  $E_\sigma = E_0 - \mu - 2J(n_L/2 + \eta_\sigma R)$ . Символами  $\Gamma_p, W_p$  определяются фурье-образы интегралов перескока и гибридизации между подрешетками соответственно. Для характеристики внутривещеточных процессов перескока и гибридизации в квазиимпульсном пространстве выбраны обозначения  $t_p, V_p$  соответственно. Фурье-образ  $t_p$  входит в определение  $\xi_p = \varepsilon_0 + t_p - \mu$ .

Квазисреднее  $\langle X_f^{\sigma\sigma} \rangle$  находится из уравнения ( $f(x) = 1/(e^x + 1)$ ):

$$\langle X_f^{\sigma\sigma} \rangle = \alpha_\sigma \left( \frac{1}{N/2} \right) \times \\ \times \sum_{j=1..4} \frac{S_{k\sigma}(-E_{jk}) f(-E_{jk}/T) - S_{k\sigma}(E_{jk}) f(E_{jk}/T)}{2E_{jk} \prod_{h \neq j} (E_{jk}^2 - E_{hk}^2)}. \quad (5)$$

Концентрация коллективизированных квазичастиц задается выражением

$$n_c = \frac{1}{N/2} \sum_{k\sigma} \langle a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \rangle, \quad (6)$$

где квазисреднее  $\langle a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \rangle$  находится из уравнения

$$\langle a_{p\sigma}^\dagger a_{p\sigma} \rangle = \\ = \sum_{j=1..4} \frac{C_{p\sigma}(E_{jp}) f(E_{jp}/T) - C_{p\sigma}(-E_{jp}) f(-E_{jp}/T)}{2E_{jp} \prod_{h \neq j} (E_{jp}^2 - E_{hp}^2)}. \quad (7)$$

В последнем выражении использовано обозначение

$$C_{p\sigma}(\omega) = \left\{ \left[ (\omega - \xi_p)(\omega - E_\sigma) - \alpha_\sigma W_p^2 \right] (\omega - E_\sigma) - \alpha_\sigma V_p^2 (\omega - E_\sigma) \right\} d_{4\sigma}(p, \omega) - \Delta_p^2 \left\{ \left[ (\omega - \xi_p)(\omega - E_\sigma) - \alpha_\sigma V_p^2 \right] \left( \frac{d_{3\sigma}(p, \omega)}{\alpha_\sigma^2} \right) - \frac{\Delta_p^2 (\omega - \xi_p)}{(\alpha_\sigma \alpha_\sigma)^2} \left[ (\omega + \xi_p)^2 - \Gamma_p^2 \right] \right\} - \Delta_p^2 \left\{ \left[ (\omega - \xi_p)(\omega - E_\sigma) - \alpha_\sigma W_p^2 \right] \times \left( \frac{d_{3\sigma}(p, \omega)}{\alpha_\sigma^2} \right) + 2f_3(p, \omega) V_p W_p \right\}.$$

Сверхпроводящий параметр порядка (СПП)  $\Delta_p$  определяется в виде

$$\Delta_p = \frac{1}{N/2} \sum_q \left( \frac{1}{2} \right) \left[ J_{p-q} \langle X_{q\uparrow} Y_{-q\downarrow} \rangle + J_{p+q} \langle Y_{q\uparrow} X_{-q\downarrow} \rangle \right]. \quad (8)$$

Использование (8) после подстановки явных выражений для аномальных средних приводит к интегральному уравнению для СПП. Учитывая, что в CeRhIn<sub>5</sub> реализуется *d*-волновая СП [7], уравнение для амплитуды  $\Delta_0^d$  СПП может быть записано в виде

$$1 = 2J \frac{1}{N/2} \sum_k \left[ \sin\left(\frac{k_x b}{2}\right) \sin\left(\frac{k_y b}{2}\right) \right]^2 \times \sum_j \frac{-Q_k(E_{jk}) \text{th}(E_{jk}/(2T))}{2E_{jk} \prod_{h \neq j} (E_{jk}^2 - E_{hk}^2)} + 8J(\Delta_0^d)^2 \frac{1}{N/2} \sum_k \left[ \sin\left(\frac{k_x b}{2}\right) \sin\left(\frac{k_y b}{2}\right) \right]^4 \times \sum_j \frac{-R_k(E_{jk}) \text{th}(E_{jk}/(2T))}{2E_{jk} \prod_{h \neq j} (E_{jk}^2 - E_{hk}^2)}. \quad (9)$$

$$\text{где } Q_k(\omega) = \sum_\sigma \alpha_\sigma Q_{k\sigma}(\omega), \quad R_k(\omega) = \sum_\sigma \alpha_\sigma R_{k\sigma}(\omega).$$

### ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Для изучения влияния энергии  $E_0$  на параметры порядка системы (намагниченность  $R$  и СПП  $\Delta_p$ ) достаточно ограничиться рассмотрением низкотемпературного предела. На рис. 1 приведены результаты численного решения уравнений самоогласования (2), (5), (7), (9) для случая, когда полная концентрация электронов в системе  $n_e = n_L + n_c = 1$ . При этом  $J = 0.2$ ;  $V_0 = 0.6$ . В расчетах учитывались только перескоки между ближайши-

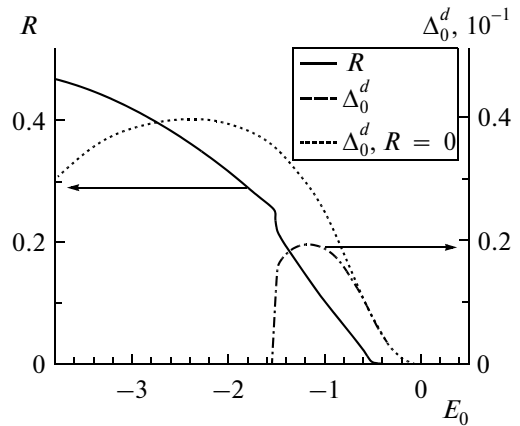


Рис. 1. Зависимости намагниченности  $R$  (сплошная линия) и амплитуд  $\Delta_0^d$  сверхпроводящего параметра порядка, рассчитанных при  $R = 0$  (точечная линия) и самосоогласованно с учетом  $R$  (штрихпунктирная линия), от энергии локализованного уровня  $E_0$ . Выбраны параметры модели  $J = 0.2$ ;  $V_0 = 0.6$ ;  $n_e = 1$ .

ми соседями с амплитудой  $t_1$  и одноузельная гибридизация. Все энергетические величины нормированы на параметр  $|t_1|$ . Из рис. 1 видно, что намагниченность  $R$  (сплошная линия) уменьшается при увеличении энергии  $E_0$ , что связывается с ростом давления. В области, где значение намагниченности изменяется резко, начинает формироваться сверхпроводящая щель с амплитудой  $\Delta_0^d$  (штрихпунктирная линия). При этом возникает достаточно широкий интервал значений энергии, при которых существуют как дальний антиферромагнитный порядок, так и сверхпроводящие спаривания. Отметим, что формирование антиферромагнитного порядка в системе привело к уменьшению амплитуды  $\Delta_0^d$ . Это наглядно демонстрирует пунктирная кривая, определяющая зависимость  $\Delta_0^d$  от энергии  $E_0$  при  $R = 0$ . При относительно низких значениях полной концентрации электронов имеет место плавное уменьшение намагниченности с ростом  $E_0$ . Если же концентрацию электронов увеличить до  $n_e = 1.2$ , то зависимость намагниченности от  $E_0$  (давления) приобретает резкий характер. Такое поведение (рис. 2) соответствует экспериментальным данным для соединения CeRhIn<sub>5</sub> [3]. Видно, что при достижении критического значения энергии происходит резкое уменьшение намагниченности до нуля. Существенно, что это имеет место вблизи точки максимума амплитуды СПП  $\Delta_0^d$ . Это обстоятельство свидетельствует о конкуренции между СП и АФМ. Следует, однако, подчеркнуть, что подобная ситуация реализуется не всегда. Так, например, при концентрации  $n_e = 1.5$  появление антиферромагнитного порядка, наоборот, индуцирует

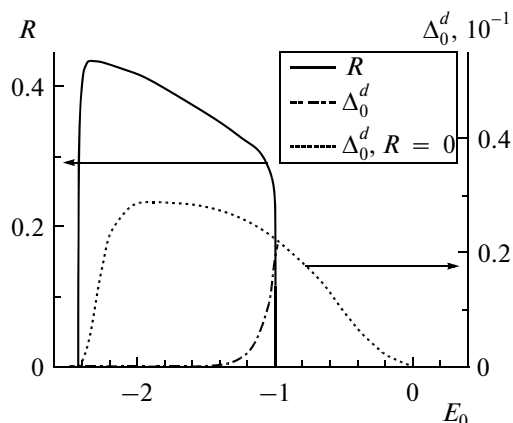


Рис. 2. Зависимость  $R$ ,  $\Delta_0^d$  от энергии  $E_0$  при  $J = 0.2$ ;  $V_0 = 0.6$ ;  $n_e = 1.2$ .

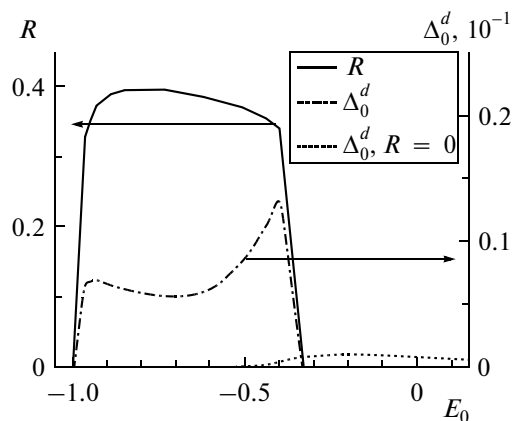


Рис. 3. Зависимость  $R$ ,  $\Delta_0^d$  от энергии  $E_0$  при  $J = 0.2$ ;  $V_0 = 0.6$ ;  $n_e = 1.5$ .

возникновение куперовской неустойчивости, что показано на рис. 3.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение сформулируем главный вывод. Расширенная за счет учета сверхобменного взаимодействия в подсистеме локализованных электронов модель Андерсона позволяет качественно хорошо описать резкое подавление антиферромагнитной фазы при возрастании давления, а также индуцирование фазы, в которой на микроуровне реализуется сосуществование антиферромагнетизма и сверхпроводимости. Полученная на основе численных решений уравнений самосогласования фазовая диаграмма находится в удовлетворительном согласии с фазовой диаграммой, установленной на основе экспериментальных данных, для  $\text{CeRhIn}_5$ .

Работа выполнена при поддержке программы ОФН РАН “Сильные электронные корреляции”,

РФФИ № 10-02-00251, 11-02-00741, РФФИ р\_сибирь № 11-02-98007, а также ФЦП “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” на 2009–2013 годы.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hegger H., Petrovich C., Moshopoulou E.G. et al. // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 84. P. 4986.
2. Park T., Thompson J.D. // New J. Phys. 2009. V. 11. 055062.
3. Mito T., Kawasaki S., Kawasaki Y. et al. // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 90. 077004.
4. Llobet A., Gardner J.S., Moshopoulou E.G. et al. // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. 024403.
5. Вальков В.В., Злотников А.О. // Изв. РАН. Сер. физ. 2011. Т. 75. № 5. С. 682; Valkov V.V., Zlotnikov A.O. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2011. V. 75. № 5. P. 639.
6. Вальков В.В., Дзедзисашвили Д.М. // ТМФ. 2008. Т. 157. С. 235.
7. Park T., Bauer E.D., Thompson J.D. // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. 177002.