

# О реализации фазы сосуществования антиферромагнетизма и сверхпроводимости в тяжелофермионных интерметаллидах

B. B. Вальков<sup>+\*1)</sup>, A. O. Злотников<sup>+</sup>

<sup>+</sup>Институт физики им. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Россия

\*Сибирский государственный аэрокосмический университет им. Решетнёва, 660014 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 19 декабря 2011 г.

После переработки 20 февраля 2012 г.

В рамках периодической модели Андерсона с учетом обменного взаимодействия в подсистеме локализованных электронов описана область диаграммы состояний, в которой под давлением происходит вантовый фазовый переход с разрушением антиферромагнитного упорядочения и возникновением сверхпроводимости. Показано, что в остаточной фазе реализуется мицеллярный оптический однородная фаза сосуществования сверхпроводимости и антиферромагнетизма, экспериментально обнаруженная в тяжелофермионном соединении CeRhIn<sub>5</sub>. В этой области увеличение давления сопровождается экспериментально обнаруженным сильным возрастанием эффективной массы фермионов.

1. В последнее время в целом ряде тяжелофермионных (HF) соединений была обнаружена фаза сосуществования антиферромагнетизма и сверхпроводимости (AFM+SC) (см., например, обзор [1]). В цериевых HF-материалах фаза AFM+SC зачастую достигается за счет изменения основного состояния, вызванного приложением внешнего гидростатического давления. К таким соединениям относятся, например, CeIn<sub>3</sub> [2], CeRhIn<sub>5</sub> [3], Ce<sub>2</sub>RhIn<sub>8</sub> [4].

В [5] на основе анализа экспериментальных данных была предложена феноменологическая двухжидкостная модель, позволившая описать термодинамические, магнитные и транспортные свойства многих HF-материалов. Ее основная идея связана с существованием температуры когерентности  $T^*$ , ниже которой термодинамические характеристики определяются двумя различными вкладами. Первый вклад возникает из-за наличия в системе кондо-примесей. Второй вклад определяется гибридизационными процессами локализованных электронов с электронами проводимости, приводящими к образованию HF когерентного состояния. Температура  $T^*$  связана с параметром  $\epsilon = J_{sd}\rho(E_F)$ , где  $J_{sd}$  – интеграл  $s-d$  обменного взаимодействия,  $\rho(E_F)$  – плотность состояний на уровне Ферми. Для ряда HF-соединений значение параметра  $\epsilon$  напрямую связано с типом фазового перехода при низких температурах [6]. В работе [7] был предложен механизм, согласно которому переход из AFM-фазы в сверхпроводящую фазу при увеличении внешнего давления объясняется ростом  $\epsilon$ .

При феноменологическом подходе вопрос о микроскопических механизмах, определяющих структуру фазовой диаграммы, например, CeRhIn<sub>5</sub>, остается открытым. При этом в стороне остается и важный вопрос о том, разные или одно и то же взаимодействие индуцирует переходы в сверхпроводящее и в антиферромагнитное состояние. На микроскопическом уровне возможность реализации фазы AFM+SC в HF-системах под давлением исследовалась в работах [8, 9].

В настоящей работе показывается, что микроскопический механизм формирования AFM+SC-фазы с  $d$ -типом симметрии сверхпроводящего параметра порядка может быть связан с наличием обменного взаимодействия в подсистеме локализованных моментов. Вычисления проведены на основе эффективной периодической модели Андерсона (РАМ), учитывающей сверхобменное взаимодействие в подсистеме локализованных  $f$ -электронов. Получены условия, при которых реализуется фаза AFM+SC, соответствующая экспериментально наблюдаемой. Предложенная модель хорошо отражает особенности электронного строения цериевых HF-интерметаллидов (например, CeRhIn<sub>5</sub>), поскольку в них одни и те же  $4f$ -электроны Ce ответственны за установление AFM-упорядочения и SC [10]. Важно, что для этой модели был получен вывод о возможности двухжидкостного поведения [11]. Отмеченное обменное взаимодействие возникает при учете высокоэнергетических процессов [12]. При этом температуры возникновения AFM-фазы и SC в HF-системах в несколько раз меньше  $T^*$ . В этой области поведение системы в основном определяется тяжелыми фермионами.

<sup>1)</sup> e-mail: vvv@iph.krasn.ru

ми (вплоть до 90 % [5]), а не изолированными кондопримесиями.

**2.** Запишем эффективный гамильтониан РАМ в режиме сильных корреляций в виде

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} &= \hat{\mathcal{H}}_{c0} + \hat{\mathcal{H}}_{f0} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{mix}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{exch}}, \\ \hat{\mathcal{H}}_{c0} &= \sum_{m\sigma} (\varepsilon_0 - \mu) c_{m\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + \sum_{ml\sigma} t_{ml} c_{m\sigma}^\dagger c_{l\sigma}, \\ \hat{\mathcal{H}}_{f0} &= \sum_{m\sigma} (E_0 - \mu) X_m^{\sigma\sigma}, \\ \hat{\mathcal{H}}_{\text{mix}} &= \sum_{ml\sigma} (V_{ml} c_{m\sigma}^\dagger X_l^{0\sigma} + \text{э.с.}), \\ \hat{\mathcal{H}}_{\text{exch}} &= \frac{1}{2} \sum_{ml} J_{ml} \left( \mathbf{S}_m \mathbf{S}_l - \frac{1}{4} \hat{N}_m \hat{N}_l \right).\end{aligned}\quad (1)$$

Индексы  $m, l$  обозначают номер узла решетки в представлении Ванье. При расчетах решетка считается квадратной, что соответствует квазидвумерной структуре CeRhIn<sub>5</sub> [3]. Гамильтониан  $\hat{\mathcal{H}}_{c0}$  описывает подсистему коллективизированных  $c$ -электронов. Операторы  $c_{m\sigma}$  ( $c_{m\sigma}^\dagger$ ) – фермиевские операторы уничтожения (рождения)  $c$ -электрона на узле  $m$  с проекцией спинового момента  $\sigma$ . Параметр  $\varepsilon_0$  определяет энергию электрона на узле,  $\mu$  – химпотенциал системы. Интенсивность перескоков  $c$ -электронов между узлами  $l$  и  $m$  задается матричными элементами  $t_{ml}$ .

Слагаемое  $\hat{\mathcal{H}}_{f0}$  отвечает за существование состояний  $f$ -электронов, формирующих локализованный энергетический уровень с затравочной энергией  $E_0$ . По определению операторы Хаббарда  $X_m^{rt} = |mr\rangle\langle tm|$  осуществляют переход из состояния  $|mt\rangle$  в состояние  $|mr\rangle$  на узле  $m$ .

Связь между двумя подсистемами электронов устанавливается гамильтонианом  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{mix}}$ , описывающим внутриатомное ( $m = l$ ) и межатомное ( $m \neq l$ ) гибридизационное смешивание  $c$ - и  $f$ -состояний с амплитудой  $V_{ml}$ .

В операторе  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{exch}}$  сверхобменного взаимодействия  $\mathbf{S}_m$  – квазиспиновый векторный оператор, а  $\hat{N}_m$  – оператор числа  $f$ -электронов.

**3.** Для исследования фазы AFM+SC в HF-системах воспользуемся методом уравнений движения с использованием техники проецирования, часто применяемой в теории SC сильно коррелированных систем [13, 14]. Точные уравнения движения для операторов представляются в виде

$$\begin{aligned}i \frac{dX_f^{0\sigma}}{dt} &= (E_0 - \mu) X_f^{0\sigma} + \\ + \sum_{f'} V_{f'f}^* &[ (X_f^{00} + X_f^{\sigma\sigma}) a_{f'\sigma} + X_f^{\bar{\sigma}\sigma} a_{f'\bar{\sigma}} ] +\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}+ \sum_g W_{gf}^* &[ (X_f^{00} + X_f^{\sigma\sigma}) b_{g\sigma} + X_f^{\bar{\sigma}\sigma} b_{g\bar{\sigma}} ] + \\ + \sum_{\langle g \rangle} \left( \frac{J_{fg}}{2} \right) &(X_f^{0\bar{\sigma}} Y_g^{\bar{\sigma}\sigma} - X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} Y_g^{0\sigma}),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}i \frac{dY_g^{0\sigma}}{dt} &= (E_0 - \mu) Y_g^{0\sigma} + \\ + \sum_{g'} V_{g'g}^* &[ (Y_g^{00} + Y_g^{\sigma\sigma}) b_{g'\sigma} + Y_g^{\bar{\sigma}\sigma} b_{g'\bar{\sigma}} ] + \\ + \sum_f W_{fg}^* &[ (Y_g^{00} + Y_g^{\sigma\sigma}) a_{f\sigma} + Y_g^{\bar{\sigma}\sigma} a_{f\bar{\sigma}} ] + \\ + \sum_{\langle f \rangle} \left( \frac{J_{fg}}{2} \right) &(X_f^{\bar{\sigma}\sigma} Y_g^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} Y_g^{0\sigma}),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}i \frac{da_{f\sigma}}{dt} &= (\varepsilon_0 - \mu) a_{f\sigma} + \sum_{f'} (t_{ff'} a_{f'\sigma} + V_{ff'} X_{f'}^{0\sigma}) + \\ + \sum_g (t_{fg} b_{g\sigma} + W_{fg} Y_g^{0\sigma}),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}i \frac{db_{g\sigma}}{dt} &= (\varepsilon_0 - \mu) b_{g\sigma} + \sum_{g'} (t_{gg'} b_{g'\sigma} + V_{gg'} Y_{g'}^{0\sigma}) + \\ + \sum_f (t_{gf} a_{f\sigma} + W_{gf} X_f^{0\sigma}).\end{aligned}$$

При записи этих уравнений осуществлено разбиение на две антиферромагнитные подрешетки. Операторы  $X_{f(f',f'',\dots)}^{rt}$ ,  $a_{f(f',f'',\dots)\sigma}$  действуют на состояния  $f$ - и  $c$ -электронов, соответственно, на узлах  $f(f', f'', \dots)$ , принадлежащих  $F$ -подрешетке, для которой  $\langle S_f^z \rangle \geq 0$ . Операторы  $Y_{g(g',g'',\dots)}^{rt}$ ,  $b_{g(g',g'',\dots)\sigma}$  относятся к  $G$ -подрешетке, а  $\langle S_g^z \rangle = -\langle S_f^z \rangle$ . Взятие индексов узлов в угловые скобки при суммировании в (2) означает, что сверхобменное взаимодействие осуществляется только между ближайшими  $f$ -электронами, находящимися в разных подрешетках. В двухподрешеточном описании параметр  $W_{fg}$  обозначает интеграл гибридизации между  $c$ - и  $f$ -электронами из разных подрешеток. Для интенсивности гибридизационных процессов внутри одной подрешетки оставлено прежнее обозначение ( $V_{ff'}$ ,  $V_{gg'}$ ).

В дальнейшем в выписанных уравнениях движения осуществляется проецирование их правых частей на базис операторов, составляющих ортогональный набор:

$$\mathbf{e} = (X_f^{0\sigma}, Y_g^{0\sigma}, a_{f\sigma}, b_{g\sigma}, X_f^{\bar{\sigma}0}, Y_g^{\bar{\sigma}0}, a_{f\bar{\sigma}}^\dagger, b_{g\bar{\sigma}}^\dagger). \quad (2)$$

Процедура операторного проецирования проводится по алгоритму, описанному в [15]. Нормировочные

множители базисных операторов Хаббарда определяются в виде

$$\alpha_\sigma = \alpha + \eta_\sigma R, \quad \alpha = 1 - n_L/2. \quad (3)$$

Здесь величина намагниченности  $F$ -подрешетки обозначена как  $R = \langle S_f^z \rangle$ , а среднее число локализованных  $f$ -электронов на узле  $n_L = \langle N_f \rangle$ . Зависящая от  $\sigma$  функция  $\eta_\sigma$  определяется обычным образом:  $\eta_\sigma = 1$ , если  $\sigma = \uparrow$ , и  $\eta_\sigma = -1$ , если  $\sigma = \downarrow$ .

Для описания аномальных спариваний, приводящих к SC, составим эрмитово-сопряженные уравнения движения при  $\sigma \rightarrow \bar{\sigma}$ . В дальнейшем ограничимся учетом только среднеполевых поправок и средних, определяющих аномальные спаривания ближайших  $f$ -электронов из разных подрешеток. Тогда система уравнений на фурье-образы неприводимых функций Грина (GF) в квазимпульсном пространстве имеет вид

$$\begin{bmatrix} \widehat{F}_{p\sigma}(\omega) & \widehat{G}_{p\sigma} \\ -\widehat{G}_{-p\bar{\sigma}}^* & -\widehat{F}_{-p\bar{\sigma}}^*(-\omega) \end{bmatrix} \langle \langle \mathbf{e}_p | B \rangle \rangle_\omega = \left\langle \left\{ \mathbf{e}_p, B \right\}_+ \right\rangle. \quad (4)$$

Здесь  $\mathbf{e}_p$  составлен из фурье-образов базисных операторов. При записи (4) введены определения для матриц четвертого порядка:

$$\widehat{F}_{p\sigma}(\omega) = \begin{bmatrix} \omega - E_\sigma & 0 & -\alpha_\sigma V_p^* & -\alpha_\sigma W_p^* \\ 0 & \omega - E_{\bar{\sigma}} & -\alpha_{\bar{\sigma}} W_p^* & -\alpha_{\bar{\sigma}} V_p^* \\ -V_p & -W_p & \omega - \xi_p & -\Gamma_p \\ -W_p & -V_p & -\Gamma_p & \omega - \xi_p \end{bmatrix}, \quad (5)$$

$$\widehat{G}_{p\sigma} = - \begin{bmatrix} 0 & \eta_\sigma \Delta_p / \alpha_\sigma & 0 & 0 \\ \eta_\sigma \Delta_{-p} / \alpha_{\bar{\sigma}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (6)$$

где  $E_\sigma = E_0 - \mu - (J_0/2)(n_L/2 + \eta_\sigma R)$ ,  $\xi_p = \varepsilon_0 - t_p - \mu$ . Функции  $t_p$ ,  $\Gamma_p$ ,  $V_p$  и  $W_p$  определяются через фурье-преобразования внутриподрешеточных и межподрешеточных параметров перескоков и гибридизации ( $t_{ff'}$ ,  $t_{fg}$ ,  $V_{ff'}$  и  $W_{fg}$  соответственно). Сверхпроводящий параметр порядка (SCOP)  $\Delta_p$  задает интенсивность куперовских спариваний:

$$\Delta_p = \frac{1}{N/2} \sum_q \frac{1}{2} [J_{p-q} \langle X_{q\uparrow} Y_{-q\downarrow} \rangle + J_{p+q} \langle Y_{q\uparrow} X_{-q\downarrow} \rangle]. \quad (7)$$

Из (4) найдены фурье-образы базисных GF, актуальных для дальнейших исследований:

$$\langle \langle X_{p\sigma} | X_{p\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega = \left\langle \left\langle Y_{p\bar{\sigma}} | Y_{p\bar{\sigma}}^\dagger \right\rangle \right\rangle_\omega = \frac{\alpha_\sigma M_{p\sigma}^{11}(\omega)}{D_{8\sigma}(p, \omega)}, \quad (8)$$

$$\langle \langle a_{p\sigma} | a_{p\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega = \left\langle \left\langle b_{p\bar{\sigma}} | b_{p\bar{\sigma}}^\dagger \right\rangle \right\rangle_\omega = \frac{M_{p\sigma}^{33}(\omega)}{D_{8\sigma}(p, \omega)}, \quad (9)$$

где  $D_{8\sigma}(p, \omega)$  – определитель матрицы системы уравнений (4), а  $M_{p\sigma}^{ij}(\omega)$  – определитель матрицы, получающейся из матрицы (4) путем вычеркивания  $i$ -строки и  $j$ -столбца. Явные выражения для таких функций не приводятся ввиду их громоздкости.

Фурье-образ аномальной GF имеет вид

$$\langle \langle Y_{-p\bar{\sigma}} | X_{p\sigma} \rangle \rangle_\omega = -\frac{\alpha_\sigma M_{-p\bar{\sigma}}^{52}(\omega)}{D_{8\sigma}(p, \omega)}. \quad (10)$$

Отметим, что для вычисления определителя  $M_{-p\bar{\sigma}}^{52}(\omega)$  необходимо в матрице (4), помимо вычеркивания соответствующих строк и столбцов, произвести замены  $p \rightarrow -p$ ,  $\sigma \rightarrow \bar{\sigma}$ .

Энергетическая структура определяется из условия  $D_{8\sigma}(p, \omega) = 0$ . Положительно определенные решения такого уравнения соответствуют четырем ветвям спектра коллективных возбуждений.

Неизвестными величинами модели являются  $\mu$ ,  $n_L$ ,  $R$ ,  $\Delta_p$ . Для их определения воспользуемся спектральной теоремой. После некоторых упрощений находим уравнение, связывающее GF (8)–(10) с термодинамическими средними:

$$\langle \widehat{A}_f \widehat{B}_{f'} \rangle = \frac{1}{N/2} \sum_{k\lambda} \frac{e^{ik(f-f')}}{2E_{\lambda k} \prod_{\nu \neq \lambda} (E_{\lambda k}^2 - E_{\nu k}^2)} \times [L_k(E_{\lambda k}) f(E_{\lambda k}) - L_k(-E_{\lambda k}) f(-E_{\lambda k})], \quad (11)$$

где  $f(x) = 1/(e^{x/T} + 1)$  – функция распределения Ферми–Дирака,  $T$  – температура,  $E_{\lambda k}$  ( $\lambda = 1, \dots, 4$ ) – положительно определенные ветви энергетического спектра,  $L_k(\omega)$  – числитель функции Грина  $\langle \langle B_k | A_k \rangle \rangle_\omega$ . Тогда для расчета параметров

$$n_L = \sum_\sigma \langle X_f^{\sigma\sigma} \rangle, \quad R = \left( \langle X_f^{\uparrow\uparrow} \rangle - \langle X_f^{\downarrow\downarrow} \rangle \right) / 2 \quad (12)$$

используется GF (8). Концентрация  $c$ -электронов задается выражением

$$n_c = \sum_\sigma \langle a_{f\sigma}^\dagger a_{f\sigma} \rangle, \quad (13)$$

где выписанное среднее выражается через (9). Нетрудно показать, что уравнение самосогласования на  $\mu$  для выбранного значения полной концентрации электронов  $n_e$  в системе имеет вид

$$n_e = n_L + n_c = \sum_\sigma \left( \langle X_f^{\sigma\sigma} \rangle + \langle a_{f\sigma}^\dagger a_{f\sigma} \rangle \right). \quad (14)$$

Подстановка выражения, связывающего  $\langle X_{q\sigma} Y_{-q\bar{\sigma}} \rangle$  с фурье-образом GF (10), в определение SCOP (7) приводит к интегральному уравнению самосогласования. Оно обладает несколькими решениями, которые соответствуют различным видам квазимпульсной зависимости  $\Delta_p$ . Расщепленный из-за наличия  $J_{p\pm q}$  характер ядра интегрального уравнения позволяет найти явный вид  $\Delta_p$  с точностью до неизвестной амплитуды. Амплитуда  $\Delta_0$  определяется из алгебраического уравнения, вид которого зависит от типа симметрии  $\Delta_p$ :

$$\Delta_0 = J \frac{1}{N/2} \sum_{q\lambda} Z_q [\alpha_{\uparrow} M_{-q\downarrow}^{52}(E_{\lambda q}) - \alpha_{\downarrow} M_{q\uparrow}^{52}(E_{\lambda q})] \times \times \frac{\tanh(E_{\lambda q}/2T)}{2E_{\lambda q} \prod_{\nu \neq \lambda} (E_{\lambda q}^2 - E_{\nu q}^2)}. \quad (15)$$

Здесь

$$Z_q = \cos(q_x b/2) \cos(q_y b/2) \quad (16)$$

или

$$Z_q = \sin(q_x b/2) \sin(q_y b/2), \quad (17)$$

если  $\Delta_p$  имеет *s*-либо *d*-тип симметрии на магнитной зоне Бриллюэна соответственно:

$$\Delta_p = 2\Delta_0^s \cos(p_x b/2) \cos(p_y b/2), \quad (18)$$

$$\Delta_p = 2\Delta_0^d \sin(p_x b/2) \sin(p_y b/2). \quad (19)$$

При записи уравнения (15) учтено, что  $M_{-p\bar{\sigma}}^{52}(\omega)$  является четной по  $\omega$  функцией и содержит вклады, пропорциональные только  $\Delta_p$  и  $\Delta_p^3$ .

В настоящее время не достигнуто единого мнения относительно типа симметрии SCOP в фазе AFM+SC CeRhIn<sub>5</sub>. Эксперименты ЯКР в SC-фазе CeRhIn<sub>5</sub>, когда дальний AFM-порядок полностью разрушен приложенным давлением, определяют кубическую зависимость скорости спин-решеточной релаксации от температуры [16]. Считается, что такая зависимость соответствует формированию *d*-типа SC с узловыми точками на поверхности Ферми, в которых величина сверхпроводящей щели обращается в нуль. Однако, как было показано экспериментально при более низких давлениях, в фазе AFM+SC такая зависимость модифицируется в линейную по температуре [17]. К линейной зависимости может приводить образование бесщелевой SC *p*-типа [18] либо SC *d*-типа с дополнительными узловыми точками на поверхности Ферми [19]. Измерения удельной теплоемкости при повороте магнитного поля в фазе

AFM+SC также свидетельствуют о реализации преимущественно *d*-типа симметрии SCOP, но с дополнительными узловыми точками [20]. В связи с этим в данной работе, в отличие от [9], в которой рассматривался только *s*-тип симметрии SCOP, исследования проводятся для случая, когда куперовская неустойчивость приводит к возникновению экспериментально наблюдаемой SC *d*-типа симметрии.

Существенно, что для реализации дальнего AFM-порядка химпотенциал должен лежать в слабодисперсной HF-зоне. В связи с тем что точный вид спектра элементарных возбуждений, соответствующий формированию тяжелых фермионов, труден для восприятия, получено приближенное выражение:

$$E_{2p} \approx \sqrt{\left[ E_p^{afm} \right]^2 + \zeta_p \Delta_p^2}, \quad (20)$$

$$\zeta_p = \frac{\alpha^2 + R^2}{(\alpha^2 - R^2)^2} - \frac{R^2}{(\alpha^2 - R^2)(1 - \alpha\gamma_p)E_J - \mu|\lambda_p|} \times \times \left\{ \Gamma_p^2 \gamma_p^2 + \frac{2\alpha}{\alpha^2 - R^2} [(1 - \alpha\gamma_p)E_J - \mu](\gamma_p E_J + J_0/2) \right\},$$

$$E_p^{afm} = |(1 - \alpha\gamma_p)E_J - \mu| - \lambda_p,$$

$$E_J = E_0 - \frac{J_0 n_L}{4} \quad (J_0 = 4J), \quad \gamma_p = \frac{V_p^2}{\Gamma_p^2 - E_J^2},$$

$$\lambda_p = \sqrt{(\alpha^2 - R^2)\Gamma_p^2 \gamma_p^2 + (\gamma_p E_J + J_0/2)^2 R^2}. \quad (21)$$

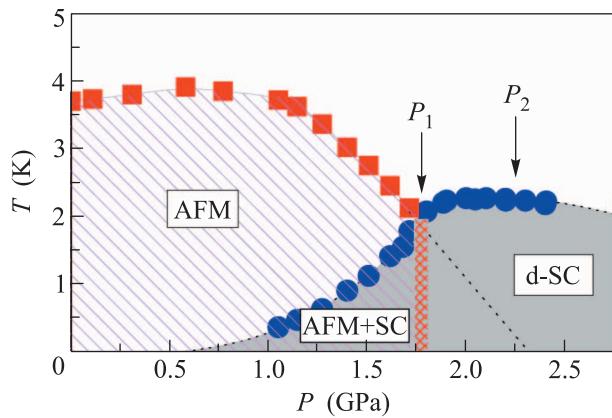
Нетрудно показать, что размер щели в спектре элементарных возбуждений определяется параметром  $\Psi_p = \sqrt{\zeta_p} \Delta_p$ .

Эффективная масса тяжелых фермионов, энергии  $E_{2p}$  которых представлены в (20), оценивается из следующего выражения:

$$\frac{m^*}{m_0} = \frac{\Gamma_0^2 - E_J^2}{|\Gamma_0| \gamma_0} \left\{ 2\alpha|E_J| - \frac{1}{\lambda_0} [(\alpha^2 - R^2)\Gamma_0^2 \gamma_0 + (\alpha^2 + R^2)E_J^2 \gamma_0 - J_0 R^2 |E_J|] \right\}^{-1}, \quad (22)$$

где  $m_0 = \hbar^2 / (|t_1| b^2)$  – масса блоховского электрона на квадратной решетке вблизи дна зоны. Величины  $\Gamma_0$ ,  $\gamma_0$ ,  $\lambda_0$  получаются из известных  $\Gamma_p$ ,  $\gamma_p$ ,  $\lambda_p$  при  $p_x = 0$ ,  $p_y = 0$ . Подобная методика, но в рамках слейв-бозонного представления была применена для оценки массы тяжелых фермионов антиферромагнитных интерметаллидов при учете скоса AFM-подрешеток в работе [21].

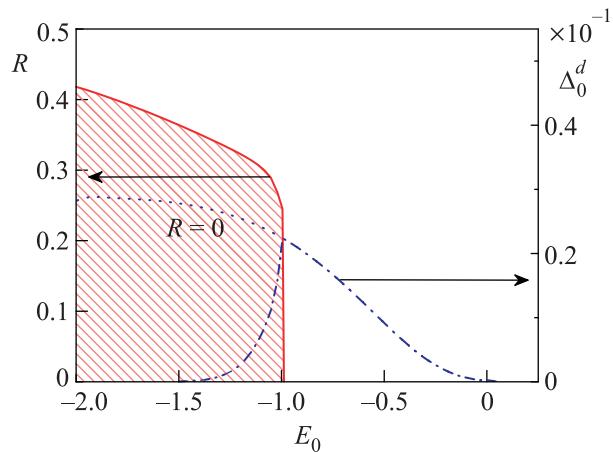
**4. Исследование температурной зависимости теплоемкости HF-соединения CeRhIn<sub>5</sub> при различных значениях внешнего давления** [22] позволило установить вид фазовой диаграммы этого интерметаллида в переменных температура–давление (рис. 1).

Рис. 1. Фазовая диаграмма CeRhIn<sub>5</sub> [22]

Квадраты на рисунке соответствуют температурам перехода ( $T_N$ ) из парамагнитного (PM) состояния в AFM-фазу. Точки обозначают критические температуры ( $T_c$ ) перехода из нормальной фазы в фазу SC. Видно, что если в AFM-фазе дальнейшее понижение температуры индуцирует куперовскую неустойчивость, то система переходит в фазу сосуществования AFM+SC. Обозначение  $P_1$  отвечает давлению, при котором происходит полное разрушение дальнего AFM-порядка.

Из вида фазовой диаграммы следует, что в CeRhIn<sub>5</sub> AFM-упорядочение и SC конкурируют друг с другом. Действительно, существенное давление  $T_N$  начинается при формировании SC. В критической точке  $P_1$ , где происходит разрушение AFM-фазы, SC-фаза обладает  $T_c$ , близкой к максимальной. Следует отметить, что несмотря на явную конкуренцию между SC- и AFM-порядком, фазового расслоения не происходит. На основе методов ЯКР [23] и нейтронной дифракции [24] было показано, что в фазе AFM+SC оба типа упорядочения сосуществуют на микроскопическом уровне.

На рис. 2 приведены рассчитанные зависимости намагниченности AFM-подрешетки  $R$  и амплитуды сверхпроводящего параметра порядка  $d$ -типа симметрии от энергии локализованного уровня  $E_0$  при неизменной концентрации  $n_e = 1.25$ . При этом были выбраны параметры  $J = 0.2$ ,  $V_0 = 0.6$  (в единицах амплитуды перескока  $|t_1|$  с-электронов между ближайшими соседями). Значения концентрации  $f$ -электронов  $n_L$  и химпотенциала  $\mu$  находились самосогласованным образом. Влияние давления на электронную структуру исследуемого HF-интерметаллида моделировалось посредством изменения положения затравочного уровня энергии локализованных электронов. Такой подход успешно при-

Рис. 2. Изменение намагниченности антиферромагнитной подрешетки  $R$  и  $R$  и амплитуды сверхпроводящего параметра порядка  $d$ -типа симметрии  $\Delta_0^d$  при увеличении энергии  $E_0$ 

менялся при исследованиях систем с промежуточной валентностью  $f$ -составляющей [25]. В CeRhIn<sub>5</sub> при росте давления смещение энергии  $E_0$  происходит за счет увеличения кулоновского взаимодействия 4f-электрона Ce<sup>3+</sup> с эффективно отрицательным зарядом на ближайших ионах. Поэтому увеличение  $E_0$  соответствует приложению все большего давления. Отметим, что ранее в работах [7, 8] действие давления на систему ограничивалось изменением параметров перескока, гибридизации и обмена, а также плотности состояний  $\rho$  ( $E_F$ ).

Видно, что при выбранных параметрах модели увеличение давления приводит к разрушению дальнего AFM-упорядочения (сплошная линия). При этом в области больших давлений реализуется SC-фаза. Зависимость  $\Delta_0^d$  от  $E_0$  показана штрихпунктирной линией. Как только  $E_0$  попадает в область реализации AFM-состояния, поведение SCOP резко изменяется. Если бы дальний AFM-порядок не устанавливался, то зависимость  $\Delta_0^d$  от  $E_0$  была бы такой, как это показано пунктирной линией. Однако появление AFM-параметра порядка качественно меняет эту зависимость, приводя к резкому спаду параметра  $\Delta_0^d$  (см. штрихпунктирную линию в области реализации AFM-фазы). Это, с одной стороны, демонстрирует конкуренцию между сверхпроводимостью и антиферромагнетизмом, а с другой стороны, наглядно показывает наличие области реализации фазы сосуществования антиферромагнетизма и сверхпроводимости. По мере нарастания в этой фазе AFM-параметра порядка  $\Delta_0^d$  быстро обращается в нуль. В связи с этим подчеркнем, что подавляющее влияние дальнего AFM-порядка на куперовские спа-

ривания обуславливается не только уменьшением амплитуды  $\Delta_0^d$ , но и редуцированием сверхпроводящей щели при  $R \neq 0$  в спектре элементарных возбуждений (см. выражение (20)).

Остановимся на экспериментальных наблюдениях, обнаруживших увеличение постоянной Зоммерфельда [26], циклотронной [27] и эффективной [28] массы электронов в CeRhIn<sub>5</sub> при возрастании давления. Возрастание эффективной массы фермионов в нашем подходе получается для области, примыкающей к области AFM+SC (рис. 3). Эффективная мас-

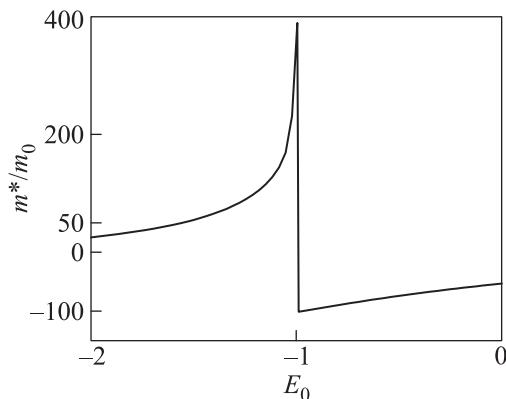


Рис. 3. Зависимость эффективной массы фермионов, отнесенной к массе свободного электрона, от  $E_0$

са рассчитывалась по формуле (22) на основе самосогласованных решений. Видно, что при атмосферном давлении (считается, что это соответствует энергии  $E_0 \approx -2$ ) эффективная масса тяжелых фермионов превышает массу свободных примерно в 25 раз. При увеличении давления значение эффективной массы существенно растет. Максимально резкое увеличение массы достигается при приближении к критической точке, в которой AFM-порядок полностью разрушается ( $R = 0$ ). Изменение знака эффективной массы тяжелых фермионов при критическом давлении происходит из-за смены типа носителей при переходе из AFM- в PM-фазу [29]. При дальнейшем увеличении давления величина  $m^*/m_0$  уменьшается по модулю.

5. В заключение остановимся на результатах, полученных благодаря использованию микроскопического подхода. Включение антиферромагнитной связи между локализованными электронами редкоземельной подсистемы позволило не только описать антиферромагнитную и сверхпроводящую фазы  $d$ -типа симметрии, но и получить условия реализации состояния, в котором антиферромагнетизм и сверхпроводимость сосуществуют на микроскопическом уровне. Важно, что микроскопическое описание сверх-

проводящей фазы при наличии дальнего антиферромагнитного упорядочения приводит к необходимости учета двух типов аномальных средних, обусловленных существованием двух магнитных подрешеток. При этом оказывается, что эти аномальные средние характеризуются различными температурными зависимостями, тесно связанными с конкретной симметрией сверхпроводящего параметра порядка. Сделанные в работе выводы о фазе сосуществования сверхпроводимости и антиферромагнетизма находятся в хорошем качественном согласии с экспериментально установленными данными о реализации такой фазы в тяжелофермионном интерметаллиде CeRhIn<sub>5</sub>.

В работе вскрыт микроскопический механизм увеличения эффективной массы фермионов. Выводы, полученные на его основе, находятся в качественном согласии с экспериментальными данными о значительном возрастании эффективной массы фермионов при увеличении давления в окрестности точки разрушения антиферромагнетизма.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН “Квантовые мезоскопические и неупорядоченные структуры”, проектов РФФИ # 10-02-00251, РФФИ-Сибирь # 11-02-98007, а также ФЦП “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” на 2009–2013 годы.

1. C. Pfleiderer, Rev. Mod. Phys. **81**, 1551 (2009).
2. N. D. Mathur, F. M. Grosche, S. R. Julian et al., Nature **394**, 39 (1998).
3. H. Hegger, C. Petrovic, E. G. Moshopoulou et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 4986 (2000).
4. M. Nicklas, V. A. Sidorov, H. A. Borges et al., Phys. Rev. B **67**, 020506 (2003).
5. S. Nakatsuji, D. Pines, and Z. Fisk, Phys. Rev. Lett. **92**, 016401 (2004).
6. Yi-feng Yang, Z. Fisk, Han-Oh Lee et al., Nature **454**, 611 (2008).
7. Yi-feng Yang, N. J. Curro, Z. Fisk et al., J. of Phys.: Conf. Ser. **273**, 012066 (2011).
8. P. D. Sacramento, J. Phys.: Cond. Mat. **15**, 6285 (2003).
9. J. V. Alvarez and F. Yndurain, Phys. Rev. Lett. **98**, 126406 (2007).
10. T. Park and J. D. Thompson, New Journal of Physics **11**, 055062 (2009).
11. V. Barzykin, Phys. Rev. B **73**, 094455 (2006).
12. B. B. Вальов, Д. М. Дзебисашвили, ТМФ **157**, 235 (2008).
13. Н. М. Плайде, ТМФ **154**, 129 (2008).
14. N. M. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors. Experiment, Theory, and Applications*, Springer, Berlin, 2008.

15. H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
16. Y. Kohori, Y. Yamato, Y. Iwamoto, and T. Kohara, Eur. Phys. J. B **18**, 601 (2000).
17. S. Kawasaki, T. Mito, Y. Kawasaki et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 137001 (2003).
18. Y. Fuseya, H. Kohno, and K. Miyake, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 2914 (2003).
19. Y. Bang, M. J. Graf, A. V. Balatsky, and J. D. Thompson, Phys. Rev. B **69**, 014505 (2004).
20. T. Park, E. D. Bauer, and J. D. Thompson, Phys. Rev. Lett. **101**, 177002 (2008).
21. В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, ЖЭТФ **137**, 341 (2010).
22. T. Park, Y. Tokiwa, E. D. Bauer et al., Physica B **403**, 943 (2008).
23. T. Mito, S. Kawasaki, Y. Kawasaki et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 077004 (2003).
24. A. Llobet, J. S. Gardner, E. G. Moshopoulou et al., Phys. Rev. B **69**, 024403 (2004).
25. Д. И. Хомсий, УФН **129**, 443 (1979).
26. R. A. Fisher, F. Bouquet, N. E. Phillips et al., Phys. Rev. B **65**, 224509 (2002).
27. H. Shishido, R. Settai, H. Harima, and Y. Ōnuki, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 1103 (2005).
28. G. Knebel, D. Aoki, J.-P. Brison, and J. Flouquet, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 114704 (2008).
29. В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, ТМФ **162**, 125 (2010).