В. В. Вальков, А. О. Злотников, Сосуществование сверхпроводимости и антиферромагнетизма в тяжелофермионных интерметаллидах, *ТМФ*, 2013, том 174, номер 3, 484–503

DOI: https://doi.org/10.4213/tmf8378

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
Том 174, № 3
март, 2013

 В. В. Вальков*†, А. О. Злотников*

СОСУЩЕСТВОВАНИЕ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ И АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМА В ТЯЖЕЛОФЕРМИОННЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ

В рамках эффективного гамильтониана для периодической модели Андерсона при использовании двухвременных запаздывающих функций Грина изучены условия реализации фазы сосуществования сверхпроводимости и антиферромагнетизма. Такая фаза экспериментально наблюдается в редкоземельных интерметаллидах с тяжелыми фермионами при приложении внешнего давления. В выбранной модели при наличии дальнего антиферромагнитного упорядочения куперовская неустойчивость индуцируется в результате совместного влияния сверхобменного взаимодействия в подсистеме локализованных электронов и гибридизации между двумя группами электронов. Приложение внешнего давления вызывает увеличение энергии локализованного уровня, сопровождающееся в определенной области фазовой диаграммы резким разрушением дальнего антиферромагнитного упорядочения. В точке разрушения сверхпроводящий параметр порядка обладает максимальным значением. Показано, что уменьшение намагниченности антиферромагнитной подрешетки с ростом давления вызывает значительное увеличение массы фермиевских квазичастиц, а в критической точке происходит изменение знака носителей тока. Полученные результаты на качественном уровне хорошо согласуются с экспериментальными данными для тяжелофермионного интерметаллида $CeRhIn_5$.

Ключевые слова: периодическая модель Андерсона, сосуществование сверхпроводимости и антиферромагнетизма, сверхобменное взаимодействие, тяжелые фермионы.

DOI: 10.4213/tmf8378

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что сильные электронные корреляции в существенной степени определяют свойства слабо легированных оксидов меди [1], [2] и тяжелофермионных (ТФ) интерметаллидов [3]–[6]. В этих материалах реализуется нефононный механизм

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия.
E-mail: vvv@iph.krasn.ru, zlotn@iph.krasn.ru

†Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М. Ф. Решетнёва, Красноярск, Россия

сверхпроводящего спаривания [1], [7]–[9], и куперовская неустойчивость развивается либо на фоне разрушенного антиферромагнитного упорядочения при сохранении ближних антиферромагнитных корреляций, либо при наличии дальнего антиферромагнитного порядка, но с существенно уменьшенным значением намагниченности подрешетки.

Реализация микроскопически однородной фазы сосуществования сверхпроводимости (СП) и антиферромагнетизма (АФМ) в сильно коррелированных системах в последнее время стала предметом повышенного внимания. Это произошло благодаря тому, что приложение внешнего давления к ряду ТФ-антиферромагнетиков приводит к индуцированию фазового перехода с формированием отмеченной фазы сосуществования.

Известно, что в проводящих антиферромагнетиках условия реализации куперовской неустойчивости являются более благоприятными, чем в ферромагнитных металлах [10], [11]. Это объясняется отсутствием спонтанной макроскопической намагниченности и сохранением вырожденности спектра фермиевских возбуждений по направлению проекции спинового момента. Примеров соединений, в которых наблюдается фаза сосуществования СП и АФМ, известно немало. Впервые явление одновременной реализации СП и АФМ в ТФ-системах было зафиксировано в трансурановых соединениях UPt_3 [12], UPd_2Al_3 [13]. В этих соединениях два из трех 5f-электронов урана являются локализованными и отвечают за индуцирование антиферромагнитного упорядочения [14]. Третий 5f-электрон участвует в формировании зоны тяжелых фермионов. В ансамбле таких электронов развивается куперовская неустойчивость, приводящая к реализации сверхпроводящей ТФ-фазы.

В отличие от трансурановых материалов в цериевом интерметаллиде $CeRhIn_5$, относящемся к группе $Ce_nT_mIn_{3n+2m}$ (здесь T = Co, Rh, Pd, Ir, Pt; $n = 1, 2$; $m = 0, 1$), 4f-электрон церия принимает участие в формировании как дальнего антиферромагнитного порядка, так и куперовской неустойчивости. На это косвенно указывает совпадение энтропии при переходе из антиферромагнитной фазы в сверхпроводящую фазу под действием внешнего давления [15]. При этом вблизи такого перехода реализуется область, в которой СП и АФМ сосуществуют на микроскопическом уровне [16]. Фаза сосуществования ограничена диапазоном давлений $P \approx 1 \div 1.8$ ГПа с максимальной критической температурой около 2 K [15].

Сильная взаимосвязь между СП и АФМ была установлена также в оксидах меди [17]. Посредством измерения сдвига Найта методом ядерного магнитного резонанса было продемонстрировано сосуществование высокотемпературной СП и антиферромагнитного порядка в многослойных купратах $HgBa_2Ca_4Cu_5O_{12+\delta}$ [18] и $Ba_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n}(F,O)_2$ ($n = 4, 5$) [19]. Сосуществование фаз в двухслойном медно-оксидном сверхпроводнике $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ было показано в работе [20].

В связи со сказанным представляется актуальным проведение теоретического анализа, направленного на изучение нефононного механизма куперовской неустойчивости, который приводит к формированию на микроскопическом уровне однородной сверхпроводящей фазы с d-типом симметрии параметра порядка при наличии дальнего антиферромагнитного упорядочения. В качестве сопутствующей цели такого исследования может выступать задача интерпретации аномального поведения эффективной массы в окрестности квантового фазового перехода.

Целесообразно подчеркнуть, что формирование фазы сосуществования СП и АФМ может развиваться по двум сценариям. Согласно первому из них за реализацию СП и АФМ ответственны две разные группы электронов: СП устанавливается в подсистеме коллективизированных фермионов, тогда как дальний антиферромагнитный порядок реализуется благодаря наличию локализованных электронов. Этот сценарий имеет место в тройных редкоземельных [21] и в урановых ТФ-соединениях.

Второй сценарий образования фазы сосуществования проявляется в цериевых интерметаллидах. В них за формирование обоих типов упорядочения ответственны одни и те же 4f-электроны (как, например, в $CeRhIn_5$). В этом случае эффекты взаимного влияния СП и АФМ играют более существенную роль и являются предметом многих теоретических исследований. В работе [22] фаза сосуществования СП и АФМ исследовалась на основе среднеполевого слейв-бозонного приближения в рамках периодической модели Андерсона (ПМА), которая дополнялась квадратичными по фермиевским операторам слагаемыми, описывающими как куперовскую неустойчивость, так и неустойчивость по отношению к антиферромагнитному состоянию. Следует отметить, что такой подход оставлял открытым вопрос о виде электронного взаимодействия в ТФ-системах, приводящего к смешанному состоянию, в котором одновременно реализуются сверхпроводящие и антиферромагнитные свойства. В работе [22] область сосуществования СП и АФМ была получена путем увеличения величины гибридизационного параметра и ширины зоны электронов. Увеличение этих параметров связывалось с ростом внешнего гидростатического давления. Более простое рассмотрение СП и АФМ в системах с тяжелыми фермионами было реализовано в работе [23]. Исследовался ансамбль коллективизированных электронов, которые взаимодействуют между собой посредством одноузельного кулоновского отталкивания и эффективного взаимодействия, приводящего к притяжению. Для получения тяжелой эффективной массы электронов были введены дополнительные ограничения на модель. Полагалось, что уровень Ферми лежит в окрестности седловой точки (точки X двумерной зоны Бриллюэна) и вводилось дополнительное предположение о наличии логарифмической особенности ван Хова вблизи химического потенциала.

В настоящей работе на основе последовательного применения к расширенной модели Андерсона метода двухвременных температурных функций в атомном представлении проанализированы условия, при которых становится возможным сосуществование СП и АФМ в сильно коррелированных системах с тяжелыми фермионами. В рамках такого подхода нет необходимости использовать переход к слейв-бозонам и вводить приближенное описание для учета констрейна. При этом удается получить замкнутую самосогласованную систему уравнений, описывающую как все необходимые фазы, включая фазу сосуществования, так и аномальное поведение эффективной массы фермиевских квазичастиц в окрестности квантового фазового перехода.

2. ГАМИЛЬТОНИАН ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ТЯЖЕЛОФЕРМИОННЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ

Описание свойств редкоземельных интерметаллидов с тяжелыми фермионами обычно проводится в рамках ПМА [24]–[26]. В режиме сильных электронных корреляций, когда параметр U кулоновского отталкивания двух локализованных электронов с противоположными проекциями спинового момента, находящихся на одном узле, существенно превышает все другие характерные энергии, локализованное состояние характеризуется однократным электронным заполнением. В этом случае естественным описанием является атомное представление, в явной форме учитывающее эту особенность [27]. При этом учет процессов, отражающих виртуальные переходы локализованных состояний в двухэлектронный сектор гильбертова пространства, приводит к эффективному гамильтониану, содержащему ряд дополнительных слагаемых [28]. Так, например, возникают существенные для дальнейшего слагаемые, которые описывают обменное взаимодействие в подсистеме локализованных электронов. Актуальность учета этого взаимодействия обусловлена прежде всего тем, что оно способно индуцировать как антиферромагнитное упорядочение, так и куперовскую неустойчивость. Например, в работе [29] было показано, что обменное взаимодействие в ансамбле коллективизированных электронов может приводить к реализации смешанной фазы.

В представлении Ванье эффективный гамильтониан ПМА может быть записан в виде

$$\widehat{\mathscr{H}}_{\text{eff}} = \sum_{m,\sigma}(\varepsilon_0-\mu)c^{\dagger}_{m\sigma}c_{m\sigma} + \sum_{m,l,\sigma} t_{ml}c^{\dagger}_{m\sigma}c_{l\sigma} + \sum_{m,\sigma}(E_0-\mu)X^{\sigma\sigma}_m + \\ + \sum_{m,l,\sigma}\left\{(V_{ml}c^{\dagger}_{m\sigma}X^{0\sigma}_l) + (\text{э.с.})\right\} + \frac{1}{2}\sum_{m\neq l} J_{ml}\left(\vec{S}_m\vec{S}_l - \frac{1}{4}\widehat{N}_m\widehat{N}_l\right),$$

где $c_{m\sigma}$ ($c^{\dagger}_{m\sigma}$) – фермиевский оператор уничтожения (рождения) коллективизированного электрона для ячейки Ванье с номером m и проекцией спинового момента σ, X^{rt}_m – оператор Хаббарда, относящийся к ячейке m, который строится с помощью атомных состояний $|m;r\rangle$ и $|m;t\rangle$ обычным образом: $X^{rt}_m = |m;r\rangle\langle t;m|$; $\vec{S}_m$ – квазиспиновый векторный оператор локализованной подсистемы, компоненты которого связаны с операторами атомного представления формулами

$$S^x_m = \frac{X^{\uparrow\downarrow}_m + X^{\downarrow\uparrow}_m}{2}, \qquad S^y_m = -i\frac{X^{\uparrow\downarrow}_m - X^{\downarrow\uparrow}_m}{2}, \qquad S^z_m = \frac{X^{\uparrow\uparrow}_m - X^{\downarrow\downarrow}_m}{2}.$$

Оператор числа локализованных электронов на узле m определяется формулой $\widehat{N}_m = \sum_\sigma X^{\sigma\sigma}_m$. Параметрами модели являются ε_0 – одноузельная энергия коллективизированного электрона, μ – химический потенциал, t_{ml} – матричный элемент перескоков коллективизированных электронов с узла l на узел m, а также E_0 – положение энергетического уровня локализованных электронов, V_{ml} – матричный элемент, который описывает гибридизацию локализованного и коллективизированного состояний, относящихся к одной ячейке Ванье ($m = l$) или к разным ячейкам ($m \neq l$), и J_{ml} – интеграл обменного взаимодействия.

Предполагая возможность антиферромагнитного упорядочения, перейдем к двухподрешеточному описанию. С этой целью, как обычно, выделим два типа узлов решетки. К первому типу (подрешетке F) отнесем узлы, нумеруемые в дальнейшем индексами $f, f', f'', \ldots$, для которых при наличии дальнего антиферромагнитного порядка $\langle S^z_f\rangle > 0$. Узлы второго типа (подрешетка G) будут нумероваться индексами $g, g', g'', \ldots$; для узлов этой подрешетки $\langle S^z_g\rangle < 0$.

В двухподрешеточном представлении гамильтониан удобно записать как

$$\widehat{\mathscr{H}}_{\text{eff}} = \widehat{\mathscr{H}}_0 + \widehat{\mathscr{H}}_{\text{mix}} + \widehat{\mathscr{H}}_{\text{exch}},$$

где $\widehat{\mathscr{H}}_0$ описывает систему невзаимодействующих локализованных и коллективизированных электронов; с помощью $\widehat{\mathscr{H}}_{\text{mix}}$ учитываются гибридизационные процессы между локализованными и коллективизированными состояниями как в пределах одной подрешетки, так и из разных подрешеток; слагаемое $\widehat{\mathscr{H}}_{\mathrm{exch}}$ отвечает за сверхобменное взаимодействие в локализованной подсистеме. Конкретный вид этих операторов определяется выражениями

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathscr{H}_0} = {} & \sum_{f,\sigma}(\varepsilon_0-\mu)a^{\dagger}_{f\sigma}a_{f\sigma} + \sum_{g,\sigma}(\varepsilon_0-\mu)b^{\dagger}_{g\sigma}b_{g\sigma} + \sum_{f,\sigma}(E_0-\mu)X_f^{\sigma\sigma} + \\
& + \sum_{g,\sigma}(E_0-\mu)Y_g^{\sigma\sigma} + \sum_{f,f',\sigma} t_{ff'}a^{\dagger}_{f\sigma}a_{f'\sigma} + \sum_{g,g',\sigma} t_{gg'}b^{\dagger}_{g\sigma}b_{g'\sigma} + \\
& + \sum_{f,g,\sigma}(t_{fg}a^{\dagger}_{f\sigma}b_{g\sigma} + t_{gf}b^{\dagger}_{g\sigma}a_{f\sigma}), \\
\widehat{\mathscr{H}}_{\mathrm{mix}} = {} & \sum_{f,f',\sigma}\bigl\{(V_{ff'}a^{\dagger}_{f\sigma}X_{f'}^{0\sigma}) + (\text{э.с.})\bigr\} + \sum_{g,g',\sigma}\bigl\{(V_{gg'}b^{\dagger}_{g\sigma}Y_{g'}^{0\sigma}) + (\text{э.с.})\bigr\} + \\
& + \sum_{f,g,\sigma}\bigl\{(W_{fg}a^{\dagger}_{f\sigma}Y_g^{0\sigma} + W_{gf}b^{\dagger}_{g\sigma}X_f^{0\sigma}) + (\text{э.с.})\bigr\}, \\
\widehat{\mathscr{H}}_{\mathrm{exch}} = {} & \frac{1}{2}\sum_{\langle fg\rangle,\sigma} J_{fg}(X_f^{\sigma\bar\sigma}Y_g^{\bar\sigma\sigma} - X_f^{\sigma\sigma}Y_g^{\bar\sigma\bar\sigma}).
\end{aligned}$$

Для оператора $\widehat{\mathscr{H}}_{\mathrm{exch}}$ предполагается, что обменное взаимодействие в подсистеме квазилокализованных состояний реализуется только между ближайшими соседями. Это отражено в выражении для $\widehat{\mathscr{H}}_{\mathrm{exch}}$ посредством заключения индексов узлов f и g у знака суммы в угловые скобки. В двухподрешеточном описании параметр W_{fg} обозначает интеграл гибридизации коллективизированных и квазилокализованных состояний, относящихся к разным подрешеткам. Для интенсивности гибридизационных процессов внутри одной подрешетки оставлены прежние обозначения $V_{ff'}$, $V_{gg'}$.

3. ОПИСАНИЕ ФАЗЫ СОСУЩЕСТВОВАНИЯ СП И АФМ С ПОМОЩЬЮ БАЗИСНЫХ ОПЕРАТОРОВ

Для получения замкнутой системы уравнений самосогласования, описывающей сверхпроводящую фазу, антиферромагнитную фазу, а также фазу сосуществования СП и АФМ, воспользуемся методом уравнений движения для двухвременных запаздывающих функций Грина [30], [31]. Замыкание цепочки уравнений движения будем осуществлять на основе метода неприводимых функций Грина [32], [33], применяя технику проецирования Цванцига–Мори [34], [35]. С этой целью введем базисный набор операторов

$$\{X_f^{0\sigma}, Y_g^{0\sigma}, a_{f\sigma}, b_{g\sigma},\ X_f^{\bar\sigma 0}, Y_g^{\bar\sigma 0}, a^{\dagger}_{f\bar\sigma}, b^{\dagger}_{g\bar\sigma}\} \tag{1}$$

и составим точные уравнения движения для первой половины этого набора (уравнения движения для второй половины получаются из представленных ниже уравнений путем эрмитова сопряжения и замены $\sigma \to \bar\sigma = -\sigma$):

$$\begin{aligned}
i\frac{dX_f^{0\sigma}}{dt} = {} & (E_0-\mu)X_f^{0\sigma} + \sum_{f'} V^*_{f'f}\bigl[(X_f^{00} + X_f^{\sigma\sigma})\,a_{f'\sigma} + X_f^{\bar\sigma\sigma}a_{f'\bar\sigma}\bigr] + \\
& + \sum_g W^*_{gf}\bigl[(X_f^{00} + X_f^{\sigma\sigma})\,b_{g\sigma} + X_f^{\bar\sigma\sigma}b_{g\bar\sigma}\bigr] + \frac{1}{2}\sum_g J_{fg}(X_f^{0\bar\sigma}Y_g^{\bar\sigma\sigma} - X_f^{0\sigma}Y_g^{\bar\sigma\bar\sigma}),
\end{aligned}$$

$$i\frac{dY_g^{0\sigma}}{dt} = (E_0-\mu)Y_g^{0\sigma} + \sum_{g'} V_{g'g}^{*}\big[(Y_g^{00}+Y_g^{\sigma\sigma})\,b_{g'\sigma} + Y_g^{\bar\sigma\sigma}b_{g'\bar\sigma}\big] + \\ + \sum_f W_{fg}^{*}\big[(Y_g^{00}+Y_g^{\sigma\sigma})\,a_{f\sigma} + Y_g^{\bar\sigma\sigma}a_{f\bar\sigma}\big] + \frac{1}{2}\sum_f J_{fg}(X_f^{\bar\sigma\sigma}Y_g^{0\bar\sigma} - X_f^{\bar\sigma\bar\sigma}Y_g^{0\sigma}),$$

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

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

где индекс * означает комплексное сопряжение.

Проецирование правых частей этих уравнений на базис (1) и переход в квазиимпульсное представление позволяют получить замкнутую систему восьми уравнений для нормальных и аномальных функций Грина. В матричной форме эта система записывается следующим образом:

$$\begin{pmatrix} \widehat{M}_{p\sigma}(\omega) & \widehat{G}_{p\sigma} \\ -\widehat{G}^{*}_{-p\bar\sigma} & -\widehat{M}^{*}_{-p\bar\sigma}(-\omega) \end{pmatrix} \langle\langle \vec{A}\,|B^\dagger\rangle\rangle_\omega = \langle\{\vec{A}, B^\dagger\}_+\rangle. \tag{2}$$

Входящий в векторную функцию Грина оператор $\vec{A}$ определяется через фурье-образы базисных операторов (1):

$$\vec{A} = \big(X_{p\sigma}, Y_{p\sigma}, a_{p\sigma}, b_{p\sigma},\ X^\dagger_{-p\bar\sigma}, Y^\dagger_{-p\bar\sigma}, a^\dagger_{-p\bar\sigma}, b^\dagger_{-p\bar\sigma}\big). \tag{3}$$

Оператор B выбирается произвольно из набора (3). Как обычно в методе двухвременных функций Грина, при учете только квазифермиевских возбуждений свободные члены каждого уравнения определяются термодинамическим средним $\langle\,\cdot\,\rangle$ от антикоммутатора $\{\,\cdot\,,\,\cdot\,\}_+$ компоненты вектора $\vec{A}$ и оператора B. При записи уравнений (2) предполагалось, что $\langle AB^\dagger\rangle^* = \langle BA^\dagger\rangle$.

В дальнейшем существенную роль будут играть средние от антикоммутаторов операторов Хаббарда в квазиимпульсном представлении:

$$\big\langle\{X_{p\sigma}, X^\dagger_{p\sigma}\}_+\big\rangle = \big\langle\{Y_{p\bar\sigma}, Y^\dagger_{p\bar\sigma}\}_+\big\rangle = \alpha_\sigma, \qquad \alpha_\sigma = 1 - \frac{n_{\mathrm{L}}}{2} + \eta_\sigma R.$$

Здесь величина намагниченности подрешетки F обозначена через $R = \langle S_f^z\rangle$, а среднее число электронов на локализованном уровне $\langle N_f\rangle = \langle N_g\rangle = n_{\mathrm{L}}$. Зависящая от σ функция η_σ определяется обычным образом: $\eta_\sigma = \pm 1$, если $\sigma = \pm 1/2$ соответственно. Введенные в (2) матрицы четвертого порядка задаются выражениями

$$\widehat{M}_{p\sigma}(\omega) = \begin{pmatrix} \omega - E_\sigma & L_p/\alpha_{\bar\sigma} & -\alpha_\sigma V_p^* & -\alpha_\sigma W_p^* \\ L_p/\alpha_\sigma & \omega - E_{\bar\sigma} & -\alpha_{\bar\sigma} W_p^* & -\alpha_{\bar\sigma} V_p^* \\ -V_p & -W_p & \omega - \xi_p & -\Gamma_p \\ -W_p & -V_p & -\Gamma_p & \omega - \xi_p \end{pmatrix},$$

$$\widehat{G}_{p\sigma} = -\begin{pmatrix} \eta_\sigma \Phi/\alpha_{\bar\sigma} & \eta_\sigma \Delta_p/\alpha_\sigma & 0 & 0 \\ \eta_\sigma \Delta_{-p}/\alpha_{\bar\sigma} & \eta_\sigma \Phi/\alpha_\sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

В этих формулах ренормированное выражение для энергии локализованного уровня,

$$E_\sigma = E_0 - \mu - J(n_{\mathrm{L}} + 2\eta_\sigma R) - \Lambda_\sigma + C_\sigma, \tag{4}$$

описывает среднеполевое влияние обменного взаимодействия, приводящего как к смещению уровня (вклад, пропорциональный $-Jn_{\mathrm{L}}$), так и к снятию вырождения этого уровня по проекции спинового момента (вклад, пропорциональный $-2\eta_\sigma JR$). Третье слагаемое

$$\Lambda_\sigma = \frac{1}{\alpha_\sigma}\cdot\frac{1}{N}\sum_k \bigl\{V_k^*\langle X_{k\bar\sigma}^\dagger a_{k\bar\sigma}\rangle + W_k^*\langle X_{k\bar\sigma}^\dagger b_{k\bar\sigma}\rangle\bigr\}$$

возникает из-за совместного влияния кинематического и гибридизационного взаимодействий. Кинематическое взаимодействие является следствием нефермиевского характера перестановочных соотношений для операторов Хаббарда [36], [37], описывающих подсистему f-электронов. Последнее слагаемое в ренормированном выражении для энергии (4),

$$C_\sigma = \frac{1}{\alpha_\sigma}\cdot\frac{1}{2N}\sum_k J_k C_{k\sigma}, \tag{5}$$

связано с учетом статических магнитных флуктуаций и флуктуаций величины заполнения f-уровня. Эти флуктуации посредством механизма обменной связи приводят к сдвигу локализованного уровня, зависящему от проекции спинового момента. Входящая в выражение (5) величина $C_{k\sigma}$ является фурье-образом пространственного коррелятора

$$C_{fg}^\sigma = \langle X_f^{\sigma\bar\sigma}Y_g^{\bar\sigma\sigma}\rangle + \frac{1}{4}\langle\widehat{N}_f\widehat{N}_g\rangle + \langle S_f^zS_g^z\rangle - \left(\frac{1}{4}n_{\mathrm{L}}^2 - R^2\right) \tag{6}$$

и задается равенством

$$C_{fg}^\sigma = \frac{1}{N}\sum_k e^{ik(f-g)}C_{k\sigma}.$$

В формуле (6) мы учли, что $\langle X_f^{\uparrow\uparrow}Y_g^{\uparrow\uparrow}\rangle = \langle X_f^{\downarrow\downarrow}Y_g^{\downarrow\downarrow}\rangle$.

Совместное влияние кинематического и обменного взаимодействий в подсистеме локализованных фермионов приводит к возникновению эффективной связи между локализованными состояниями из разных подрешеток (в исходном гамильтониане соответствующие слагаемые отсутствовали). Интенсивность такого перемешивания определяется функцией L_p, которая выражается через кинетические корреляторы:

$$L_p = \frac{1}{2N}\sum_k J_{p-k}\langle Y_{k\uparrow}^\dagger X_{k\uparrow}\rangle.$$

Как известно, возникновение сверхпроводящего состояния на математическом языке описывается путем введения аномальных средних от фермиевских и квазифермиевских операторов. Присутствие в расширенной модели Андерсона гибридизационного, обменного и кинематического взаимодействий приводит к возможности реализации двух типов аномальных средних. Соответственно в теории возникают два сверхпроводящих параметра порядка (СПП). Первый из них,

$$\Phi = \frac{1}{N}\sum_{k,\sigma}\eta_\sigma\big(V_k^*\langle a_{k\sigma}X_{-k\bar\sigma}\rangle + W_k^*\langle b_{k\sigma}X_{-k\bar\sigma}\rangle\big),$$

связан с аномальными спариваниями коллективизированных и локализованных фермионов, которые индуцированы совместным влиянием гибридизационного и кинематического взаимодействий. Второй СПП является результатом куперовского спаривания квазилокализованных фермионов из разных подрешеток и обуславливается динамической частью обменного взаимодействия:

$$\Delta_p = \frac{1}{2N}\sum_k J_{p-k}\big(\langle X_{k\uparrow}Y_{-k\downarrow}\rangle + \langle Y_{-k\uparrow}X_{k\downarrow}\rangle\big). \tag{7}$$

Величина $\xi_p = \varepsilon_0 + t_p - \mu$ соответствует отсчитанной от химического потенциала μ той части кинетической энергии коллективизированных электронов, которая связана с внутриподрешеточными перескоками. Функции t_p, Γ_p, V_p и W_p определяются через фурье-преобразования внутриподрешеточных и межподрешеточных параметров перескоков и гибридизации:

$$t_{ff'} = \frac{1}{N}\sum_k e^{ik(f-f')}t_k, \qquad t_{fg} = \frac{1}{N}\sum_k e^{ik(f-g)}\Gamma_k,$$
$$V_{ff'} = \frac{1}{N}\sum_k e^{ik(f-f')}V_k, \qquad W_{fg} = \frac{1}{N}\sum_k e^{ik(f-g)}W_k.$$

При проецировании уравнений движения на базисный набор операторов (1) мы учли очевидную связь аномальных средних $\langle X_f^{0\sigma}a_{f'\bar\sigma}\rangle$, $\langle X_f^{0\sigma}b_{g\bar\sigma}\rangle$ с аномальными средними $\langle Y_g^{0\sigma}b_{g'\bar\sigma}\rangle$, $\langle Y_g^{0\sigma}a_{f\bar\sigma}\rangle$. Соответствующие формулы получаются на основе простых соображений симметрии. Применив операцию трансляции, переводящую узлы подрешетки F в узлы подрешетки G, и инверсию оси квантования z, получим, что $\langle Y_g^{0\sigma}b_{g'\bar\sigma}\rangle = -\langle X_f^{0\bar\sigma}a_{f'\sigma}\rangle$, $\langle Y_g^{0\sigma}a_{f\bar\sigma}\rangle = -\langle X_f^{0\bar\sigma}b_{g\sigma}\rangle$. При этом был использован закон преобразования для спинорных величин при повороте вокруг оси x:

$$c_{l\sigma} \to c_{l\sigma}(\theta) = e^{i\theta s_l^x}\,c_{l\sigma}\,e^{-i\theta s_l^x} = c_{l\sigma}\cos\frac{\theta}{2} - ic_{l\bar\sigma}\sin\frac{\theta}{2},$$
$$X_l^{0\sigma} \to X_l^{0\sigma}(\theta) = e^{i\theta S_l^x}\,X_l^{0\sigma}\,e^{-i\theta S_l^x} = X_l^{0\sigma}\cos\frac{\theta}{2} - iX_l^{0\bar\sigma}\sin\frac{\theta}{2}.$$

4. НЕПРИВОДИМЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА И УРАВНЕНИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ

При исследовании сосуществования СП и АФМ важное значение имеет тип симметрии СПП. В настоящее время для систем с тяжелыми фермионами этот вопрос остается открытым. Фурье-образы обменного интеграла $J_{p\pm k}$, входящие в определение (7), могут приводить к квазиимпульсной зависимости СПП Δ_p, соответствующей тому или иному типу симметрии СПП. Для магнитной зоны Бриллюэна, преобразованной посредством поворота на угол $\pi/4$ относительно исходной зоны Бриллюэна, зависимость СПП, отвечающая s-типу симметрии, принимает вид

$\Delta_p^s = 2\Delta_0^s \cos(p_x b/2)\cos(p_y b/2)$. Уменьшение зоны Бриллюэна связано с переходом к новой элементарной ячейке с параметром $b = \sqrt{2}a$ решетки с двумя антиферромагнитными подрешетками. В преобразованной системе координат зависимость СПП для d-типа симметрии представляется в виде $\Delta_p^d = 2\Delta_0^d \sin(p_x b/2)\sin(p_y b/2)$. Отметим, что для соединения $CeRhIn_5$ более предпочтительным считается d-тип симметрии СПП [38], поэтому ниже ограничимся исследованием взаимного влияния СП и АФМ с этим типом симметрии параметра порядка.

Выбор данного типа симметрии СПП приводит к упрощению уравнений самосогласования, поскольку аномальный параметр порядка Φ дает вклад только для s-типа симметрии. Поэтому в дальнейшем считается, что $\Phi = 0$.

При записи решения уравнений (2) для функции Грина в фазе сосуществования СП и АФМ воспользуемся обозначениями

$$d_{3\sigma}(p,\omega) = (\omega + E_\sigma)\big((\omega+\xi_p)^2 - \Gamma_p^2\big) - \alpha_\sigma(\omega+\xi_p)(V_p^2 + W_p^2) + 2\alpha_\sigma\Gamma_p V_p W_p, \tag{8}$$

$$f_3(p,\omega) = \frac{L_p}{\alpha_\sigma\alpha_{\bar\sigma}}\big((\omega+\xi_p)^2 - \Gamma_p^2\big) + 2(\omega+\xi_p)V_pW_p - \Gamma_p(V_p^2 + W_p^2), \tag{9}$$

$$\begin{aligned} d_4(p,\omega) = {} & (\omega + E_{\bar\sigma})d_{3\sigma}(p,\omega) + (\omega+E_\sigma)\, d_{3\bar\sigma}(p,\omega) + \alpha_\sigma\alpha_{\bar\sigma}(V_p^2 - W_p^2)^2 - \\ & - \left((\omega+E_\sigma)(\omega+E_{\bar\sigma}) - \frac{L_p^2}{\alpha_\sigma\alpha_{\bar\sigma}}\right)\big((\omega+\xi_p)^2 - \Gamma_p^2\big) - 2L_p f_3(p,\omega). \end{aligned} \tag{10}$$

Уравнение $d_4(p,-\omega) = 0$ определяет энергетический спектр системы в нормальной антиферромагнитной фазе, когда не учитываются аномальные средние.

Выражения для нормальных функций Грина записываются в виде

$$\langle\langle X_{p\sigma}\,|\,X_{p\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega = -\frac{\alpha_\sigma S_{p\sigma}(\omega)}{D_8(p,\omega)}, \qquad \langle\langle a_{p\sigma}\,|\,a_{p\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega = \frac{C_{p\sigma}(\omega)}{D_8(p,\omega)}, \tag{11}$$

где

$$S_{p\sigma}(\omega) = d_{3\bar\sigma}(p,-\omega)d_4(p,\omega) + \left(\frac{\Delta_p}{\alpha_{\bar\sigma}}\right)^2\big((\omega-\xi_p)^2 - \Gamma_p^2\big)d_{3\sigma}(p,\omega),$$

$$\begin{aligned} C_{p\sigma}(\omega) = {} & \left((\omega-E_\sigma)(\omega-E_{\bar\sigma}) - \frac{L_p^2}{\alpha_\sigma\alpha_{\bar\sigma}}\right)(\omega-\xi_p)d_4(p,\omega) - \\ & - \big(\alpha_{\bar\sigma}V_p^2(\omega-E_\sigma) + \alpha_\sigma W_p^2(\omega-E_{\bar\sigma}) - 2L_pV_pW_p\big)\, d_4(p,\omega) - \\ & - \left(\frac{\Delta_p}{\alpha_{\bar\sigma}}\right)^2\big((\omega-E_\sigma)(\omega-\xi_p) - \alpha_\sigma W_p^2\big)\, d_{3\sigma}(p,\omega) - \\ & - \left(\frac{\Delta_p}{\alpha_\sigma}\right)^2\big((\omega-E_{\bar\sigma})(\omega-\xi_p) - \alpha_{\bar\sigma} V_p^2\big)\, d_{3\bar\sigma}(p,\omega) - \\ & - 2\Delta_p^2\left(V_pW_p - \frac{L_p}{\alpha_\sigma\alpha_{\bar\sigma}}(\omega-\xi_p)\right)f_3(p,\omega) + \frac{\Delta_p^4(\omega-\xi_p)}{(\alpha_\sigma\alpha_{\bar\sigma})^2}\big((\omega+\xi_p)^2 - \Gamma_p^2\big). \end{aligned}$$

В силу эквивалентности антиферромагнитных подрешеток имеют место равенства функций Грина $\langle\langle X_{p\sigma}\,|\,X_{p\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega = \langle\langle Y_{p\bar\sigma}\,|\,Y_{p\bar\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega$ и $\langle\langle a_{p\sigma}\,|\,a_{p\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega = \langle\langle b_{p\bar\sigma}\,|\,b_{p\bar\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega$.

При записи аномальных функций Грина введем дополнительные обозначения

$$Q_{p\sigma}(\omega) = \frac{1}{\alpha_{\bar\sigma}}\, d_{3\sigma}(p,\omega)d_{3\sigma}(p,-\omega) + \alpha_{\bar\sigma} f_3(p,\omega)f_3(p,-\omega),$$

$$R_{p\sigma}(\omega) = \frac{1}{\alpha_\sigma^2 \alpha_{\bar\sigma}} \big((\omega+\xi_p)^2 - \Gamma_p^2\big)\big((\omega-\xi_p)^2 - \Gamma_p^2\big).$$

Тогда аномальная функция Грина записывается как

$$\langle\langle Y_{-p\bar\sigma} \mid X_{p\sigma} \rangle\rangle_\omega = -\eta_{\bar\sigma}\alpha_\sigma \frac{\Delta_p Q_{p\bar\sigma}(\omega) + \Delta_p^3 R_{p\bar\sigma}(\omega)}{D_8(p,\omega)}. \tag{12}$$

Отметим, что числитель выражения (12) содержит только четные степени по ω.

Дисперсионное уравнение в фазе сосуществования СП и АФМ определяется условием наличия полюсов у функций Грина и имеет вид

$$\begin{aligned} 0 = D_8(p,\omega) = d_4(p,\omega)d_4(p,-\omega) + \left(\frac{\Delta_p}{\alpha_{\bar\sigma}}\right)^2 d_{3\sigma}(p,\omega)d_{3\sigma}(p,-\omega) + \\ + \left(\frac{\Delta_p}{\alpha_\sigma}\right)^2 d_{3\bar\sigma}(p,\omega)d_{3\bar\sigma}(p,-\omega) + 2\Delta_p^2 f_3(p,\omega)f_3(p,-\omega) + \\ + \left(\frac{\Delta_p^2}{\alpha_\sigma\alpha_{\bar\sigma}}\right)^2 \big((\omega-\xi_p)^2 - \Gamma_p^2\big)\big((\omega+\xi_p)^2 - \Gamma_p^2\big). \end{aligned} \tag{13}$$

Средние $\langle X_f^{\sigma\sigma}\rangle$, входящие в определение концентрации локализованных квазичастиц n_{L} и намагниченности R, можно связать с помощью спектральной теоремы с функциями Грина (11) (для различных направлений проекции спинового момента σ). Поэтому такие средние определяются уравнениями самосогласования

$$\langle X_f^{\sigma\sigma}\rangle = \frac{1}{N}\sum_{k,j} \alpha_\sigma \frac{S_{k\sigma}(-E_{jk})f(-E_{jk}/T) - S_{k\sigma}(E_{jk})f(E_{jk}/T)}{2E_{jk}\prod_{i\neq j}(E_{jk}^2 - E_{ik}^2)},$$

где $f(x) = 1/(e^x+1)$ – функция распределения Ферми–Дирака, индексы j, i пробегают значения от 1 до 4, что соответствует четырем положительно определенным ветвям энергетического спектра E_{jk}, найденным из дисперсионного уравнения (13). Таким образом величины n_{L} и R определяются как

$$n_{\mathrm{L}} = \langle X_f^{\uparrow\uparrow}\rangle + \langle X_f^{\downarrow\downarrow}\rangle, \qquad R = \frac{\langle X_f^{\uparrow\uparrow}\rangle - \langle X_f^{\downarrow\downarrow}\rangle}{2}.$$

Концентрация коллективизированных квазичастиц задается формулой

$$n_{\mathrm{c}} = \frac{1}{N}\sum_{k,\sigma} \langle a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}\rangle, \tag{14}$$

где среднее выражается через определение функции Грина в (11):

$$\langle a_{p\sigma}^\dagger a_{p\sigma}\rangle = \sum_j \frac{C_{p\sigma}(E_{jp})f(E_{jp}/T) - C_{p\sigma}(-E_{jp})f(-E_{jp}/T)}{2E_{jp}\prod_{i\neq j}(E_{jp}^2 - E_{ip}^2)}.$$

Записав выражение для полного числа электронов в системе,

$$N_{\mathrm{e}} = \sum_{f,\sigma}\big(\langle X_f^{\sigma\sigma}\rangle + \langle a_{f\sigma}^\dagger a_{f\sigma}\rangle\big) + \sum_{g,\sigma}\big(\langle Y_g^{\sigma\sigma}\rangle + \langle b_{g\sigma}^\dagger b_{g\sigma}\rangle\big),$$

получим, что уравнение самосогласования для нахождения химического потенциала можно выразить через узельную концентрацию локализованных и коллективизированных электронов: $n_{\mathrm{e}} = N_{\mathrm{e}}/2N = n_{\mathrm{L}} + n_{\mathrm{c}}$.

Подставим $\Delta_p = 2\Delta_0^d \sin(p_x b/2) \sin(p_y b/2)$ в интегральное уравнение самосогласования, полученное из определения (7), с помощью спектральной теоремы для аномальных функций Грина (12) получим алгебраическое уравнение для амплитуды аномальных спариваний Δ_0^d:

$$1 = 2J \frac{1}{N} \sum_k \left[\sin\left(\frac{k_x b}{2}\right) \sin\left(\frac{k_y b}{2}\right)\right]^2 \sum_j \frac{-Q_k(E_{jk}) \operatorname{th}(E_{jk}/2T)}{2E_{jk} \prod_{i\neq j}(E_{jk}^2 - E_{ik}^2)} + \\ + 8J(\Delta_0^d)^2 \frac{1}{N} \sum_k \left[\sin\left(\frac{k_x b}{2}\right) \sin\left(\frac{k_y b}{2}\right)\right]^4 \sum_j \frac{-R_k(E_{jk}) \operatorname{th}(E_{jk}/2T)}{2E_{jk} \prod_{i\neq j}(E_{jk}^2 - E_{ik}^2)},$$

где

$$Q_p(\omega) = \sum_\sigma \alpha_\sigma Q_{p\bar{\sigma}}(\omega), \qquad R_p(\omega) = \sum_\sigma \alpha_\sigma R_{p\bar{\sigma}}(\omega).$$

5. КВАЗИЧАСТИЧНЫЕ ЗОНЫ В ФАЗЕ СОСУЩЕСТВОВАНИЯ СП И АФМ

Определитель $d_4(p,\omega)$ не зависит от направления проекции спинового момента электрона σ. Это свидетельствует об эквивалентности спектров фермиевских возбуждений в антиферромагнитной фазе для квазичастиц с направлением спинового момента $\sigma =\uparrow$ и $\sigma =\downarrow$. Нетрудно видеть, что определитель $D_8(p,\omega)$ также не зависит от направления проекции спинового момента.

Если в полном дисперсионном уравнении (13) положить $\Delta_p = 0$, то возникающее при этом дисперсионное уравнение соответствует случаю нормальной фазы (уравнение $d_4(p,-\omega) = 0$). В сверхпроводящей фазе дисперсионное уравнение обладает четырьмя дополнительными решениями. Их возникновение объясняется на рис. 1, где показан спектр квазичастичных зон в ПМА по главному направлению зоны Бриллюэна для концентраций $n_{\mathrm{e}} = 1.4$ (а, в) и $n_{\mathrm{e}} = 1.2$ (б, г). Энергетические параметры модели $J = 0.2$, $V_0 = 0.6$, $E_0 = -1.5$ нормированы на величину $|t_1|$. Параметры Λ_σ, C_σ, L_p считаются равными нулю. Для простоты сравнения выбраны такие параметры модели, при которых система находится в нормальной фазе.

Решения уравнения $d_4(p,-\omega) = 0$ при $n_{\mathrm{e}} = 1.4$ для различных направлений проекций квазичастичного спинового момента представлены на рис. 1а. При такой концентрации самосогласованный расчет приводит к только тривиальному решению для намагниченности $R = 0$ и значениям $n_{\mathrm{L}} = 0.907$, $\mu = -1.554$. Штрихпунктирной линией на рис. 1 показан уровень химического потенциала μ. Изменение концентрации может индуцировать переход в антиферромагнитную фазу. Например, при концентрации $n_{\mathrm{e}} = 1.2$ в системе реализуется дальний антиферромагнитный порядок (см. рис. 1б) с параметрами $R = 0.364$, $n_{\mathrm{L}} = 0.746$, $\mu = -1.706$. Нижние две стрелки на правой и левой частях рис. 1б указывают на то, что квазичастичные зоны раздвигаются; это вызвано обменным полем спиновых моментов локализованных электронов. Раздвижка ветвей, соответствующих состояниям зонных электронов (верхняя пара стрелок), обусловлена гибридизационными процессами с антиферромагнитно упорядоченными локализованными электронами. Вид квазичастичных

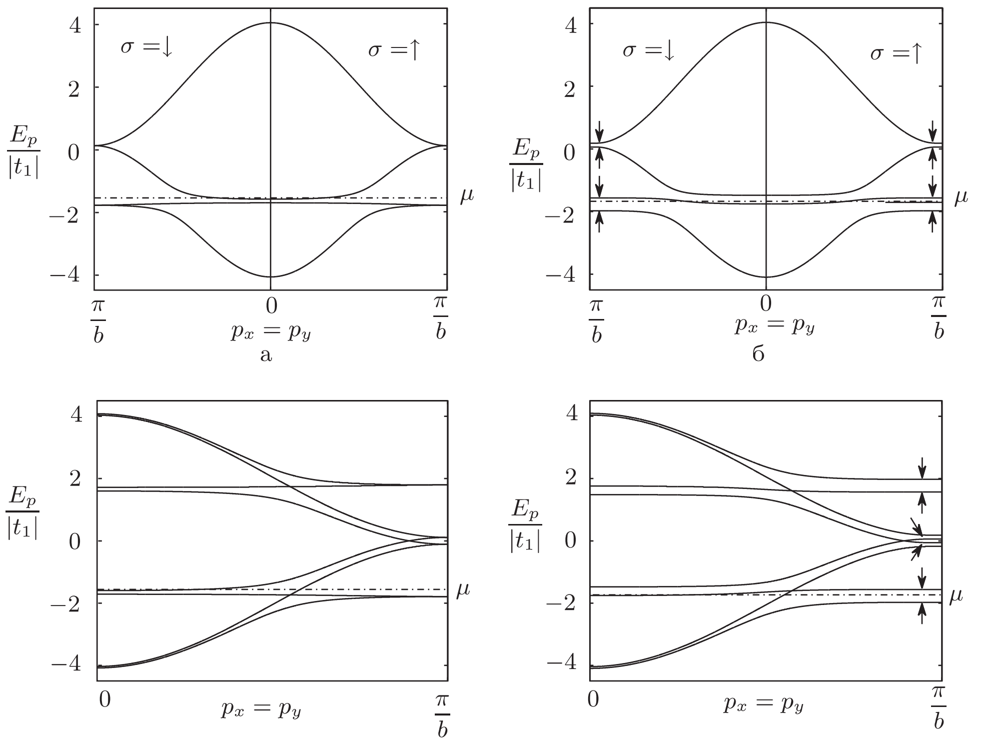

Рис. 1. Квазичастичный спектр ПМА, найденный из уравнения $d_4(p, -\omega) = 0$ (см. (10) и графики а, б) и из уравнения (13) (графики в, г) для $J = 0.2$, $V_0 = 0.6$, $E_0 = -1.5$. На графиках приведены спектры для нормальной парамагнитной фазы ($\Delta_0^d = 0$, $R = 0$) при $n_e = 1.4$, $\mu = -1.554$, $n_L = 0.907$ (а, в) и нормальной антиферромагнитной фазы ($\Delta_0^d = 0$, $R = 0.364$) при $n_e = 1.2$, $\mu = -1.706$, $n_L = 0.746$ (б, г).

зон, представленный на рис. 1а, 1б, характерен для двухподрешеточной ПМА (см., например, статью [39]).

Решения уравнения (13) для тех же параметров, что и на рис. 1а, 1б, показаны на рис. 1в, 1г соответственно. Появление дополнительных ветвей связано с тем, что аномальные функции Грина построены на операторах с различным направлением квазичастичного спинового момента. В этом случае общий энергетический спектр в задаче о сосуществовании СП и АФМ включает в себя четыре энергетические ветви тяжелофермионного антиферромагнетика для квазичастиц с $\sigma =\uparrow$ и четыре ветви в случае $\sigma =\downarrow$, взятые с обратным знаком.

В общем случае аналитический вид решений дисперсионного уравнения (13) является достаточно громоздким и здесь не приводится. В практическом отношении важно иметь хоть и приближенные, но аналитические выражения для квазичастичного спектра, лежащего в окрестности энергии локализованных состояний E_0. Именно через них определяется дисперсионная зависимость зоны тяжелых фермионов.

Получение приближенного выражения связано с заменой $\omega - \xi_p \to E_J - \mu - \xi_p$ в уравнении (13). Здесь использовано обозначение $E_J = E_0 - Jn_{\mathrm{L}}$. Описанное приближение справедливо при малом расщеплении зоны тяжелых фермионов в антиферромагнитной фазе, когда $4JR \ll W$ [40], где W – ширина зоны коллективизированных электронов. Для простоты мы ограничимся рассмотрением только внутриподрешеточной гибридизации ($W_p = 0$), а также приближением ближайших соседей относительно перескоков электронов. В дальнейшем отсчет энергии ведется от уровня ε_0, т. е. считается, что $\varepsilon_0 = 0$. В этом случае

$$[E_p^{\mathrm{HF}}]^2 = \big((1-\alpha\gamma_p)E_J\big)^2 + (\alpha^2 - R^2)\Gamma_p^2\gamma_p^2 + (\gamma_p E_J + 2J)^2 R^2 + \\ + \frac{\alpha^2 + R^2}{(\alpha^2 - R^2)^2}\Delta_p^2 + 2\,\mathrm{sgn}(\gamma_p)\nu_p^2, \qquad \gamma_p = \frac{V_p^2}{\Gamma_p^2 - E_J^2}. \tag{15}$$

Индекс HF отражает тот факт, что выражение (15) описывает только спектр зоны тяжелых фермионов. Функция $\mathrm{sgn}(\,\cdot\,)$ определяется стандартно: $\mathrm{sgn}(\gamma_p) = \pm 1$, если $\gamma_p \gtrless 0$. Также введено обозначение

$$\nu_p^4 = \left((\alpha^2 - R^2)\big((1-\alpha\gamma_p)E_J\big)^2 + \frac{\Delta_p^2 R^2}{\alpha^2 - R^2}\right)\Gamma_p^2\gamma_p^2 + \\ + \left(\big((1-\alpha\gamma_p)E_J\big)(\gamma_p E_J + 2J) + \frac{\alpha\Delta_p^2}{(\alpha^2 - R^2)^2}\right)^2 R^2.$$

Область, включающая зону тяжелых фермионов на рис. 1а, 1б, в увеличенном масштабе представлена на рис. 2а, 2б соответственно. На левой половине каждого из графиков на рис. 2 сплошными линиями показаны точные решения уравнения (13). На правой половине штриховая линия, отмеченная как E_p^{HF}, отвечает решению, рассчитанному по формуле (15). Аналитическое выражение для спектра квазичастичных зон, выделенных цифрами 1, 2, можно получить из соотношения (15), если поменять знак перед слагаемым $2\,\mathrm{sgn}(\gamma_p)\nu_p^2$. Видно, что приближенное аналитическое решение хорошо согласуется с точным, рассчитанным численно. Штриховая линия, обозначенная символом $\star$, не соответствует реальной зоне и приведена для наглядности.

Спектр квазичастичных зон при концентрации $n_{\mathrm{e}} = 1.35$, отвечающей фазе сосуществования СП и АФМ, представлен на рис. 2в. Параметры такой фазы суть $R = 0.411$, $\Delta_0^d = 0.00514$, $n_{\mathrm{L}} = 0.871$, $\mu = -1.595$. Образование сверхпроводящей щели в спектре элементарных возбуждений при таких параметрах показано на рис. 2г. Здесь энергия $\mathcal{E}_p^{\mathrm{HF}}$ отсчитывается от энергии Ферми, p_{F} – импульс Ферми при нулевом СПП. Значение $\Delta_{p_{\mathrm{F}}}$, которому на графике отвечает пунктирная линия, определяет амплитуду аномальных спариваний на поверхности Ферми. Видно, что реальный размер сверхпроводящей щели в спектре существенно превышает значение $\Delta_{p_{\mathrm{F}}}$. Это связано с тем, что спектр тяжелых фермионов имеет более сложный вид по сравнению с энергетическим спектром в теории Бардина–Купера–Шриффера. Поэтому СПП определяется не только амплитудой сверхпроводящих спариваний Δ_p, но и зависит от других параметров модели. Чтобы найти величину СПП, которая более точно чем $\Delta_{p_{\mathrm{F}}}$ соответствует размеру сверхпроводящей щели, приведем приближенное выражение для энергетического спектра тяжелых фермионов:

$$\mathcal{E}_p^{\mathrm{HF}} \approx \sqrt{(\mathcal{E}_p^{\mathrm{AFM}})^2 + \zeta_p\Delta_p^2}\,,$$

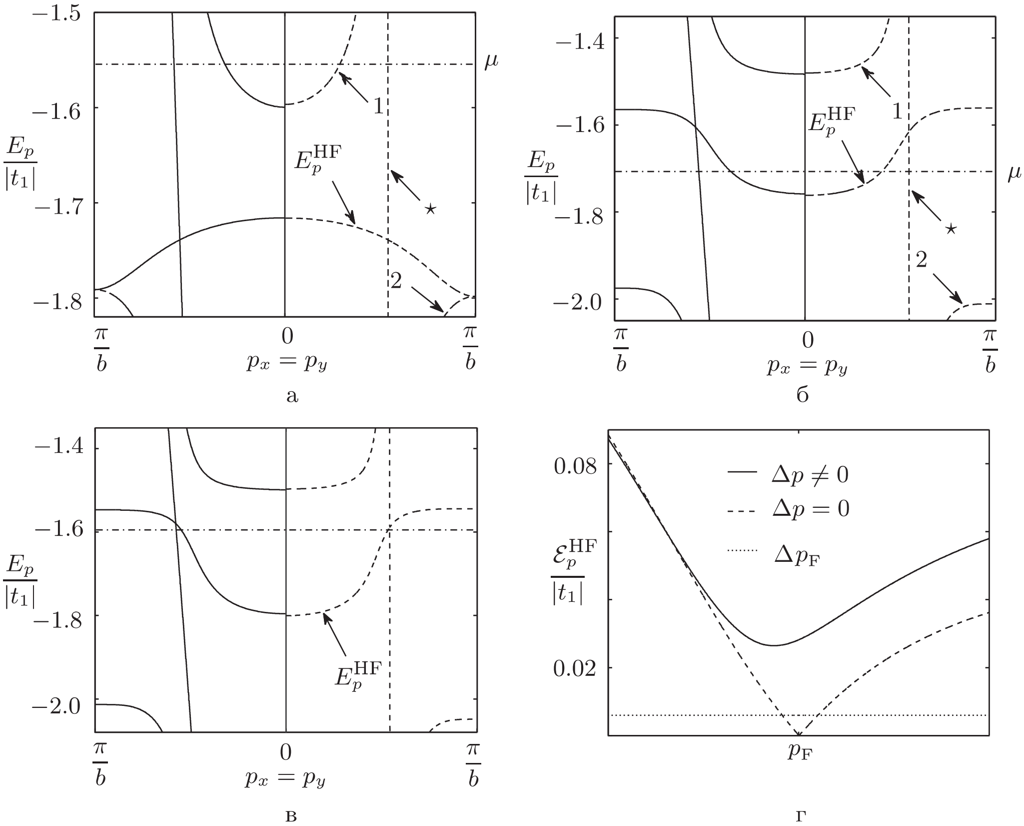

Рис. 2. Спектр зоны тяжелых фермионов E_p^{HF} ПМА: нормальная парамагнитная фаза $n_{\mathrm{e}} = 1.4$ (а), нормальная антиферромагнитная фаза $n_{\mathrm{e}} = 1.2$ (б); параметры на верхних графиках те же, что и на рис. 1а, 1б соответственно. Также приведены фаза сосуществования СП и АФМ $n_{\mathrm{e}} = 1.35$, $R = 0.411$, $\Delta_0^d = 0.00514$, $n_{\mathrm{L}} = 0.871$, $\mu = -1.595$ (в) и спектр элементарных возбуждений в фазе сосуществования (г).

где

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

$$\mathcal{E}_p^{\mathrm{AFM}} = |(1 - \alpha\gamma_p)E_J - \mu| - \lambda_p, \qquad \lambda_p = \sqrt{(\alpha^2 - R^2)\Gamma_p^2\gamma_p^2 + (\gamma_p E_J + 2J)^2 R^2}.$$

Нетрудно показать, что истинный СПП имеет вид $\Psi_p = \sqrt{\zeta_p}\Delta_p$. Однако переход из сверхпроводящей в нормальную фазу по-прежнему определяется условием $\Delta_p = 0$. В этом случае величина Δ_p может определяться как СПП, но она не соответствует реальному размеру щели в спектре.

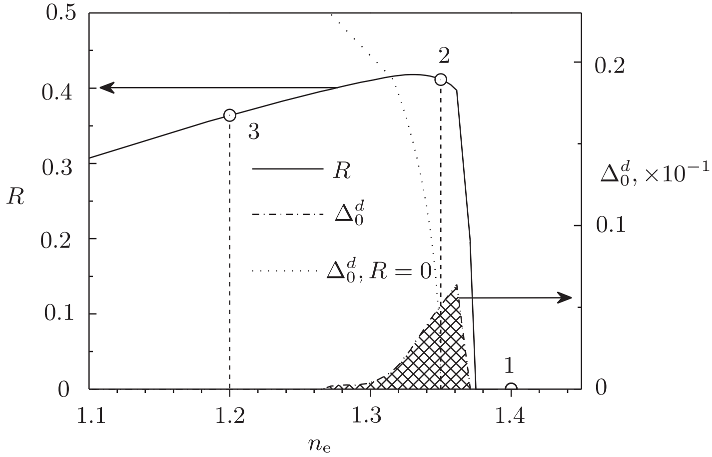

Рис. 3. Зависимость намагниченности подрешетки R и амплитуды сверхпроводящего параметра порядка Δ_0^d от полной концентрации n_e носителей в системе. Параметры модели выбраны как $J = 0.2$, $V_0 = 0.6$, $E_0 = -1.5$.

Как отмечалось выше, приближенное выражение (15) отвечает спектру зоны тяжелых фермионов, эффективная масса которых превышает массу блоховских электронов в решетке. Существенно, что для реализации дальнего антиферромагнитного порядка и СП химический потенциал должен лежать в слабодисперсной зоне тяжелых фермионов. Поэтому антиферромагнитные и сверхпроводящие характеристики системы определяются именно тяжелыми фермионами. Для оценки эффективной массы новых квазичастиц разложим спектр (15) в окрестности точки $(p_x, p_y) = (0, 0)$. Тогда масса тяжелых фермионов, энергетические зоны E_p^{HF} которых представлены на рис. 2а–2в, задается вблизи дна зоны следующим выражением:

$$\frac{m_{\text{HF}}}{m_0} = \frac{\Gamma_0^2 - E_J^2}{|\Gamma_0|\gamma_0}\left(2\alpha|E_J| - \frac{(\alpha^2 - R^2)\Gamma_0^2\gamma_0 + (\alpha^2 + R^2)E_J^2\gamma_0 - J_0R^2|E_J|}{\lambda_0}\right)^{-1}, \qquad (16)$$

где $m_0 = \hbar^2/|t_1|b^2$ – масса блоховского электрона на квадратной решетке. Величины Γ_0, γ_0 получаются из известных Γ_p, γ_p при $p_x = 0, p_y = 0$. Подобная методика, но в рамках слейв-бозонного представления была применена в работе [40] для оценки массы тяжелых фермионов антиферромагнитных интерметаллидов при учете скоса антиферромагнитных подрешеток.

6. СОСУЩЕСТВОВАНИЕ СП И АФМ В ТФ-СИСТЕМАХ

Изменение типа основного состояния ПМА (при нулевой температуре) в зависимости от полной концентрации n_e носителей в системе представлено на рис. 3 при фиксированных параметрах $J = 0.2$, $V_0 = 0.6$, $E_0 = -1.5$. Сплошной линией показана намагниченность подрешетки R (левая шкала), штрихпунктирной – амплитуда Δ_0^d аномальных спариваний, соответствующих d-типу симметрии (правая шкала). Результаты расчета Δ_0^d при нулевой намагниченности приведены для сравнения и изображены пунктирной линией. Цифрами 1, 2, 3 на графике обозначены состояния, энергетическая структура которых представлена на рис. 2а, 2б, 2в соответственно. Видно, что для зависимости намагниченности и амплитуды СПП от концентрации существенным является положение химического потенциала относительно зоны тяжелых фермионов.

Качественно картина заключается в следующем. При увеличении числа электронов за счет заполнения локализованного уровня в системе индуцируется дальний антиферромагнитный порядок. Однако последующее увеличение концентрации приводит к резкому подавлению АФМ. Это связано с тем, что уровень становится почти заполненным и добавляемые новые электроны формируют коллективизированную подсистему. Усиление гибридизационных процессов в таком случае является фактором, который отвечает за разрушение АФМ. Как показано на рис. 3, вблизи перехода из антиферромагнитной фазы в парамагнитную в системе реализуется куперовская неустойчивость. Это приводит к возникновению фазы сосуществования СП и АФМ. Заштрихованная область на рис. 3 определяет значения концентраций, при которых куперовская неустойчивость и дальний антиферромагнитный порядок сосуществуют.

Отметим, что в настоящем рассмотрении фазы ограничены не величиной температуры, а значениями концентраций. Наличие дальнего антиферромагнитного порядка в подсистеме локализованных хаббардовских фермионов может индуцировать сверхпроводящие спаривания. Это следует из того, что увеличение или уменьшение намагниченности приводит к аналогичному поведению амплитуды Δ_0^d. К тому же куперовская неустойчивость становится характерной для значений концентрации, при которых она не проявляется, если не учитывать существования в системе антиферромагнитного упорядочения. С другой стороны, интенсивность аномальных спариваний при наличии АФМ существенно уменьшается.

Увеличение энергии локализованных состояний E_0 при фиксированной концентрации $n_{\mathrm{e}} = 1.2$ и тех же параметрах J и V_0, что и на рис. 3, также приводит к разрушению антиферромагнитного упорядочения (см. рис. 4а). В данном случае это связано с тем, что, по мере того как локализованный уровень движется вверх по энергетической зоне, уменьшается заселенность локализованных состояний. При выбранных параметрах ПМА сверхпроводящее и антиферромагнитное упорядочения являются конкурирующими явлениями. На рис. 4а этот факт находит свое отражение в том, что максимум СПП достигается в точке падения намагниченности до нуля.

Хотя фаза сосуществования СП и АФМ реализуется, амплитуда СПП существенно ниже при конкуренции с дальним антиферромагнитным порядком. Описанная зависимость параметров порядка от энергии E_0 связана с экспериментальными исследованиями систем с тяжелыми фермионами. Например, упомянутое выше соединение $\mathrm{CeRhIn_5}$ при атмосферном давлении является антиферромагнетиком с температурой Нееля $T_{\mathrm{N}} = 3.8\,\mathrm{K}$ [41]. Под действием давления температура Нееля образца сначала слабо уменьшается, а затем, при критическом давлении $P_{\mathrm{c}} = 1.75\,\text{ГПа}$, дальний антиферромагнитный порядок полностью разрушается [15]. Предположительно это происходит путем фазового перехода первого рода, который при нулевой температуре является квантовым фазовым переходом. В области давлений, меньших чем критическое P_{c}, реализуется фаза сосуществования СП и АФМ [16]. При давлениях выше критического в экспериментах обнаружена чистая сверхпроводящая фаза.

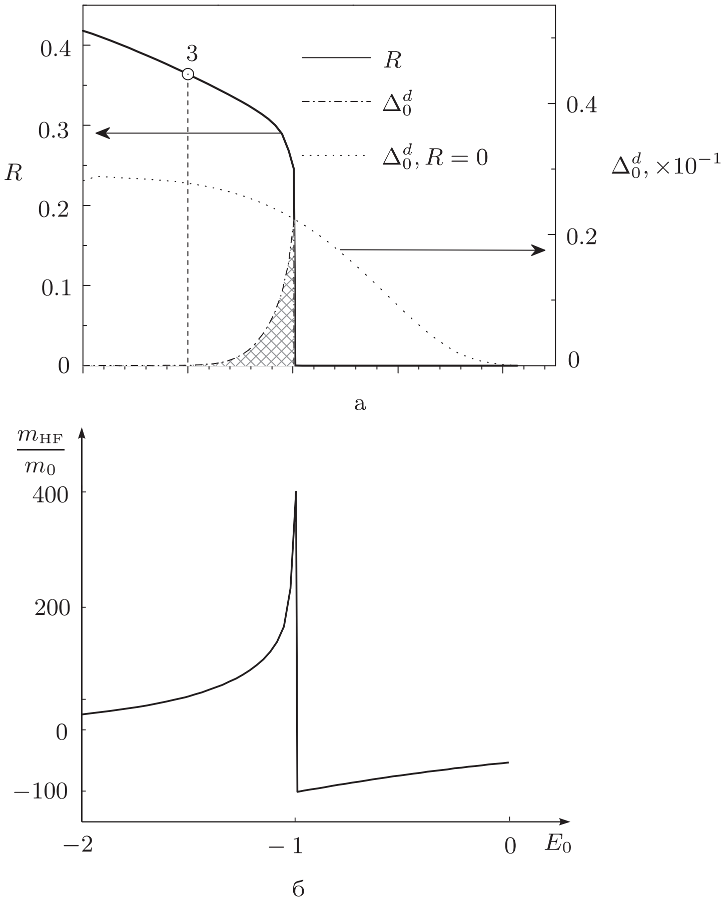

Рис. 4. Зависимость намагниченности подрешетки R и амплитуды сверхпроводящего параметра порядка Δ_0^d от энергии локализованных состояний E_0 (а). Зависимость эффективной массы тяжелых квазичастиц, нормированной на массу блоховского электрона, от энергии E_0 (б).

Описанным исследованиям качественно соответствует картина, представленная на рис. 4а. При этом роль основного параметра, который изменяется под воздействием внешнего гидростатического давления, играет энергия локализованных электронов E_0. Механизм увеличения энергии E_0 при росте давления достаточно прост. Известно, что церий входит в состав соединения $CeRhIn_5$ как ион Ce^{3+}, поэтому область вокруг иона обладает большим суммарным положительным зарядом. В силу условия электронейтральности ближайшее окружение обладает эффективно отрицательным зарядом. Сближение под действием давления иона церия с ближайшим окружением вызывает возрастание энергии 4f-электрона, находящегося на нем, за счет кулоновского взаимодействия. Отметим также, что возрастание давления может приводить, вообще говоря, к изменениям амплитуды перескока электронов между узлами t_{ml} и параметра гибридизации V_{ml} [22]. В нашем рассмотрении предполагается, что изменение этих параметров при изменении давления вносит меньший вклад в формирование определенного типа основного состояния.

Важной характеристикой ТФ-систем является эффективная масса локализованных квазичастиц. Отношение эффективной массы локализованных квазичастиц в ПМА к массе коллективизированных электронов в приближении параболической зоны можно оценить по формуле (16). Зависимость этой величины от энергии локализованного уровня представлена на рис. 4б. При разрушении антиферромагнитного порядка масса (16) становится отрицательной. В таком случае говорят о переходе к дырочному типу тяжелых квазичастиц [40]. В каждой точке графика значения параметров порядка пересчитывались в соответствии с диаграммой основного состояния, представленной на рис. 4а. Видно, что по мере разрушения антиферромагнитного порядка, при увеличении E_0, эффективная масса растет. При этом в критической точке ($E_0 \approx -1$), выше которой намагниченность подрешетки равна нулю, эффективная масса демонстрирует поведение, похожее на расходимость. При переходе через критическую точку в парамагнитную область значение эффективной массы резко падает и в дальнейшем уменьшается по модулю.

На основе серии экспериментов, проведенных для соединения $\mathrm{CeRhIn_5}$, было показано увеличение массы электронов под действием внешнего давления [42], [43]. Так, при атмосферном давлении было зафиксировано, что циклотронная масса электронов превышает в 5.5 раза массу свободного электрона [42]. При критическом давлении это отношение могло достигать значения $m_\mathrm{c}/m_0 = 100$. Отметим, что в приближении параболической зоны эффективная и циклотронная массы электронов эквивалентны. Значения эффективной массы на рис. 4б, хоть и превышают значения циклотронной массы, качественно правильно отражают экспериментальную зависимость массы от давления. Отметим, что увеличение эффективной массы фермионов в описываемых системах связано с переходом из антиферромагнитной фазы в парамагнитную и с уменьшением ширины зоны тяжелых фермионов.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное исследование показало, что наличие обменной связи в подсистеме локализованных фермионов и гибридизационного взаимодействия между локализованными и коллективизированными электронами является достаточным для реализации антиферромагнитной фазы, сверхпроводящей фазы, а также фазы сосуществования СП и АФМ. Роль контрольного параметра, определяющего фазовый переход в упорядоченное состояние при заданной суммарной концентрации электронов, играет положение затравочного энергетического уровня локализованных электронов относительно дна зоны проводимости. Предположение об изменении этого параметра при возрастании внешнего давления лежит в основе интерпретации экспериментально наблюдаемой модификации структуры основного состояния тяжелофермионного соединения $\mathrm{CeRhIn_5}$ в результате квантового фазового перехода.

На диаграмме состояний системы имеется значение контрольного параметра, в окрестности которого реализуется фаза сосуществования СП и АФМ. Приближение к критическому значению контрольного параметра со стороны низких температур сопровождается быстрым разрушением дальнего антиферромагнитного упорядочения с одновременным возрастанием СПП. Наличие дальнего антиферромагнитного упорядочения проявляется как в сильном подавлении амплитуды аномальных куперовских средних, так и в модификации фермиевского энергетического спектра. В результате величина сверхпроводящей щели определяется не только амплитудой аномальных средних, но и значением намагниченности антиферромагнитной подрешетки. Это означает, что ренормировка сверхпроводящей щели в фазе сосуществования СП и АФМ идет по двум каналам: первый из них связан с дальним магнитным порядком, а второй – с модификацией спектра фермиевских возбуждений.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН “Квантовые мезоскопические и неупорядоченные структуры”, РФФИ (гранты № 10-02-00251, 11-02-98007-РФФИ-Сибирь) и Министерства образования и науки РФ (соглашение 14.132.21.1410).

Список литературы

[1] P. W. Anderson, *Science*, **235**:4793 (1987), 1196–1198.

[2] N. M. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors. Experiment, Theory, and Applications*, Springer Series in Solid-State Sciences, **166**, Springer, Heidelberg, Berlin, 2010.

[3] Н. Е. Алексеевский, Д. И. Хомский, *УФН*, **147**:4 (1985), 767–779.

[4] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.*, **56**:4 (1987), 755–787.

[5] D. M. Newns, H. Read, *Adv. Phys.*, **36**:6 (1987), 799–849.

[6] В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, Изд-во СО РАН, Новосибирск, 2001.

[7] K. Miyake, S. Schmitt-Rink, C. M. Varma, *Phys. Rev. B*, **34**:9 (1986), 6554–6556.

[8] Р. О. Зайцев, В. А. Иванов, *ФТТ*, **29** (1987), 2554–2556.

[9] Ю. А. Изюмов, *УФН*, **161**:11 (1991), 1–46.

[10] С. В. Вонсовский, М. С. Свирский, *ЖЭТФ*, **46**:5 (1964), 1619–1631.

[11] А. И. Буздин, Л. Н. Булаевский, *УФН*, **149**:1 (1986), 45–67.

[12] S. M. Hayden, L. Taillefer, C. Vettier, J. Flouquet, *Phys. Rev. B*, **46**:13 (1992), 8675–8678.

[13] R. Caspary, P. Hellmann, M. Keller, G. Sparn, C. Wassiew, R. Köhler, C. Geibel, C. Schank, F. Steglich, N. E. Phillips, *Phys. Rev. Lett.*, **71**:13 (1993), 2146–2149.

[14] G. Zwicknagl, A. N. Yaresko, P. Fulde, *Phys. Rev. B*, **65**:8 (2002), 081103, 4 pp.

[15] T. Park, J. D. Thompson, *New J. Phys.*, **11** (2009), 055062, 17 pp., arXiv: 0908.2404.

[16] T. Mito, S. Kawasaki, Y. Kawasaki, G.-Q. Zheng, Y. Kitaoka, D. Aoki, Y. Haga, Y. Ōnuki, *Phys. Rev. Lett.*, **90**:7 (2003), 077004, 4 pp., arXiv: cond-mat/0211576.

[17] Ю. А. Изюмов, Н. М. Плакида, Ю. Н. Скрябин, *УФН*, **159**:4 (1989), 621–663.

[18] H. Mukuda, Y. Yamaguchi, S. Shimizu, Y. Kitaoka, P. Shirage, A. Iyo, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **77**:12 (2008), 124706, 7 pp., arXiv: 0810.0880.

[19] S. Shimizu, S. Tabata, H. Mukuda, Y. Kitaoka, P. M. Shirage, H. Kito, A. Iyo, *Phys. Soc. Jpn.*, **80** (2011), 043706, 4 pp., arXiv: 1102.5282.

[20] A. N. Lavrov, L. P. Kozeeva, M. R. Trunin, V. N. Zverev, *Phys. Rev. B*, **79**:21 (2009), 214523, 6 pp.

[21] М. Мейпл, Э. Фишер (ред.), *Сверхпроводимость в тройных соединениях*, Мир, М., 1985.

[22] P. D. Sacramento, *J. Phys.*, **15**:36 (2003), 6285–6300.

[23] J. V. Alvarez, *Phys. Rev. Lett.*, **98**:12 (2007), 126406.

[24] C. M. Varma, W. Webber, L. J. Randall, *Phys. Rev. B*, **33**:2 (1986), 1015–1019.

[25] H. Tsunetsugu, M. Sigrist, K. Ueda, *Rev. Mod. Phys.*, **69**:3 (1997), 809–863.

[26] В. А. Москаленко, *ТМФ*, **116**:3 (1998), 456–473.

[27] В. А. Москаленко, *ТМФ*, **110**:2 (1997), 308–322.
[28] В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, *ТМФ*, **157**:2 (2008), 235–249.
[29] В. В. Вальков, А. О. Злотников, *Изв. РАН. Сер. физ.*, **75**:5 (2011), 682–684.
[30] Н. Н. Боголюбов, *Собрание научных трудов в двенадцати томах. Статистическая механика*, т. 6: *Равновесная статистическая механика*. 1945–1986, Наука, М., 2006.
[31] Д. Н. Зубарев, *УФН*, **71**:1 (1960), 71–116.
[32] Н. М. Плакида, *ТМФ*, **5**:1 (1970), 147–153.
[33] Н. М. Плакида, *ТМФ*, **154**:1 (2008), 129–146.
[34] R. Zwanzig, *Phys. Rev.*, **124**:4 (1961), 983–992.
[35] H. Mori, *Prog. Theor. Phys.*, **33**:3 (1965), 423–455.
[36] Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ*, **68**:1 (1975), 207–215.
[37] Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ*, **70**:3 (1976), 1100–1111.
[38] T. Park, E. D. Bauer, J. D. Thompson, *Phys. Rev. Lett.*, **101**:17 (2008), 177002, arXiv: 0806.3308.
[39] В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, *ТМФ*, **162**:1 (2010), 125–149.
[40] В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, *ЖЭТФ*, **137**:2 (2010), 341–360.
[41] H. Hegger, C. Petrovich, E. G. Moshopoulou, M. F. Hundley, J. L. Sarrao, Z. Fisk, J. D. Thompson, *Phys. Rev. Lett.*, **84**:21 (2000), 4986–4989.
[42] H. Shishido, R. Settai, H. Harima, Y. Ōnuki, *J. Phys. Soc. Jap.*, **74**:4 (2005), 1103–1106.
[43] G. Knebel, D. Aoki, J.-P. Brison, J. Flouquet, *J. Phys. Soc. Jap.*, **77**:11 (2008), 114704, 14 pp., arXiv: 0808.3687.

Поступила в редакцию 9.06.2012