

УДК 538.945 537.611.45 544.015.4;54-19

## ЭФФЕКТИВНАЯ ТЕМПЕРАТУРНАЯ МАТРИЦА РАССЕЯНИЯ И КИНЕМАТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ КУПЕРОВСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ

© 2015 г. В. В. Вальков<sup>1</sup>, А. О. Злотников<sup>1</sup>, Т. А. Валькова<sup>2</sup>

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

Для периодической модели Андерсона, посредством суммирования по коллективизированным переменным в диаграммном ряду теории возмущений, получена эффективная температурная матрица рассеяния для локализованной подсистемы. Возникающее при этом эффективное взаимодействие может приводить к антиферромагнитной фазе, сверхпроводящей фазе, а также к фазе сосуществования сверхпроводимости и антиферромагнетизма, наблюдаемой в тяжелофермионных интерметаллидах.

DOI: 10.7868/S0367676515060381

### ВВЕДЕНИЕ

Активное изучение фазы сосуществования сверхпроводимости и антиферромагнетизма (SC + AFM) обусловлено открытием ряда редкоземельных тяжелофермионных интерметаллидов, в которых такое состояние наблюдается [1]. Фаза SC + AFM, индуцированная приложением внешнего давления, реализуется в цериевых интерметаллидах, таких как CeIn<sub>3</sub>, CeRhIn<sub>5</sub>, CePt<sub>2</sub>In<sub>7</sub> (группа Ce<sub>n</sub>T<sub>m</sub>In<sub>3n+2m</sub> [2]). В последнее время экспериментальные исследования CeRhIn<sub>5</sub> привели к постановке вопросов, касающихся фундаментальных основ электронного строения тяжелофермионных систем.

При атмосферном давлении CeRhIn<sub>5</sub> является антиферромагнетиком с температурой Нееля 3.8 К [3]. Приложение внешнего давления к образцу приводит к понижению температуры Нееля, что свидетельствует о подавлении дальнего антиферромагнитного (AFM) порядка. В области давлений, когда AFM-порядок значительно подавлен, понижение температуры сопровождается возникновением сверхпроводящего состояния (SC) [4]. Ряд экспериментов по ЯКР и дифракции нейтронов показывают, что в CeRhIn<sub>5</sub> вплоть до критического давления, при котором происходит разрушение AFM, реализуется микроскопически однородная фаза SC + AFM [5, 6].

Наиболее вероятным нефононным механизмом SC в тяжелофермионных системах является магнитный механизм, обусловленный взаимодействием магнитной природы, а также спиновыми флуктуациями [7, 8]. Альтернативные нефононные механизмы непосредственно связаны с флуктуациями немагнитной природы в окрестности квантовой критической точки. Так, например, в [9] высказывалось предположение о том, что появление куперовской неустойчивости связано с валентными флуктуациями. Недавно была продемонстрирована возможность куперовского спаривания в окрестности локальной квантовой критической точки, в которой происходит нарушение режима Кондо [10].

При микроскопическом описании магнетизма тяжелофермионных систем часто используют модель решетки Кондо [11], которая хорошо описывает ситуацию, когда локализованный  $f$ -уровень лежит далеко от уровня Ферми. В режиме смешанной валентности, который обычно реализуется в цериевых соединениях,  $f$ -уровень и уровень Ферми близки друг к другу. В этом случае минимальной микроскопической моделью является периодическая модель Андерсона (ПМА).

Известно, что преобразование Шриффера–Вольфа, часто используемое для получения эффективного обменного взаимодействия, не может быть применено к гамильтониану ПМА, если система находится в режиме смешанной валентности [12]. В то же время обменное взаимодействие между локализованными электронами может быть индуцировано за счет высокоэнергетических гибридных процессов [13]. Возникающее обменное взаимодействие выступает в качестве механизма куперовского спаривания и реализации фазы SC + AFM в тяжелофермионных системах

<sup>1</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики имени Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, Красноярск.

<sup>2</sup> Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования “Сибирский федеральный университет”, Красноярск.

[14, 15]. Такой подход позволил качественно описать фазовые переходы, наблюдаемые в  $\text{CeRhIn}_5$  при низких температурах с ростом давления.

В настоящей работе развивается более общий подход, связанный с получением эффективной температурной матрицы рассеяния для квазилокализованной подсистемы и позволяющий рассмотреть кинематический механизм формирования AFM-фазы, фазы SC и фазы SC + AFM для цериевых интерметаллидов.

Следует отметить, что температура возникновения AFM-упорядочения в рассматриваемых соединениях не превышает нескольких градусов К. При этом температура возникновения SC имеет тот же порядок. В этой связи предполагается, что оба упорядочения индуцируются одним и тем же взаимодействием. При учете гибридизации теория среднего обменного поля приводит к довольно высоким значениям критической температуры для AFM-фазы [16]. Предложенный в данной работе метод позволяет построить в низкотемпературной области спин-волновую теорию антиферромагнетизма при учете гибридизационных процессов между коллективизированной и локализованной электронными подсистемами. Вычисление температурной матрицы рассеяния основано на применении диаграммной техники в атомном представлении с введением операторов Хаббарда [17, 18].

Ранее для построения теории возмущений в рамках ПМА использовали метод разложения функций Грина по семиинвариантам [19] и метод кумулянтов Кубо [20]. В работе [21] методом диаграммной техники в атомном представлении в обобщенном приближении хаотических фаз [22] была вычислена динамическая магнитная восприимчивость парамагнитной фазы ПМА.

## МОДЕЛЬ

В двухподрешеточном представлении гамильтониан ПМА может быть записан в виде

$$H = H_0 + H_{mix}, \quad (1)$$

где оператор  $H_0$  учитывает невзаимодействующие между собой подсистемы локализованных и коллективизированных электронов:

$$H_0 = \sum_{p\sigma} [(\varepsilon_{\alpha p\sigma} - \mu)\alpha_{p\sigma}^\dagger \alpha_{p\sigma} + (\varepsilon_{\beta p\sigma} - \mu)\beta_{p\sigma}^\dagger \beta_{p\sigma}] + \sum_{f\sigma} (E_0 - \mu)d_{f\sigma}^\dagger d_{f\sigma} + \sum_f U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} + \sum_{g\sigma} (E_0 - \mu)d_{g\sigma}^\dagger d_{g\sigma} + \sum_g U n_{g\uparrow} n_{g\downarrow}, \quad (2)$$

а оператор  $H_{mix}$  учитывает гибридизационные процессы между двумя группами электронов:

$$H_{mix} = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{p f \sigma} e^{-i p f} \frac{1}{\sqrt{2}} [(V_p + W_p)\alpha_{p\sigma}^\dagger d_{f\sigma} + (W_p - V_p)\beta_{p\sigma}^\dagger d_{f\sigma}] + \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{p g \sigma} e^{-i p g} \frac{1}{\sqrt{2}} [(V_p + W_p) \times \alpha_{p\sigma}^\dagger d_{g\sigma} + (V_p - W_p)\beta_{p\sigma}^\dagger d_{g\sigma}] + h.c. \quad (3)$$

Здесь  $\alpha_{p\sigma}$  и  $\beta_{p\sigma}$  — операторы уничтожения коллективизированных электронов с квазиимпульсом  $p$  и проекцией спина  $\sigma$  в первой и во второй AFM-зонах с энергиями  $\varepsilon_{\alpha p\sigma}$  и  $\varepsilon_{\beta p\sigma}$  соответственно,  $\mu$  — химпотенциал системы,  $d_{f\sigma}$  ( $d_{g\sigma}$ ) — оператор уничтожения электрона на локализованном узле  $f$  ( $g$ ), относящемся к  $F$  ( $G$ ) подрешетке,  $E_0$  — энергия локализованного уровня,  $n_{f\sigma} = d_{f\sigma}^\dagger d_{f\sigma}$  — оператор числа локализованных электронов на узле  $f$  с проекцией спина  $\sigma$ ,  $U$  — параметр одноузельного кулоновского взаимодействия между локализованными электронами. В слагаемом  $H_{mix}$  величины  $V_p$  и  $W_p$  обозначают фурье-образы матричных элементов гибридизации, относящихся к одной подрешетке и к разным подрешеткам соответственно,  $N$  — полное число узлов в двух подрешетках.

## ТЕМПЕРАТУРНАЯ МАТРИЦА РАССЕЯНИЯ ДЛЯ КВАЗИЛОКАЛИЗОВАННОЙ ПОДСИСТЕМЫ

Для вычисления свойств нормальной и SC-фаз с AFM-упорядочением применим мацубаровские функции Грина, построенные с помощью операторов Хаббарда

$$D_{\lambda\nu}(l\tau, l'\tau') = -\langle T_\tau X_l^\lambda(\tau) X_{l'}^{\nu\dagger}(\tau') S(1/T) \rangle_{0, \text{св}}, \quad (4)$$

где

$$S(1/T) = T_\tau \exp\left(-\int_0^{1/T} H_{mix}(\tau) d\tau\right). \quad (5)$$

В этих выражениях временная зависимость операторов связана с тем, что они берутся в представлении взаимодействия. При этом усреднение проводится с исходным нулевым гамильтонианом. Символы  $\lambda, \nu$  определяют корневые векторы для операторов Хаббарда,  $T$  — температура. Размерность корневого вектора совпадает с размерностью базиса атомных состояний, а  $n$ -компонента корневого вектора записывается в простом универсальном виде  $\lambda_n(r, t) = \delta_{nr} - \delta_{nt}$  [18].

Для введенных функций Грина суммирование по степеням свободы, соответствующим коллективизированной подсистеме, можно провести яв-

но и получить эффективную температурную матрицу рассеяния

$$\tilde{S}(1/T) = T_\tau \exp \left\{ - \int_0^{1/T} d\tau_1 \int_0^{1/T} d\tau_2 \sum_{p\sigma} \sum_{ijr=1}^2 [Z_{p\sigma}^+(\tau_1)]_i \times \right. \\ \left. \times (\hat{V}_p^+)_{ij} G_{j\sigma}(p, \tau_1 - \tau_2) (\hat{V}_p)_{jr} [Z_{p\sigma}(\tau_2)]_r \right\},$$

где операторы  $[Z_{p\sigma}(\tau)]_i$  определяются выражениями

$$[Z_{p\sigma}(\tau)]_1 = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_f e^{-ipf} d_{f\sigma}(\tau),$$

$$[Z_{p\sigma}(\tau)]_2 = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_g e^{-ipg} d_{g\sigma}(\tau),$$

матрица  $\hat{V}_p$  имеет следующий вид:

$$\hat{V}_p = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} V_p + W_p & V_p + W_p \\ W_p - V_p & V_p - W_p \end{pmatrix},$$

а  $G_{j\sigma}(p, \tau_1 - \tau_2)$  – затравочные функции Грина для коллективизированных электронов.

Построение эффективной матрицы рассеяния позволяет упростить вычисление локализованных функций Грина, поскольку имеет место равенство

$$D_{\lambda\nu}(l\tau, l'\tau') = - \left\langle T_\tau X_l^\lambda(\tau) X_{l'}^{-\nu}(\tau') S(1/T) \right\rangle_0 = \\ = - \left\langle T_\tau X_l^\lambda(\tau) X_{l'}^{-\nu}(\tau') \tilde{S}(1/T) \right\rangle_{0, \text{лок}}.$$

В итоге операция усреднения осуществляется при учете только нулевого гамильтониана локализованной подсистемы. При этом структура эффективного гамильтониана приобретает вид гамильтониана Хаббарда. В этом случае кинематический механизм, обусловленный нефермиевским характером коммутационных соотношений операторов Хаббарда, индуцирует как AFM-упорядочение, так и куперовское спаривание при наличии дальнего AFM-порядка. Возникающая при этом зависимость эффективных параметров от мацубаровских переменных описывает эффекты запаздывания и проявляется в ренормировке энергетических параметров.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для периодической модели Андерсона в результате суммирования под знаком среднего в каждом порядке теории возмущений по динамическим переменным, относящимся к коллективизированной подсистеме, проведена точная перегруппировка диаграммного ряда. В результате вычисление функций Грина для квазилокализованной подсистемы сводится к вычислению этих функций для эффективного гамильтониана Хаббарда. Это обстоятельство определяет кинематический механизм формирования антиферромагнетизма, сверхпроводимости, а также фазы сосуществования сверхпроводимости и антиферромагнетизма в цериевых тяжелофермионных интерметаллидах.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Программы Президиума РАН № 20.7, фонда РФФИ (грант № 13-02-00523 и региональный грант Сибирь 13-02-98013). Один из авторов (А.О.З.) также благодарит за поддержку по стипендии Президента РФ СП-1370.2015.5.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Pfleiderer C.* // Rev. Mod. Phys. 2009. V. 81. P. 1551.
2. *Thompson J.D., Fisk Z.* // J. Phys. Soc. Jpn. 2012. V. 81. 011002.
3. *Hegger H., Petrovic C., Moshopoulou E.G.* // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 84. P. 4986.
4. *Park T., Sarrao J.L., Thompson J.D.* // J. Magn. Magn. Matter. 2007. V. 310. P. 712.
5. *Kawasaki S., Yashima M., Mito T.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2005. V. 17. P. S889.
6. *Llobet A., Gardner J.S., Moshopoulou E.G.* // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. 024403.
7. *Miyake K., Schmitt-Rink S., Varma C.M.* // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. P. 6554.
8. *Monthoux P., Lonzarich G.G.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 63. 054529.
9. *Miyake K., Watanabe Sh.* // J. Phys. Soc. Jpn. 2014. V. 83. 061006.
10. *Pixley J.H., Deng L., Ingersent K., Si Q.* // arXiv:1308.0839v2 [cond-mat.str-el] 2013.
11. *Doniach S.* // Physica B. 1977. V. 91. P. 231.
12. *Zhou L.-J., Zheng Q.-Q.* // J. Magn. Magn. Matter. 1992. V. 109. P. 237.
13. *Вальков В.В., Дзедзисавили Д.М.* // Теорет. и мат. физика. 2003. Т. 157. С. 235.
14. *Вальков В.В., Злотников А.О.* // Письма в ЖЭТФ. 2012. Т. 95. С. 390.
15. *Val'kov V.V., Zlotnikov A.O.* // J. Supercond. Nov. Magn. 2013. V. 26. P. 2885.
16. *Sacramento P.D.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2013. V. 15. P. 6285.
17. *Зайцев Р.О.* Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и магнетизма, М.: Едиториал УРСС, 2004. 175 с.
18. *Вальков В.В., Овчинников С.Г.* Квазичастицы в сильно коррелированных системах, Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001. 277 с.
19. *Барабанов А.Ф., Кикоин К.А., Максимов Л.А.* // Теорет. и мат. физика. 1974. Т. 20. С. 364.
20. *Москаленко В.А.* // Теорет. и мат. физика. 1997. Т. 110. С. 308.
21. *Вальков В.В., Дзедзисавили Д.М.* // Теорет. и мат. физика. 2010. Т. 164. С. 309.
22. *Izyumov Yu.A., Letfulov B. M., Shipitsyn E.V.* // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P. 15697.